



Universitetet
i Stavanger

DET TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE FAKULTET

MASTEROPPGAVE

Studieprogram/spesialisering:

Master i realfag – integrert
lærerutdanningsprogram

Høst semesteret, 2011

Åpen / ~~Konfidensiell~~

Forfatter:

Ida Maria Ous

.....*Ida Maria Ous*.....
(signatur forfatter)

Fagansvarlig:

Gunnar Thorkildsen

Veileder(e):

Gunnar Thorkildsen

Tittel på masteroppgaven:

Røntgendiffraksjon. Darwins dynamiske teori for refleksjonsgeometri.

Engelsk tittel:

X-Ray Diffraction. Darwin's dynamical theory of diffraction in the reflection geometry.

Studiepoeng: 30sp

Emneord:

Røntgendiffraksjon

Refleksjonsgeometri

Symmetrisk Bragg geometri

Asymmetrisk Bragg geometri

Takagi teori

Sidetall: 108

+ vedlegg/annet:

Stavanger, 08.januar 2012.
dato/år

UNIVERSITETET I STAVANGER



MASTEROPPGAVE 2011

**Røntgendiffraksjon.
Darwins dynamiske teori for
refleksjonsgeometri.**

Ida Maria Ous

6. januar 2012

Sammendrag

Temaet for masteroppgaven er “Elementer i dynamisk teori for røntgendiffraksjon”. Oppgaven har utgangspunkt i C. G. Darwins to artikler fra 1914 og hatt som mål å gå igjennom disse på en pedagogisk måte. Det er lagt vekt på å bruke dagens krystallografiske språk for at det skal være mulig å sammenligne Darwins bidrag med andres arbeider innenfor dynamisk røntgendiffraksjon.

Oppgaven innledes med en gjennomgang av sentrale ord og begreper knyttet til krystaller og røntgendiffraksjon. Dette gir grunnlaget for å forstå innholdet i Darwins artikler.

Darwins første artikkel er hovedsaklig en kinematisk teori for røntgendiffraksjon. Darwin var ikke fornøyd med samsvaret mellom eksperimenter og teori og kommer derfor med en oppfølgende artikkel samme året.

Darwins andre artikkel er en dynamisk teori for røntgendiffraksjon. Darwin beregnet forholdet mellom intensiteten til den totale spredte strålingen og intensiteten til den innkommende strålingen. Han tok ikke hensyn til absorpsjon i planene og at planene kan være skråstilte. Dette er inkludert i masteroppgaven. Kurvene for intensitetsforholdet gir da et bedre samsvar med observasjoner som er gjort. Masteroppgaven inneholder også matematiske programmer gjort i Mathematica 8.0 som beregner intensitetsforholdet mellom den innkommende strålen og den reflekterte.

Oppgaven avsluttes med en kort gjennomgang av Takagi teori og viser hvordan man kommer fram til den generelle differentialligningen for amplituden til forskyvningsfeltet. Denne ligningen kan studeres nærmere og det kan lages et program i Mathematica 8.0 som framviser dispersjonsflater. Det kan også vises, at Takagi teori tilsvarer fundamentalteorien for perfekte krystaller.

Innhold

Sammendrag	2
Forord	6
Innledning	8
I Sentrale elementer innen røtgendiffraksjon	11
1 Grunnleggende definisjoner	13
1.1 Krystaller	15
1.2 Røntgenstråling	18
1.3 Diffraksjonsgeometri	20
1.4 Elektromagnetisk vekselvirkning	23
1.5 Kinematisk teori	28
1.6 Dynamisk teori	31
2 Darwin I: Innføring i notasjon og begrep	35
2.1 Beregninger for et enkelt plan	36
2.1.1 Bølge spredt av et plan	36
2.1.2 Refleksjonskoeffisient	39
2.1.3 Brytningsindeks	41
2.2 Beregninger for flere plan	44
2.2.1 Resultantamplitude	44
2.2.2 Intensitet og effekt til strålingen	48
II Darwins dynamiske teori i refleksjonsgeometri	49
3 Darwin II: Symmetrisk refleksjon i Bragg geometri	51
3.1 Kombinasjon av plan	51

3.2	Spredning i plan uten absorpsjon	59
3.2.1	Grafisk framstilling av I_h/I_0 som funksjon av $\Delta\theta$	61
3.3	Spredning i plan med absorpsjon	62
3.3.1	Darwins bidrag	62
3.3.2	Prins-metoden	62
3.3.3	Grafisk framstilling av I_h/I_0 som funksjon av $\Delta\theta$ med absorpsjon	65
3.3.4	Samsvar med andre kilder	66
3.4	Integrert intensitet	68
4	Asymmetrisk Bragg geometri	71
4.1	Asymmetrisk Bragg refleksjon uten absorpsjon	71
4.2	Asymmetrisk Bragg refleksjon med absorpsjon	81
4.2.1	Grafisk framstilling av asymmetrisk Bragg refleksjon med absorpsjon	82
III	Takagi ligningene	83
5	Takagi ligningene	85
5.1	Utleddning av Takagis differensialligninger	85
6	Oppsummering	89
	Appendiks	91
	Referanser	97
	Symboloversikt	99
	Register	105

Forord

Røntgendiffraksjon var et helt nytt fagområde for meg før arbeidet med masteroppgaven begynte. Det hadde ikke vært mulig for meg å sette meg inn i dette temaet uten god hjelp og veiledning fra Professor Gunnar Thorkildsen. Tusen takk for all tiden du har satt av til oppstartsundervisning og veiledning. Takk for at du oppriktig har brydd deg om både min faglige utvikling og meg som person.

Jeg vil også takke min kjære mann Bjørnar for hans støtte og hjelpsomhet gjennom høsten. Og min sønn Jonathan som har måtte tegne på ruteark og lekt med kalkulatorer.

Tilslutt vil jeg takke trofaste barnevakter som har stilt opp på kort varsel med et smil!

Innledning

Denne masteroppgaven er den avsluttende oppgaven under studieprogrammet “Master i realfag med teknologi - integrert lærerutdanningsprogram”. Temaet for oppgaven er: “*Elementer i dynamisk teori for røntgendiffraksjon*” med tittel:

*“Røntgendiffraksjon. Darwins dynamiske teori for
refleksjonsgeometri.”*

Siden studietløpet er et lærerstudium, er det relevant å sette seg inn i et helt nytt fagområde og bearbeide dette til et pedagogisk dokument. Dette har vært et av hovedmålene for del I og II i masteroppgaven. Masteroppgaven skal kunne lese av en medstudent med samme bakgrunn, uten at studenten trenger ekstra informasjonsmateriale for å forstå innholdet.

Bagrunnen for masteroppgaven var å se på Darwins to artikler fra 1914 og oppdatere dem til dagens krystallografiske språk. Disse artiklene har i det siste fått ny oppmerksomhet og mange tar utgangspunkt i dem for beregninger innenfor røntgendiffraksjon i krystaller.

Denne oppgaven vil først gi en introduksjon til viktige elementer og begreper innenfor dynamisk og kinematisk teori for røntgendiffraksjon. Deretter vil Darwin I og Darwin II bli nøye gjennomgått. Darwins teori vil så bli videreutviklet til også å inkludere symmetrisk og asymmetrisk Bragg refleksjon med absorpsjon. Det vil bli lagt vekt på å vise forholdet mellom intensiteten til den totale spredte strålingen og intensiteten til den innkommende strålingen grafisk, ved å utvikle et program i Mathematica 8.0.

Del 1 av masteroppgaven er skrevet i samarbeid med Jofrid Hetland Johnsen. Del 2 og del 3 er et selvstendig arbeid. For å finne aktuelle krystallparametre har jeg brukt studiestedets programmer i Mathematica 8.0: notatbøker og pakker for krystallografisk beregning. Disse vil ikke bli kommentert ytterligere.

Bildet på framsiden er en krystall fra Sinai halvøya i Egypt og er kun ment som et illustrasjonsfoto.

Del I

Sentrale elementer innen røntgendiffraksjon

Kapittel 1

Grunnleggende definisjoner

I 1912 utledet von Laue (W. Friedrich & von Laue, 1912) en geometrisk teori om diffraksjon i medier. Mediet bestod av atomer som var satt sammen i et tredimensjonalt periodisk system. von Laue beregnet først amplituden til bølgen som ble spredt av ett atom og summerte så opp bidragene fra alle atomene. Han neglisjerte at bølgene som forplantet seg i mediet påvirket hverandre. Ewald introduserte begrepet resiprokt gitter og den såkalte Ewald kulen (Ewald, 1913), se avsnitt 1.3. W. H. Bragg og sønnen W. L. Bragg utførte en rekke diffraksjonseksperimenter med røntgenstråling og kom fram til Bragg relasjonen (Bragg, 1913), se avsnitt 1.3. I 1914 beregnet Darwin amplituden som blir diffraktert av ett enkelt plan av atomer og intensiteten diffraktert av ett sett av gitterplan (Darwin, 1914a). Dette arbeidet blir omtalt som Darwin I. Darwin så for seg at en semiuendelig krystall var oppbygget av suksessive plan parallelle med inngangsflaten. I dette arbeidet påpekte han også begrensningen til den geometriske teorien: Energien er ikke bevart (Authier, 2001, s. 5-6).

I sitt neste arbeid, omtalt som Darwin II (Darwin, 1914b), blir den gjensidige vekselvirkningen mellom mediet og transmittert og reflektert stråling beskrevet. Dette formuleres ved ett sett av rekursjonsligninger. Teorien fra Darwin II samsvarer med eksperimentelle resultat på perfekte krystallsystem og den klassifiseres som dynamisk: Multiple spredningsprosesser tas hensyn til (Authier, 2006, s. 534).

Uavhengig av Darwin, publiserte Ewald sin dynamiske teori i 1916-1917 etter mange års arbeid. Han tok også hensyn til vekselvirkningen mellom røntgenstrålene og mediet, men postulerte at krystallen hadde en periodisk sammensetning av dipoler. Hver dipol ble eksitert av den innkommende røntgenstrå-

len og av feltet fra alle de andre dipolene. Denne teorien gav også samsvar med resultater fra eksperimenter for intensiteten til stråler som var reflektert og transmittert. Teorien til Ewald ble i 1931 modifisert av von Laue (von Laue, 1931). Han viste at vekselvirkningene mellom bølgene og mediet kunne beskrives ved å løse Maxwells ligninger for et medium med en periodisk kompleks dielektrisk susceptibilitet. Det er denne kombinasjonen av teorier, kjent som Ewald- von Laues teori, som representerer den “klassiske” beskrivelsen av diffraksjon i perfekte krystaller (Warren, 1990; Authier, 2006; Authier, 2001, s. 3-11).

1.1 Krystaller

I en krystall er elektrontettheten periodisk. Dette kan matematisk uttrykkes ved (Hammond, 2009):

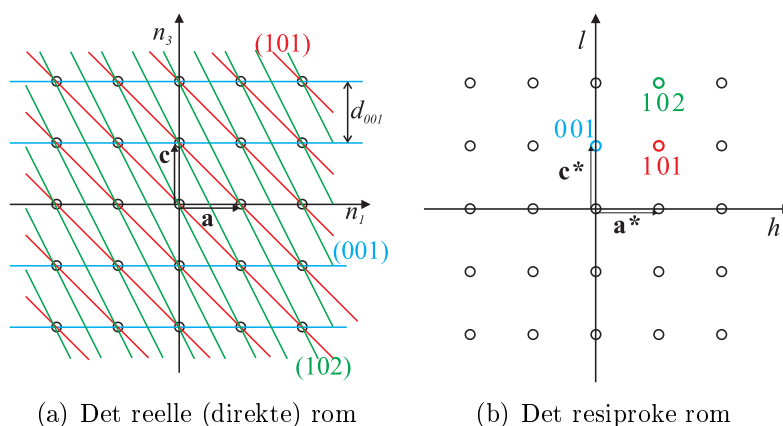
$$\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r} + \mathbf{T}) \quad (1.1)$$

hvor \mathbf{r} er en posisjonsvektor og \mathbf{T} en translasjonsvektor gitt ved:

$$\mathbf{T} = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c} \quad (1.2)$$

Translasjonssymmetrien utspennes ved de såkalte reelle gitterpunktene, n_1 , n_2 og n_3 . Basisvektorene, \mathbf{a} , \mathbf{b} og \mathbf{c} , definerer en enhetscelle med volum lik $V_c = (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c}$. Denne repeteres gjennom hele krystallen. Elektrontettheten er identisk på samme sted i hver enhetscelle. Lengden av basisvektoren angis vanligvis i enheten Ångstrøm, definert ved $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$.

En kan konstruere et sett av parallelle plan som skjærer gjennom gitterpunktene. Disse planskarene kan ha flere mulige orienteringer, se figur 1.1(a). Hver ny orientering svarer til et nytt gitterpunkt i det såkalte resiproke rom, se figur 1.1(b). Avstanden mellom de reelle planene tilskrives symbolet d_{hkl} , hvor settet av heltall, (hkl) , angir hvilken planskare det refereres til.



Figur 1.1: I dette krystallsystemet er vinklene mellom basisvektorene 90° . (a) Gitterpunktene er angitt med sirkler. De blå, røde og grønne strekene illustrerer ulike planskarene (hkl) til de blå planene vil være (001), røde planene (101) og grønne planene (102). (b) De blå, røde og grønne planskarene er representert ved resiproke gitterpunkt i henholdsvis 001, 101 og 102.

Vektoren

$$\mathbf{h} = h \mathbf{a}^* + k \mathbf{b}^* + l \mathbf{c}^* \quad (1.3)$$

kalles en resiprok gittervektor. Lengden av denne vektoren er lik den inverse avstanden mellom to nabo gitterplan i planskaren, $|\mathbf{h}| = \frac{1}{d_{hkl}}$. Prikkproduktet av en translasjonsvektor og en resiproke gittervektor tilfredsstiller relasjonen (Als-Nielsen and McMorow, 2001, s. 13):

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{h} = \text{heltall}$$

Siden elektrontettheten er en periodisk funksjon kan den uttrykkes ved en Fourierrekke:

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{V_c} \sum_{\mathbf{h}} F_{\mathbf{h}} \exp(-2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}) \quad (1.4)$$

hvor $F_{\mathbf{h}}$ er strukturfaktoren. Denne uttrykkes da ved (Azároff, 1968, s. 184):

$$\begin{aligned} F_{\mathbf{h}} &= \int_{V_c} \rho(\mathbf{r}) \exp(2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}) d^3r \\ &= \int_{V_c} \sum_n \rho_n^{(a)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \exp(2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}) d^3r \\ &= \sum_n \left[\int_{V_c} \rho_n^{(a)}(\mathbf{u}) \exp(2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{u}) d^3u \right] \exp(2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}_n) \\ &= \sum_n f_n \exp(2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}_n) \end{aligned} \quad (1.5)$$

f_n er atomformfaktoren (verdi for $\mathbf{K} = \mathbf{h}$), $\rho_n^{(a)}$ elektrontettheten assosiert med atom n og \mathbf{r}_n er dette atomets posisjon i enhetscellen (Tilley, 2007; Authier, 2001, s. 60). Atomformfaktoren og strukturfaktoren er sentrale størrelser i beskrivelsen av diffraksjon i krystaller.

Røntgenstrålingen spres av elektronene i atomet. Spredningsevnen øker med antall elektroner, det vil si med atomnummeret, Z . Spredningsevnen er knyttet til atomformfaktoren som generelt er definert ved (Als-Nielsen and McMorrow, 2001, s. 11):

$$f_n = \int \rho_n^{(a)}(\mathbf{r}) \exp(2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) d^3r \quad (1.6)$$

\mathbf{K} er spredningsvektoren definert på side 22.

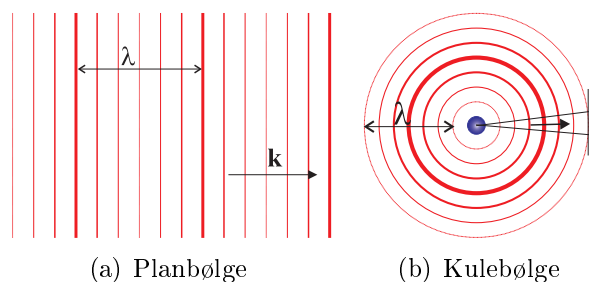
Ved også å ta hensyn til at elektronene er “bundne” får vi en korreksjon:

$$f_n = f_n^0 + f'_n + i f''_n \quad (1.7)$$

hvor f_n^0 tilsvarer den ordinære atomformfaktoren, f'_n og f''_n er realdelen og imaginærdelen av det komplekse korreksjonsleddet (Tilley, 2007; Authier, 2001, s. 38) .

1.2 Røntgenstråling

Strålingen som treffer krystallen er i denne gjennomgangen røntgenstråling. Dette er elektromagnetiske bølger med bølgelengde i intervallet $0.1 - 100 \text{ \AA}$. Figur 1.2 illustrerer strålingen oppfattet som plan- eller kulebølge.



Figur 1.2: Illustrasjonene viser bølgefrontene til en planbølge og en kulebølge. Linjene går gjennom punkter på bølgen som har samme fase. De tykkeste linjene viser bølgetopper og smale linjer bølgedaler. Bølgevektoren, \mathbf{k} , angir forplantningsretningen til bølgen, og står vinkelrett på bølgefrontene. Bølgelengden, λ , er avstanden mellom de to nærmeste bølgefrontene med samme fase. (b) En kilde (blå kule) sender ut en kulebølge som forplanter seg i sirkler fra kilden. Dersom observasjonspunktet ligger langt fra kilden, vil bølgen kunne approksimeres som en planbølge.

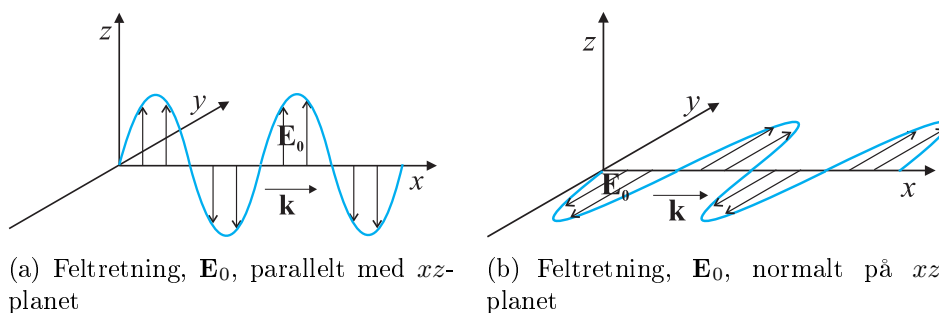
Bølgenes elektriske felt, \mathbf{E} , påvirker elektriske ladninger slik at disse vibrerer. En planbølge kan matematisk uttrykkes (Griffiths, 1989; Authier, 2001, s. 33):

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \exp [2\pi i(\nu t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})] \quad (1.8)$$

For kulebølgen nyttes (Born and Wolf, 1980):

$$E(R) \propto \frac{\exp [2\pi i(\nu t - k R)]}{R} \quad (1.9)$$

R er avstanden fra kilde til observasjonspunkt. Absoluttverdien til bølgevektoren $|\mathbf{k}| = k$ kalles bølgetallet og er lik den inverse bølgelengden, $k = \frac{1}{\lambda}$. Frekvensen, ν , angir antall svingninger per tidsenhet og er lik den inverse perioden, $\nu = \frac{1}{T}$. Sammenhengen mellom frekvensen og bølgetallet er gitt av relasjonen $\nu = ck$, hvor c er lyshastigheten i vakuum (Griffiths, 1989, s. 346-348).



Figur 1.3: I illustrasjonene er spredningsplanet xz -planet (se avsnitt 1.3). Feltvektoren \mathbf{E}_0 står alltid normalt på \mathbf{k} (Griffiths 1989, s. 351, 357).

Bølgene kan være polarisert. Dette betegner at feltretningen, \mathbf{E}_0 , er orientert i forhold til et gitt plan, for eksempel spredningsplanet. I spredningssammenheng gir dette opphav til en polarisasjonsfaktor, C . I denne oppgaven vil retningen være parallell med spredningsplanet (figur 1.3(a)) eller stå vinkelrett på dette (figur 1.3(b)) (Authier, 2001, s. 118-119).

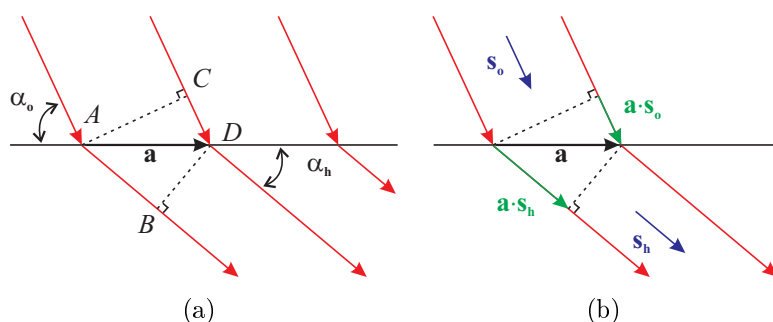
For en grundigere gjennomgang av elektromagnetisk stråling der det tilhørende magnetfeltet også omtales, se Griffiths (1989) kapittel 8.

1.3 Diffraksjonsgeometri

von Laues interferensligninger

von Laues interferensligninger tar utgangspunkt i en enkel krystall hvor atomene er spredere. Disse er plassert i gitterpunktene i det reelle rom. Vi skal først se på atomene langs \mathbf{a} . For å få konstruktiv interferens må veiforskjellen, $(AB - CD)$, være lik et helt antall bølglengder (se figur 1.4):

$$AB - CD = a(\cos \alpha_h - \cos \alpha_o) = h\lambda \quad (1.10)$$



Figur 1.4: (a) Veiforskjellen mellom diffrakterte stråler fra atomene i to nabopunkt er lik $(AB - CD)$. (b) Veiforskjellen gitt ved vektornotasjon: $\mathbf{a} \cdot (\mathbf{s}_h - \mathbf{s}_o)$.

Ligning (1.10) kan formuleres med vektorer ved å la \mathbf{s}_h være en enhetsvektor langs de reflekterte strålene og \mathbf{s}_o være en enhetsvektor langs de innkommende (se figur 1.4(b)). Veiforskjellen blir da $\mathbf{a} \cdot \mathbf{s}_h - \mathbf{a} \cdot \mathbf{s}_o = \mathbf{a} \cdot (\mathbf{s}_h - \mathbf{s}_o)$ og en har:

$$a(\cos \alpha_h - \cos \alpha_o) = \mathbf{a} \cdot (\mathbf{s}_h - \mathbf{s}_o) = h\lambda \quad (1.11)$$

Ligning (1.11) er den første av von Laues interferensligninger. På tilsvarende måte finner vi ligningene for å få konstruktiv interferens i \mathbf{b} -retning og \mathbf{c} -retning:

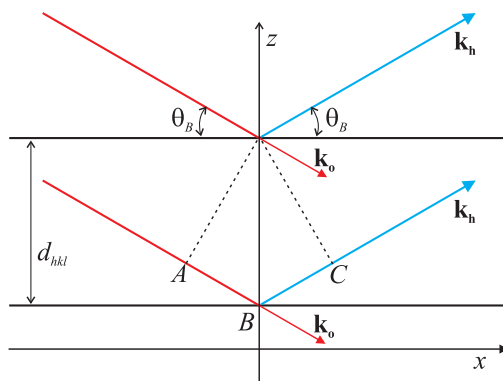
$$b(\cos \beta_h - \cos \beta_o) = \mathbf{b} \cdot (\mathbf{s}_h - \mathbf{s}_o) = k\lambda \quad (1.12)$$

$$c(\cos \gamma_h - \cos \gamma_o) = \mathbf{c} \cdot (\mathbf{s}_h - \mathbf{s}_o) = l\lambda \quad (1.13)$$

For å få konstruktiv interferens fra det tredimensjonale atomgitteret, må alle ligningene være oppfylt samtidig (Hammond, 2009, s. 193-195).

Braggs lov

I 1913 fant W. H. Bragg og sønnen W. L. Bragg en sammenheng som gir betingelsen for konstruktiv interferens (Authier, 2001, s. 6). Utgangspunktet var hypotesen om spredning fra gitterplan.



Figur 1.5: I det gitte kartesiske koordinatsystemet er to gitterplan tegnet inn parallele med xy -planet. De innkommende strålene (røde) har bølgevektor $\mathbf{k}_o = \frac{s\mathbf{a}}{\lambda}$ og de reflekterte strålene (blå) har bølgevektor $\mathbf{k}_h = \frac{s\mathbf{h}}{\lambda}$. Både innkommende og reflekterte stråler danner Bragg vinkelen, θ_B , med planene. Avstanden mellom planene er gitt som d_{hkl} .

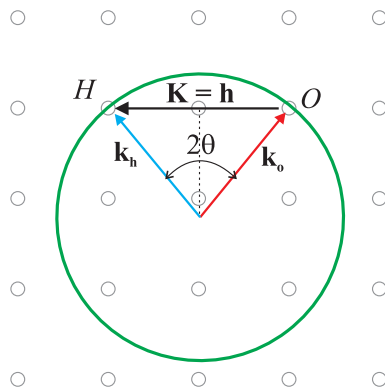
For konstruktiv interferens, må veiforskjellen, $(AB + BC)$, være lik et helt antall bølgelengder, $n\lambda$. Det gir sammenhengen (Bragg, 1913):

$$2 d_{hkl} \sin \theta_B = n\lambda \quad (1.14)$$

Siden både planavstand og bølgelengde er konstante størrelser, er det vinkelen som “bestemmer” når konstruktiv interferens oppstår. Derfor har denne vinklen fått navnet Bragg vinkelen, med notasjon θ_B (Giacovazzo, 2011, s. 172).

Ewalds konstruksjon

Ewald introduserte i 1913 Ewald kulen, i det resiproke rom, for å beskrive spredningsgeometrien knyttet til bølgeforplantning i krystaller (Authier, 2001, s. 6).



Figur 1.6: Krystallen er representert ved et punktgitter i det resiproke rom. Den grønne sirkelen er Ewald kulen. Den innkommende bølgen, \mathbf{k}_o , har sitt endepunkt i gitterets origo. Den spredte bølgen, \mathbf{k}_h , har endepunkt i det resiproke gitterpunktet H , som også skal ligge på Ewald kulen. Dette er en forutsetning for konstruktiv interferens. Spredningsvektoren, $\mathbf{K} = \mathbf{k}_h - \mathbf{k}_o$, må da svare til en resiprok gittervektor, \mathbf{h} . Vinkelen mellom \mathbf{k}_o og \mathbf{k}_h kalles spredningsvinkelen og det er vanlig å betegne den som $2\theta = 2\theta_B$.

Spredningen er elastisk, $|\mathbf{k}_o| = |\mathbf{k}_h|$ og $|\mathbf{k}_o|$ er radien i Ewald kulen (Ewald, 1913; Authier, 2001, s. 48). Spredningsplanet defineres gjerne som planet \mathbf{k}_o og \mathbf{k}_h utspenner.

Når origo og et vilkårlig annet resiprokt gitterpunkt ligger på Ewald kulen, omtales dette som en tostrålesituasjon (Authier, 2001, s. 118). Krystallen kan roteres relativt kulen slik at andre gitterpunkter kan plasseres på kuleskallet (Giacovazzo, 2011, s. 172).

Det følger fra figur 1.6 at følgende sammenheng må være oppfylt:

$$2 \mathbf{k}_o \cdot \mathbf{h} + |\mathbf{h}|^2 = 0 \quad (1.15)$$

Ligningen tilsvarer Braggs lov.

1.4 Elektromagnetisk vekselvirkning

Elektrisk dipolmoment

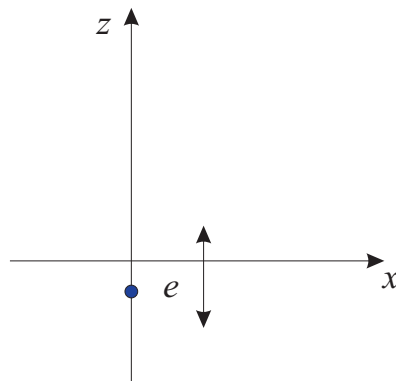
En fysisk elektrisk dipol består av to like ladninger, en negativ og en positiv, separert av en gitt avstand (Griffiths, 1989, s. 145). En enkel modell for en oscillerende elektrisk dipol er vist i figur 1.7. Systemet består av et elektron som kan forflytte seg langs z -aksen som funksjon av tiden t . Den positive ladningen er fiksert i origo. Systemet har da en asymmetrisk ladningsfordeling. Det elektriske dipolmomentet er gitt ved:

$$p(t) = -e z(t) \quad (1.16)$$

Et ytre tidsavhengig elektrisk felt, $\mathbf{E} = E_z \hat{k}$, uttrykt ved

$$E_z(t) = E_0 \exp(2\pi i \nu t) \quad (1.17)$$

får elektronet til å oscillere langs z -aksen med samme frekvens, ν .



Figur 1.7: Figuren viser en enkel modell for en oscillerende dipol.

Elektronets posisjon på z -aksen vil være bestemt av en klassisk analyse basert på Newtons 2. lov. Elektronet med masse m_e erfarer “fjærkraft” og “dempningskraft” relativt origo, kodet inn i parametrene ν_0 og γ_0 .

$$\begin{aligned}
z(t) &= \frac{e}{4\pi^2 m_e} \frac{1}{(\nu^2 - \nu_0^2) - i\gamma_0 \nu} E_z(t) \\
&= \frac{e}{4\pi^2 m_e \nu^2} \left[1 + \frac{(\nu^2 - \nu_0^2)\nu_0^2 - (\gamma_0 \nu)^2}{(\nu^2 - \nu_0^2)^2 + (\gamma_0 \nu)^2} + i \frac{\gamma_0 \nu^3}{(\nu^2 - \nu_0^2)^2 + (\gamma_0 \nu)^2} \right] E_z(t)
\end{aligned} \tag{1.18}$$

Uttrykt ved den klassiske elektronradien,

$$r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} \tag{1.19}$$

kan det elektriske dipolmomentet skrives som:

$$p(t) = -\frac{\epsilon_0 r_e \lambda^2}{\pi} \left[1 + \frac{(\nu^2 - \nu_0^2)\nu_0^2 - (\gamma_0 \nu)^2}{(\nu^2 - \nu_0^2)^2 + (\gamma_0 \nu)^2} + i \frac{\gamma_0 \nu^3}{(\nu^2 - \nu_0^2)^2 + (\gamma_0 \nu)^2} \right] E_z(t) \tag{1.20}$$

Permittiviteten i vakuum er gitt ved symbolet ϵ_0 . For et mangeelektronsystem, atom, summeres ligning (1.20) med hensyn på atomets virtuelle oscillatorer, j . Vi får da aktuell atomformfaktor inkludert korreksjon. g_j kalles oscillatorstyrke (Azároff, 1968, s. 167) (Als-Nielsen and McMorow, 2001, s. 238-239).

$$\sum g_j \left[1 + \frac{(\nu^2 - \nu_j^2)\nu_j^2 - (\gamma_j \nu)^2}{(\nu^2 - \nu_j^2)^2 + (\gamma_j \nu)^2} + i \frac{\gamma_j \nu^3}{(\nu^2 - \nu_j^2)^2 + (\gamma_j \nu)^2} \right] = f_n^{(0)} + f_n' + i f_n'' \tag{1.21}$$

Elektrisk polarisasjon

Fra ligning (1.20) følger det at atomet har et dipolmoment, \mathbf{p} , i samme retning som \mathbf{E} og proporsjonalt med \mathbf{E} . Den elektriske polarisasjonen, \mathbf{P} , er definert som dipolmoment per volumenhet. \mathbf{P} er proporsjonal med det elektriske feltet uttrykt ved sammenhengen:

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi_e \mathbf{E} \tag{1.22}$$

hvor χ_e er den dielektriske susceptibiliteten til mediet. \mathbf{E} er det totale elektriske feltet med bidrag både fra materialet og det ytre feltet (Griffiths, 1989, s. 158-164, 175-176).

Den dielektriske susceptibiliteten er en materialparameter. Definisjonen av parameteren er gitt ved den elektriske polarisasjonen i mediet (ligning (1.22)), men den kan også uttrykkes ved elektrontettheten, atomformfaktoren og strukturfaktoren. N_n er antall elektroner i atom n (Authier, 2001, s. 36-37):

$$\begin{aligned}\chi_e(\mathbf{r}) &= -\frac{r_e\lambda^2}{\pi} \sum_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) f_n \\ &\Rightarrow -\frac{r_e\rho(\mathbf{r})\lambda^2}{\pi} \\ &= -\frac{r_e\lambda^2}{\pi V_c} \sum_{\mathbf{h}} F_{\mathbf{h}} \exp(-2\pi i\mathbf{h} \cdot \mathbf{r})\end{aligned}\quad (1.23)$$

Forskyvningsfelt og brytningsindeks

Krystallen betraktes som et dielektrisk medium uten frie ladninger eller strømmer. For å beskrive dens elektriske egenskaper introduseres en ny størrelse, forskyvningsfeltet \mathbf{D} (Authier, 2001, s. 28):

$$\mathbf{D} = \epsilon_0\mathbf{E} + \mathbf{P} = \epsilon_0(1 + \chi_e)\mathbf{E} \quad (1.24)$$

Maxwells ligninger kan nå uttrykkes ved (Griffiths, 1989, s. 311):

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0 \quad (1.25a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.25b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.25c)$$

$$\frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{B} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (1.25d)$$

μ_0 er permeabiliteten i vakuum og \mathbf{B} er den magnetiske flukstettheten.

Når en lar den dielektriske susceptibiliteten, χ_e , være representert ved sin gjennomsnittlige verdi, χ_0 , vil forskyvningsfeltet, \mathbf{D} , tilfredsstillende bølge-
ningen:

$$\nabla^2 \mathbf{D} = \epsilon_0 \mu_0 (1 + \chi_0) \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} \quad (1.26)$$

hvor v er lysets hastighet i mediet.

Brytningsindeksen, n , er videre gitt ved:

$$n \equiv \frac{c}{v} = \sqrt{1 + \chi_0} \quad (1.27)$$

Siden $\chi_0 \ll 1$ kan brytningsindeksen skrives som (Authier, 2001, s. 41):

$$n \approx 1 + \frac{\chi_0}{2} \quad (1.28)$$

$$= 1 - \frac{r_e \lambda^2 F_0}{2\pi V_c} \quad (1.29)$$

Elektrisk dipolstråling

Et elektrisk dipolmoment som varierer med tiden, vil produsere elektromag-
netiske bølger. Disse kan observeres i stor avstand fra dipolen og omtales som
elektrisk dipolstråling. Det elektriske feltet, \mathbf{E} , knyttet til denne strålingen
kan bestemmes fra den elektriske Hertz vektoren, $\mathbf{\Pi}_e$. $\mathbf{\Pi}_e$ er gitt av mediets
polarisasjon, \mathbf{P} , gjennom

$$\nabla^2 \mathbf{\Pi}_e - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{\Pi}_e}{\partial t^2} = -\mathbf{P} \quad (1.30)$$

og \mathbf{E} kan bestemmes fra:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{\epsilon_0} \nabla(\nabla \cdot \mathbf{\Pi}_e) - \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{\Pi}_e}{\partial t^2} \quad (1.31)$$

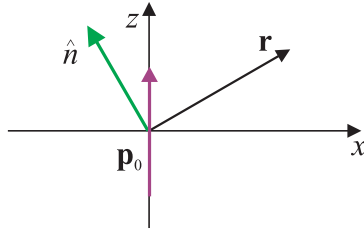
For en fullstendig utledning av Hertz vektoren og den elektriske feltvektoren,
se Authier (2001) side 32.

For et fritt elektron lokalisert i origo, kan polarisasjon uttrykkes ved:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p}_0 \exp(2\pi i \nu t) \delta(\mathbf{r}) \quad (1.32)$$

med $\mathbf{p}_0 = -\frac{\epsilon_0 r_e \lambda^2}{\pi} \mathbf{E}_0$ (se ligning (1.20)). Dette gir opphav til det elektriske feltet (Authier, 2001, s. 36):

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -E_0 (r_e C) \frac{\exp[2\pi i(\nu t - k r)]}{r} \hat{n} \quad (1.33)$$



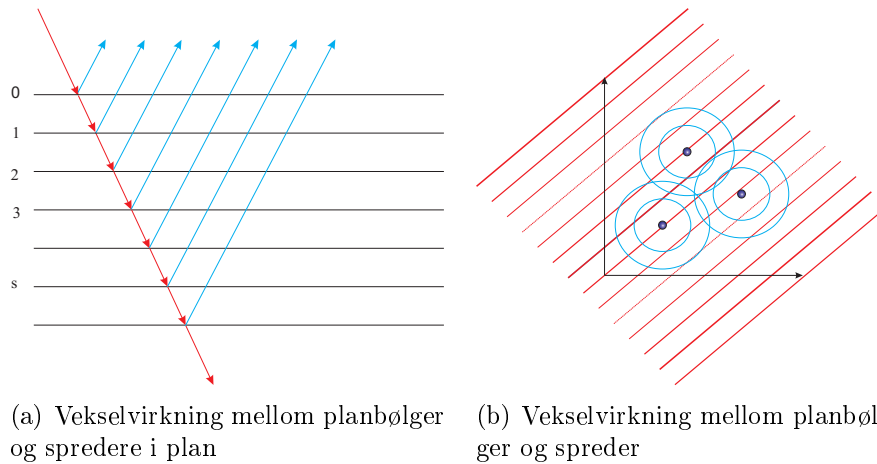
Figur 1.8: En kulebølge som brer seg radielt utover med observasjonsretning \mathbf{r} , dipolorientering \mathbf{p}_0 og feltretning \hat{n} . Alle er vektorer i xz -planet.

Enhetsvektoren, \hat{n} , som gir feltretningen, ligger i planet utspent av \mathbf{p}_0 og observasjonsretningen \mathbf{r} og står vinkelrett på \mathbf{r} . Polarisasjonsfaktoren, C , er gitt ved:

$$C = \hat{n} \cdot \frac{\mathbf{p}_0}{|\mathbf{p}_0|} \quad (1.34)$$

1.5 Kinematisk teori

Den første og enkleste teorien både Darwin (Darwin, 1914a), Ewald (Ewald, 1913) og von Laue (von Laue, 1912) introduserte hver for seg, betegnes som kinematisk eller geometrisk diffraksjonsteori. I den kinematiske teorien legger en til grunn at den innkommende bølgen er upåvirket av spredningsprosessen i planene. Det vil si at alle plan erfarer samme amplitude av innkommende bølge (Authier, 2001, s. 5-6).



Figur 1.9: a) Den innkommende strålen (rød) er uendret (amplituden er den samme) gjennom planene. De spredte bølgene (blå) er de som den innkomne bølgen gir opphav til. b) Den innkommende planbølgen (rød) påvirker dipolene slik at de sender ut kulebølger (blå). Disse interfererer ikke med hverandre.

Standard formulering av kinematisk teori, Warren (1990) kapittel 3, legger til grunn en innkommende planbølge.

$$E_{\mathbf{o}} = E_o \exp(-2\pi i \mathbf{k}_o \cdot \mathbf{r})$$

Tidsfaktoren $\exp(2\pi i \nu t)$ og feltenes vektornatur tas ikke eksplisitt med i uttrykkene her.

Videre er sprednerne (elektronene) lokalisert i posisjoner gitt ved vektorene \mathbf{r}_n . Den resulterende amplituden i observasjonspunktet til den spredte bølgen, fra dette systemet av spredere, er da gitt ved superposisjon:

$$E_{\mathbf{h}} = -E_o(r_e C) \frac{\exp(-2\pi i k R)}{R} \sum_n \exp(2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_n) \quad (1.35)$$

Observasjonspunktet er i en avstand R fra origo i en retning spesifisert ved bølgevektoren \mathbf{k}_h . $\mathbf{K} = \mathbf{k}_h - \mathbf{k}_o$ er spredningsvektoren definert i avsnitt 1.3.

Krystallgitterets periodisitet, avsnitt 1.1, medfører at summen \sum_n i ligning (1.35) må inkludere summen over tillatte translasjonsvektorer \mathbf{T} . Ved å definere funksjonen $F(\mathbf{K})$, systemets spredningsamplitude,

$$F(\mathbf{K}) = \sum_{\mathbf{T}} \exp(2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{T})$$

følger det at:

$$\begin{aligned} F(\mathbf{K}) &= \sum_{\mathbf{T}} \exp(2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{T}) \\ &= \sum_{n_1} \exp(2\pi i K_x n_1 a) \sum_{n_2} \exp(2\pi i K_y n_2 b) \sum_{n_3} \exp(2\pi i K_z n_3 c) \\ &= \frac{\sin(\pi N_1 K_x a)}{\sin(\pi K_x a)} \frac{\sin(\pi N_2 K_y b)}{\sin(\pi K_y b)} \frac{\sin(\pi N_3 K_z c)}{\sin(\pi K_z c)} \end{aligned} \quad (1.36)$$

der N_1 , N_2 og N_3 angir antall celler krystallen er bygget opp av. $F(\mathbf{K} = \mathbf{H})$ tilsvarer F_h , strukturfaktoren. Intensiteten til spredt stråling, $I(\mathbf{K})$, vil være proporsjonal med $|F(\mathbf{K})|^2$. Da har en at:

$$I(\mathbf{K}) \propto \frac{\sin^2(\pi N_1 K_x a)}{\sin^2(\pi K_x a)} \frac{\sin^2(\pi N_2 K_y b)}{\sin^2(\pi K_y b)} \frac{\sin^2(\pi N_3 K_z c)}{\sin^2(\pi K_z c)} \quad (1.37)$$

Ligning (1.37) blir kalt for von Laues interferensfunksjon (Azároff, 1968, s. 186-193).

Summen i ligning (1.35) kan generelt erstattes med et integral

$$\sum_n \exp(2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_n) = \int \rho(\mathbf{r}) \exp(2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) d^3r$$

der $\rho(\mathbf{r})$ er elektrontettheten. Ved å nytte ligning (1.4) følger det at:

$$\sum_n \exp(2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_n) = \sum_{\mathbf{h}} \frac{F_h}{V_c} \int_v \exp(2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{h}) d^3r$$

Integrasjonen skjer over krystallens volum, v . Som for von Laues interferensfunksjon, vil en ha et endelig bidrag bare når $\mathbf{K} \approx \mathbf{h}$ (Braggs lov er oppfylt). Det følger videre at for spredt intensitet gjelder:

$$I(\mathbf{K}) \rightarrow I_{\mathbf{h}} \propto |F_{\mathbf{h}}|^2$$

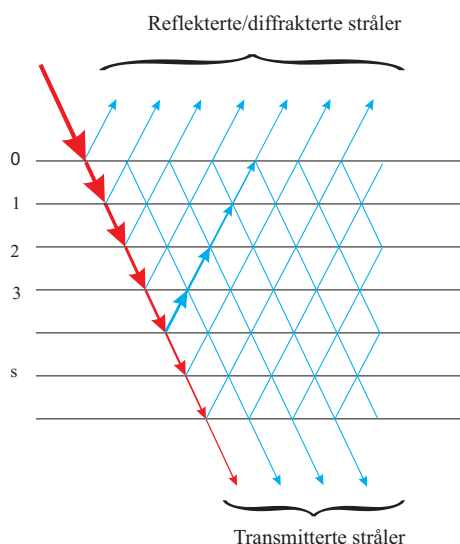
Dette er et nøkkelresultat for kinematisk teori.

1.6 Dynamisk teori

Det var Ewald som introduserte begrepet dynamisk teori, da han presenterte arbeidet sitt. Både Darwin, Ewald og von Laue kom frem til at den kinematiske teorien ikke var fullstendig nok i forhold til energibevaring. Den dynamiske teorien tar derfor hensyn til at bølgene erfarer multiple spredningsprosesser i mediet (Warren, 1990, s. 315).

Darwins dynamiske teori

Darwins dynamiske teori (Darwin, 1914b) tar hensyn til at de reflekterte og transmitterte strålene kan spres “på nytt”, i hvert gitterplan gjennom krystallen (Authier, 2006, s. 534).



Figur 1.10: Dynamisk teori: Den innkommende strålen (rød) blir svekket av refleksjon i planene. De reflekterte bølgene (blå) spres på nytt i planene og blir svekket på samme måte som den innkommende strålen.

Amplituder og faser for bølgene er knyttet sammen over hvert gitterplan. Dette gir et sett av rekursjonsligninger som er temaet for oppgaven i del II.

Ewald og von Laues dynamiske teori

I likhet med Darwins arbeid, gav også Ewalds teori som resultat, at integrert intensitet til reflektert stråle er proporsjonal med absoluttverdien av

strukturfaktoren (Ewald, 1925):

$$I_{\mathbf{h}} \propto |F_{\mathbf{h}}| \quad (1.38)$$

Ewalds teori har vist seg å ha et bredere anvendelsesområde enn Darwins. Det viktigste er postulatet av et bølgefelt: Det elektriske feltet inne i krystallen ved likevekt kan uttrykkes som en sum av planbølger. Bølgevektorene til planbølgene er relatert ved de resiproke gittervektorene (Ewald, 1913; Darwin, 1914b; Authier, 2001, s. 11):

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_o \exp(-2\pi i \mathbf{k}_o \cdot \mathbf{r}) + \mathbf{E}_h \exp(-2\pi i \mathbf{k}_h \cdot \mathbf{r}) + \dots \quad (1.39)$$

I motsetning til Ewalds teori som er på mikroskopisk nivå, er von Laues makroskopisk (von Laue, 1931). Det vil si at den tar utgangspunkt i Maxwells ligninger. Ewald så på individuelle dipoler, mens Laues dynamiske teori tok utgangspunkt i den dielektriske susceptibiliteten til mediet som erfarer røntgenstråling (Authier, 2001, s. 14).

Forskyvningsfeltet til en elektromagnetisk bølge i et medium med en kontinuerlig dielektrisk susceptibilitet, χ_e tilfredstiller bølgeligningen:

$$\nabla \times \nabla \times (1 - \chi_e) \mathbf{D} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} \quad (1.40)$$

Hvor $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ svarer til Ewalds bølgefelt

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \sum_g \mathbf{D}_g e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_g \cdot \mathbf{r})} \quad (1.41)$$

og den dielektriske susceptibiliteten er:

$$\chi_e(\mathbf{r}) = \sum_h \chi_h e^{2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}} \quad (1.42)$$

I den såkalte fundamentalteorien håndteres amplitudene \mathbf{D}_g , ligning (1.41), som posisjonsuavhengige. Ligning (1.40) omformes da til et egenverdi-problem knyttet til bølgevektorenes felles utgangspunkt. Løsningene gir såkalte dispersjonsflater. Egenverdiproblemets egenvektorer gir bølgekomponentenes amplituder.

I teorien utviklet av Takagi først i 1962 og med flere detaljer i 1969, er amplitudene posisjonsavhengige, men bølgevektorne bestemmes ved midlere refraksjon alene. Likning (1.40) gir da et sett av koblede partielle differensialligninger for amplitudene (Takagi, 1962; Takagi, 1969).

Wagenfeld (1986) har vist at Ewald og von Laues teori er ekvivalente (Wagenfeld, 1968).

Kapittel 2

Darwin I: Innføring i notasjon og begrep

Den første artikkelen til Darwin bygger på von Laues ligninger (avsnitt 1.3) som beskriver interferens av røntgenstråler i krystaller. Fra disse ligningene kan en utlede når konstruktiv interferens inntreffer, men de gir ikke intensiteten ved dette maksimumet. På Darwins tid var det begrensninger innenfor de eksperimentelle rammebetingelsene. Han mente derfor at det var essensielt å benytte kulebølger for modellering av røntgenstråler. Darwin bruker også Braggs teori (avsnitt 1.3) ved å betrakte diffraksjonsfenomenet som en konsekvens av refleksjon i parallelle plan av atomer. Han legger til grunn at disse planene også er parallelle til krystallens overflate, noe som forenkler de geometriske betraktningene (Darwin, 1914a, s. 315).

Før Darwin tok fatt på utledningen av teorien la han fram hvilke antagelser som lå til grunn. Han antok først at røntgenstrålefenomenet er en gren av optisk teori som omfatter diffraksjon og dispersjon. Videre antok han at røntgenstrålene adlyder lovene i den elektromagnetiske teori og at amplituden til en bølge som passerer gjennom et materie reduseres eksponensielt (Darwin, 1914a, s. 315).

2.1 Beregninger for et enkelt plan

2.1.1 Bølge spredt av et plan

En innkommende stråle, A_i blir modellert som en kulebølge. Ligningen for bølgen har da følgende form når en bruker vanlig krystallografisk notasjon for faseleddet:

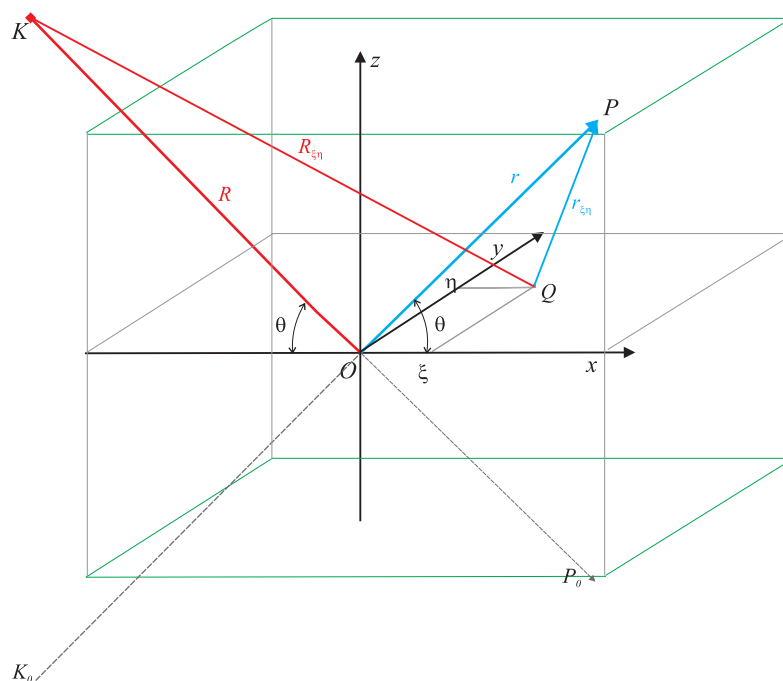
$$A_i = \tilde{A}_0 \frac{\exp[2\pi i(\nu t - k R)]}{R} \quad (2.1)$$

\tilde{A}_0 er amplituden, ν frekvensen, t tiden, k bølgetallet i vakuum og R avstanden fra kilden og ned til krystallen i xz -planet (se figur 2.1). $\frac{\tilde{A}_0}{R}$ er gitt symbolet A_0 hos Warren (1990). Aktuell sammenheng mellom dimensjonene blir $[\tilde{A}_0] = [A_i] \times \text{m}$. Ved å bruke skrivemåten i ligning (2.1) kan en se at bølgens amplitude blir redusert jo lenger bort fra kilden en kommer. Det antas at strålekilden har en gitt utstrekning slik at $R > 0$ og ligningen kan derfor ikke divergere.

Fra figur 2.1 kan en tenke seg en spredner, i form av en dipol, plassert i origo. Sprederen vil i praksis være et atom som genererer spredt stråling tilsvarende en kulebølge. Bidragene fra alle atomene i xy -planet summeres. Tettheten av spredere i planet er stor og de antas å være av samme type. Summen kan erstattes med et integral siden fasen varierer lite mellom naboatomer. Den totale reflekterte bølgen fra et gitt arealelement, $(d\xi d\eta)$, vil være beskrevet ved ligningen:

$$d^2 A_r = \tilde{A}_0 f(2\theta, k) N d_{hkl} \frac{\exp\{2\pi i[\nu t - k(|\vec{KQ}| + |\vec{QP}|)]\}}{R(\rho - R)} d\xi d\eta \quad (2.2)$$

$f(2\theta, k)$ omtales som spredningslengden for spredning av røntgenstråling for en vinkel 2θ . Spredningslengden er et mål for styrken på vekselvirkningen mellom spredner og eksisterende bølge. Darwin antok at en kan bruke en gjennomsnittsverdi for denne vekselvirkningen. N er antall spredere per volumenheter i krystallen og d_{hkl} er avstanden mellom de parallelle planene. Produktet Nd_{hkl} blir da antall spredere per arealenhet. For en vilkårlig posisjon, Q , i planet er veilengden, kilde - detektor, lik $R_{\xi\eta} + r_{\xi\eta} = |\vec{KQ}| + |\vec{QP}|$, se figur 2.1.



Figur 2.1: En strålekilde er plassert i K og sender ut en stråle som treffer origo, O . Strålen blir reflektert til P , både K , O og P ligger i xz -planet, spredningsplanet. Punktene K_0 og P_0 er symmetrisk plassert i forhold til K og P . Avstanden fra K til P_0 , og fra P til K_0 er lik ρ . En alternativ vei for strålen er å "treffe" et punkt, Q , i xy -planet, og bli reflektert til P . xy -planet er et vilkårlig, semiuendelig Bragg plan i krystallen og geometrien er valgt på en slik måte at $R + r$ er den korteste veien mellom K , xy -planet og P . Vinkelen mellom den innkommende strålen og planet er lik vinkelen til den reflekterte strålen. Krystalloverflaten er parallell med xy -planet, slik at den reflekterte bølgen vil falle på den samme krystalloverflaten som den innkommende bølgen. (Figuren er gjengitt fritt etter Warren 1990, s. 316).

Matematiske detaljer:

For å finne $|\vec{KQ}| + |\vec{QP}|$ i ligning (2.2) kan en bruke følgende fremgangsmåte:

$$\vec{KQ} = \vec{KO} + \vec{OQ} = (R \cos \theta \hat{i} - R \sin \theta \hat{k}) + (\xi \hat{i} + \eta \hat{j})$$

$$|\vec{KQ}| = \sqrt{(R \cos \theta + \xi)^2 + \eta^2 + R^2 \sin^2 \theta} = R \sqrt{1 + \frac{2\xi \cos \theta}{R} + \frac{\xi^2 + \eta^2}{R^2}}$$

En bruker videre at rekkeutviklingen av $\sqrt{1+x} = 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \dots$ og antar at ξ og η er små sammenlignet med R . Tar med ledd til andre orden og får:

$$|\vec{KQ}| \approx R + \xi \cos \theta + \frac{\xi^2 \sin^2 \theta}{2R} + \frac{\eta^2}{2R}$$

$$\overrightarrow{QP} = \overrightarrow{OP} - \overrightarrow{OQ} = [(\rho - R) \cos \theta \hat{i} + (\rho - R) \sin \theta \hat{k}] - (\xi \hat{i} + \eta \hat{j})$$

På tilsvarende måte som for $|\overrightarrow{KQ}|$ finnes $|\overrightarrow{QP}|$:

$$\begin{aligned} |\overrightarrow{QP}| &= \sqrt{[(\rho - R) \cos \theta - \xi]^2 + \eta^2 + (\rho - R)^2 \sin^2 \theta} \\ &\approx (\rho - R) - \xi \cos \theta + \frac{\xi^2 \sin^2 \theta}{2(\rho - R)} + \frac{\eta^2}{2(\rho - R)} \end{aligned}$$

Den totale veilengden kan da uttrykkes som:

$$|\overrightarrow{KQ}| + |\overrightarrow{QP}| = \rho + \frac{\rho}{2R(\rho - R)}(\xi^2 \sin^2 \theta + \eta^2)$$

I sin utledning bruker Darwin Fresnel integraler (Warren, 1990, s. 318) for å bestemme et uttrykk for den reflekterte bølgen. Det aktuelle integralet fremkommer nå ved bruk av standard programvare (Mathematica 8.0):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\alpha r^2) dr = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2} \exp(-i\frac{\pi}{4})$$

Ved å bruke dette på ligning (2.2) finner en den reflekterte bølgen fra et uendelig stort plan som:

$$\begin{aligned} A_r &= \iint_{-\infty}^{\infty} d^2 A_r \\ &= \tilde{A}_0 \frac{\exp[2\pi i(\nu t - k\rho)]}{\rho} f(2\theta, k) N d_{hkl} \frac{\rho}{R(\rho - R)} \times \\ &\quad \iint_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\pi i \frac{k\rho}{R(\rho - R)}(\xi^2 \sin^2 \theta + \eta^2)\right] d\xi d\eta \\ &= f(2\theta, k) \frac{N d_{hkl}}{k \sin \theta} \exp(-i\frac{\pi}{2}) \tilde{A}_0 \frac{\exp[2\pi i(\nu t - k\rho)]}{\rho} \end{aligned} \quad (2.3)$$

Av denne ligningen kan en se at den reflekterte bølgen vil ha et faseskifte på $\frac{\pi}{2}$ i forhold til den innkommende bølgen. Det medfører at en stråle som blir reflektert to ganger er i motfase med den innkommende strålen. Dette svarer til destruktiv interferens.

2.1.2 Refleksjonskoeffisient

Darwin introduserer nå størrelsen refleksjonskoeffisient, $-iq$, ut fra ligning (2.3). Refleksjonskoeffisienten forteller hvor stor del av den innkommende bølgen som blir reflektert:

$$-iq = f(2\theta, k) \frac{N d_{hkl}}{k \sin \theta} \exp\left(-i\frac{\pi}{2}\right) \quad (2.4)$$

Den reflekterte bølgen i ligning (2.3) vil da være gitt på følgende form:

$$A_r = -iq \tilde{A}_0 \frac{\exp[2\pi i(\nu t - k\rho)]}{\rho} \quad (2.5)$$

Oversettelseskjema for symboler

Spredningslengden tilknyttet vekselvirkningen mellom røntgenstråling og et atom er vanligvis gitt som (Authier, 2001):

$$f(2\theta, k) \rightarrow -r_e f(2\theta, k) C$$

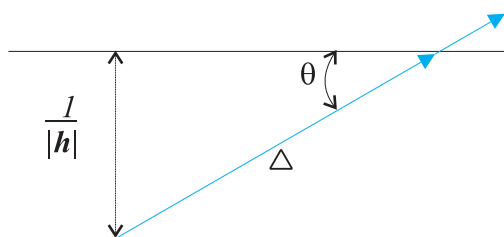
r_e er den klassiske elektronradien. $f(2\theta, k)$ er atomformfaktoren for røntgenstråling. Ved foroverspredning er den lik Z , antall elektroner assosiert med det gitte atomet. C er polarisasjonsfaktoren. I en standard tostrålesituasjon (avsnitt 1.3) er den lik $\cos 2\theta$ når den innkommende bølgens elektriske feltvektor ligger i spredningsplanet og lik 1 når den innkommende bølgens elektriske feltvektor står vinkelrett på spredningsplanet (avsnitt 1.2). Dette gir refleksjonskoeffisienten på tilsvarende form som Borie (1967) utleder. Dimensjonsanalyse indikerer videre at en kan identifisere

$$N f(2\theta, k) \rightarrow -\frac{r_e C F_{\mathbf{h}}}{V_c} \quad (2.6)$$

med $F_{\mathbf{h}}$ lik den aktuelle strukturfaktoren og V_c lik volumet til enhetscellen. I denne overgangen er det enhetscellen, som kan inneholde ulike atomtyper, som blir den sentrale spredende enhet. Ved å erstatte avstanden mellom planene, d_{hkl} , med den inverse absoluttverdien av den resiproke gittervektoren $|\mathbf{h}|$ (se avsnitt 1.1) og bruke at $k = \frac{1}{\lambda}$, finner en at Darwins refleksjonskoeffisient kan uttrykkes ved:

$$-iq = i \frac{\lambda r_e C}{V_c |\mathbf{h}| \sin \theta} F_{\mathbf{h}} \quad (2.7)$$

Når denne definisjonen tas med, blir q generelt kompleks. Refleksjonskoeffisienten er av størrelsesorden 10^{-5} . Det vil si at det bare er rundt 0.01‰ av den innkommende strålen som blir reflektert av planet.



Figur 2.2: Viser sammenhengen mellom planavstand, $d_{hkl} = \frac{1}{|\mathbf{h}|}$, veilengde, Δ , og spredningsvinkel θ .

Fra figur 2.2 kan en se at aktuell sammenheng mellom størrelsene er:

$$\begin{aligned} \Delta \sin \theta &= \frac{1}{|\mathbf{h}|} \\ \Delta &= \frac{1}{|\mathbf{h}| \sin \theta} \end{aligned}$$

Refleksjonskoeffisienten kan da uttrykkes:

$$-iq = i \frac{\lambda r_e C \Delta}{V_c} F_{\mathbf{h}} \quad (2.8)$$

hvor størrelsen

$$-i\kappa = i \frac{\lambda r_e C}{V_c} F_{\mathbf{h}} \quad (2.9)$$

er spredningsevnen per lengdeenhet.

2.1.3 Brytningsindeks

Vi skal nå se på bølger som transmitteres gjennom et plan. Refleksjonen i planene antas her som neglisjerbar (se figur 2.3). Transmisjonskoeffisienten svarer til refleksjonskoeffisienten der atomformfaktoren $f(2\theta, k) \rightarrow f(0, k)$. Transmisjonskoeffisienten betegnes som $-iq_0$ og den transmitterte bølgen fra plan $s = 0$ kan skrives slik:

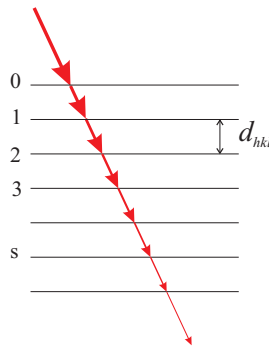
$$A_t^{(0)} = \tilde{A}_0 \frac{\exp[2\pi i(\nu t - kR)]}{R} - iq_0 \tilde{A}_0 \frac{\exp[2\pi i(\nu t - kR)]}{R} \quad (2.10)$$

Det første leddet beskriver den opprinnelige bølgen fra kilden på plan $s = 0$ i krystallen og det siste leddet er tillegget på grunn av spredning i planet. Ved å anta at q_0 er liten og bruke approksimasjonen:

$$e^{-iq_0} \approx 1 - iq_0 \quad (2.11)$$

Blir uttrykket for bølgen nå:

$$A_t^{(0)} = (1 - iq_0) \tilde{A}_0 \frac{\exp[2\pi i(\nu t - kR)]}{R} \approx \tilde{A}_0 \frac{\exp[2\pi i(\nu t - kR) - iq_0]}{R} \quad (2.12)$$



Figur 2.3: Foroverspredning: Den røde linjen beskriver den innkommende strålen som blir svekket av absorpsjon og på grunn av multipl spredning i foroverretning. d_{hkl} angir planavstanden.

I denne beskrivelsen av bølgen er det i utgangspunktet ikke tatt hensyn til absorpsjon i planet og Darwin tilføyer derfor en dempningsfaktor b . Siden q_0 her er antatt reell blir b håndtert for seg. Dette er en konsekvens av at q_0 i

praksis er kompleks og følgelig har en imaginærdel. En annen måte å innføre absorpsjon på er ved å multiplisere bølgen med $(1 - b - iq_0)$ (Darwin, 1914b, s. 678)). Den transmitterte bølgen kan nå skrives som:

$$A_t^{(0)} = \tilde{A}_0 b \frac{\exp[2\pi i(\nu t - kR) - iq_0]}{R} \quad (2.13)$$

Dette gjelder for plan $s = 0$. Når den transmitterte bølgen fra plan $s = 0$, treffer det neste planet, vil den bli spredt på ny. Noe blir også absorbert og det må derfor tas hensyn til absorpsjon. Dette gjøres ved å multiplisere $A_t^{(0)}$ med b og ta med tillegget fra den spredte bølgen fra plan $s = 1$. Denne vil også bli dempet i plan $s = 1$. Den transmitterte bølgen fra dette planet blir da:

$$\begin{aligned} A_t^{(1)} &= \left[(1 - iq_0) \tilde{A}_0 b \frac{\exp\{2\pi i[\nu t - k(R + d_{hkl} \csc \theta)]\}}{R} \right. \\ &\quad \left. - iq_0 \tilde{A}_0 b \frac{\exp\{2\pi i[\nu t - k(R + d_{hkl} \csc \theta)]\}}{R} \right] \cdot b \quad (2.14) \\ &\approx \tilde{A}_0 b^2 \frac{\exp\{2\pi i[\nu t - k(R + d_{hkl} \csc \theta)] - 2iq_0\}}{R} \end{aligned}$$

$d_{hkl} \csc \theta$ er den ekstra lengden den innkommende strålen må gå fra plan $s = 0$ til plan $s = 1$. Fordi $d_{hkl} \csc \theta \ll R$ er nevneren tilnærmet konstant lik R .

Ved å gjøre tilsvarende beregninger for de neste planene finner vi at ligningen for den transmitterte bølgen fra plan s blir:

$$A_t^{(s)} = \tilde{A}_0 b^{s+1} \frac{\exp\{2\pi i[\nu t - k(R + sd_{hkl} \csc \theta)] - (s+1)iq_0\}}{R} \quad (2.15)$$

Intensiteten til den transmitterte bølgen er proporsjonal med kvadratet av amplituden. Absorpsjonskoeffisienten definert på intensitetsnivå er derfor:

$$b^{2j} = \exp(-\mu l_0) \Rightarrow b^2 = \exp(-\mu d_{hkl} \csc \theta) \quad (2.16)$$

Her er veilengden gjennom krystallen gitt ved $l_0 = jd_{hkl} \csc \theta$ og μ er den lineære absorpsjonskoeffisienten. j er totalt antall plan i krystallen.

Telleren i ligning (2.15) kalles for fasefaktoren og kan nå ved utgangen av krystallen, skrives som:

$$\begin{aligned} & \exp \{2\pi i[\nu t - k(R + jd_{hkl} \csc \theta)] - iq_0 j\} \\ &= \exp \{2\pi i[\nu t - k(R + l_0)] - iq_0 \frac{l_0 \sin \theta}{d_{hkl}}\} \\ &= \exp[2\pi i(\nu t - kR)] \exp[-2\pi ikl_0(1 + \frac{q_0 \sin \theta}{2\pi kd_{hkl}})] \end{aligned}$$

Vi ser altså her at bølgetallet til bølgen i krystallen har forandret seg i forhold til i vakuum. Darwin definerte denne forandringen som brytningsindeksen til krystallen:

$$n = 1 + \frac{q_0 \sin \theta}{2\pi kd_{hkl}} \quad (2.17)$$

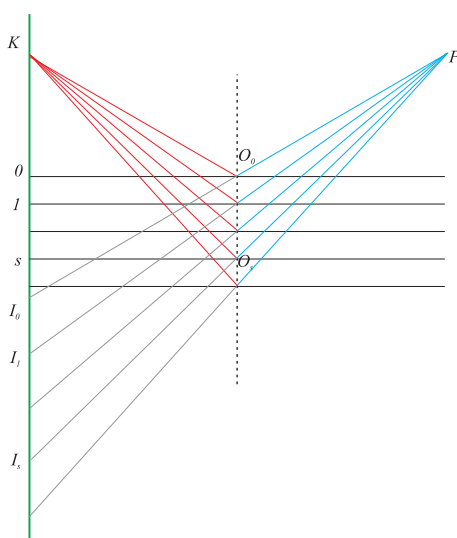
som tilsvareer ligning (1.29):

$$n = 1 - \frac{\lambda^2 r_e}{2\pi V_c} F_0$$

2.2 Beregninger for flere plan

2.2.1 Resultantamplitude

Ved å kjenne refleksjonskoeffisienten for refleksjon fra plan og brytningsindeksen til mediet, kan en nå gå videre og summere bølgene reflektert fra flere plan. En kan da bestemme amplituden til den totalt diffrakterte bølgen, resultantamplituden A_h .



Figur 2.4: Tverrsnitt av plan $0, 1, \dots, s, \dots, j$. Strålekilden er plassert i K og detektoren er plassert i P . For å gjøre geometrien enklere er K og P plassert symmetrisk i forhold til midtnormalen gjennom $O_0, O_1, \dots, O_s, \dots$, der strålene fra K treffer planene i krystallen. $I_0, I_1, \dots, I_s, \dots$, er tenkte kilder for de reflekterte bølgene.

Fra figur 2.4 er $|\vec{I_0P}| = \rho_0, \dots, |\vec{I_sP}| = \rho_s$ og $|\vec{I_0I_s}| = 2sd_{hkl}$. Vinkelen $\angle(O_sK, O_sI_s) = 2\theta_s$ og $\angle(O_sK, O_sP) = \pi - 2\theta_s$.

Fra ligning (2.5) har vi den reflekterte bølgen fra det øverste planet, $s = 0$. Den innkommende bølgen til det andre planet er transmittert gjennom det øverste planet, og gitt av ligning (2.13). Ved å bruke samme fremgangsmåte som i avsnitt 2.1 for å beregne den transmitterte strålingen fra et plan, finner en også uttrykket for den transmitterte strålingen for $s = 1$. Denne reflekterte bølgen treffer det øverste planet igjen og blir dermed transmittert og det skjer en absorpsjon. Fra avsnitt 2.1.3 har en da at strålen som treffer målepunktet P er gitt som:

$$A_r^{(1)} = -iq b^2 \tilde{A}_0 \frac{\exp [2\pi i (\nu t - k \rho_1) - 2iq_0]}{\rho_1}$$

Ved å gjøre dette for alle planene og summere alle bidragene, finner en den totale amplituden for den reflekterte strålingen fra s plan som:

$$\begin{aligned} A_h &= (-iq) \tilde{A}_0 \frac{\exp [2\pi i (\nu t - k \rho_0)]}{\rho_0} \\ &+ (-iq) b^2 \tilde{A}_0 \frac{\exp [2\pi i (\nu t - k \rho_1) - 2iq_0]}{\rho_1} \\ &+ \dots \\ &+ (-iq) b^{2s} \tilde{A}_0 \frac{\exp [2\pi i (\nu t - k \rho_s) - 2isq_0]}{\rho_s} \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (2.18)$$

Det er en form for asymmetri i dette uttrykket: q_0 blir tatt nøye med i regnskapet, mens $-iq$ bare blir tatt med en gang. Denne modellen tar nøye hensyn til spredningsbidragene i foroverretning og absorpsjon. Utover dette tas det ikke hensyn til multippel spredning. Dette gir kinematisk intensitet, men med korrekt refraksjonseffekt, det vil si en kodet versjon av Braggs lov, når mediets brytningsindeks tas i betraktning.

En kan anta at $\rho_0 \approx \rho_s$ for nevneren i ligning (2.18) og ved å sette inn for b^2 (ligning (2.16)) blir A_h faktorisert på følgende måte:

$$\begin{aligned} A_h &= -iq \tilde{A}_0 \frac{\exp [2\pi i (\nu t - k \rho_0)]}{\rho_0} \\ &\times \{1 + \exp[-\mu d_{hkl} \csc \theta + 2\pi i k (\rho_0 - \rho_1) - 2iq_0] \\ &+ \dots \\ &+ \exp[-s\mu d_{hkl} \csc \theta + 2\pi i k (\rho_0 - \rho_s) - 2isq_0] \\ &+ \dots \} \end{aligned}$$

Videre gjør Darwin tilnærmingen $\rho_0 - \rho_s \approx -|\vec{I}_0 \vec{I}_s| \sin \theta_0$, erstatter $\rho_0 \rightarrow \rho$ og $\theta_0 \rightarrow \theta$. Totalrefleksjonsamplituden blir da:

$$A_h = -iq \tilde{A}_0 \frac{\exp [2\pi i (\nu t - k \rho)]}{\rho} \sum_{s=0}^{\infty} \exp(-s\mu d_{hkl} \csc \theta - 4\pi i k s d_{hkl} \sin \theta - 2isq_0)$$

$$\approx -iq \tilde{A}_0 \frac{\exp [2\pi i (\nu t - k \rho)]}{\rho} \frac{1}{1 - \exp(-\mu d_{hkl} \csc \theta - 4\pi i k d_{hkl} \sin \theta - 2iq_0)}$$

Matematiske detaljer:

For å beregne $\sum_{s=0}^{\infty} \exp(-s\mu d_{hkl} \csc \theta - 4\pi i k s d_{hkl} \sin \theta - 2isq_0)$ bruker en reglene for geometriske summer.

$$\sum_{s=0}^{\infty} \exp(-s\mu d_{hkl} \csc \theta - 4\pi i k s d_{hkl} \sin \theta - 2isq_0) = \sum_{s=0}^{\infty} x^s$$

hvor $x = \exp(-\mu d_{hkl} \csc \theta - 4\pi i k d_{hkl} \sin \theta - 2iq_0)$

For geometriske summer gjelder:

$$\sum_{s=0}^j x^s = \frac{1 - x^{j+1}}{1 - x}$$

Totalt antall plan, j , går mot uendelig,

$$\lim_{j \rightarrow \infty} x^{j+1} \rightarrow 0$$

siden $\Re(-\mu d_{hkl} \csc \theta - 4\pi i k d_{hkl} \sin \theta - 2iq_0) < 0$ når en har absorpsjon i systemet. Finner da den tilnærmede summen som:

$$\sum_{s=0}^{\infty} x^s \approx \frac{1}{1 - x} = \frac{1}{1 - \exp(-\mu d_{hkl} \csc \theta - 4\pi i k d_{hkl} \sin \theta - 2iq_0)}$$

Braggs ligning kjenner en som $2d_{hkl} \sin \theta_B = n\lambda$ eller uttrykt som $2kd_{hkl} \sin \theta_B = n$, hvor θ_B er Bragg vinkelen, se avsnitt 1.3. Ved å utvikle en Taylorrekke (matematisk detalj s. 47) for $\sin \theta$ om θ_B og sette dette inn i Braggs ligning får en:

$$2\pi k d_{hkl} \sin \theta \approx n\pi + 2\pi k d_{hkl} (\theta - \theta_B) \cos \theta_B$$

Ved å sette dette inn i uttrykket for den totale refleksjonsamplituden, A_h finner en:

$$\begin{aligned}
A_h &= -iq \tilde{A}_0 \frac{\exp [2\pi i (\nu t - k \rho)]}{\rho} \\
&\quad \times \frac{1}{1 - \exp[-\mu d_{hkl} \csc \theta_B - 4\pi i k d_{hkl} (\theta - \theta_B) \cos \theta_B - 2iq_0]} \\
&\approx -iq \tilde{A}_0 \frac{\exp [2\pi i (\nu t - k \rho)]}{\rho} \\
&\quad \times \frac{1}{\mu d_{hkl} \csc \theta_B + 2i[2\pi k d_{hkl} (\theta - \theta_B) \cos \theta_B + q_0]} \quad (2.19)
\end{aligned}$$

Denne tilnærmingen kan gjøres ved å bruke rekkeutviklingen av eksponentialfunksjonen når argumentet $\ll 1$.

Matematiske detaljer:

Taylorrekken for $\sin \theta$ om θ_B kan en finne på følgende måte:

$$\begin{aligned}
\sin \theta &= \sin [(\theta - \theta_B) + \theta_B] \\
&= \sin (\theta - \theta_B) \cos \theta_B + \cos (\theta - \theta_B) \sin \theta_B
\end{aligned}$$

Siden en er interessert i vinkler nær Bragg vinkelen, vil $\theta - \theta_B$ være liten. Derfor nyttes rekkeutviklingene for $\sin (\theta - \theta_B)$ og $\cos (\theta - \theta_B)$ til første orden. Setter dette inn i ligningen over og får da uttrykket for $\sin \theta$ lik:

$$\sin \theta \approx (\theta - \theta_B) \cos \theta_B + \sin \theta_B$$

For å finne Taylorrekken til $\csc \theta$ om θ_B kan en nytte programvare som Mathematica 8.0. En tar med første ordens ledd og får:

$$\csc \theta \approx \csc \theta_B$$

2.2.2 Intensitet og effekt til strålingen

Intensiteten til den reflekterte bølgen, I_h , er proporsjonal med kvadratet av størrelsen på amplituden, $I_h \propto |A_h|^2$, som finnes ved å multiplisere ligning (2.19) med den komplekskonjugerte (Griffiths, 1989, s.359):

$$I_h \propto \frac{|q|^2}{\rho^2} \frac{1}{(\mu d_{hkl} \csc \theta_B)^2 + 4[2\pi k d_{hkl}(\theta - \theta_B) \cos \theta_B + q_0]^2} \quad (2.20)$$

θ_0 beskriver nå den virkelige vinkelen mellom den innkommende strålen og planene. Vi ser av ligningen over at intensitetsfunksjonen har sin maksimalverdi når $\theta = \theta_0$ der θ_0 tilfredsstiller ligningen

$$(\theta_0 - \theta_B) \cos \theta_B + \frac{q_0}{2\pi k d_{hkl}} = 0 \quad (2.21)$$

Dersom en setter inn uttrykket for transmisjonskoeffisienten, q_0 , gitt i ligning (2.4), finner en hvor stort avviket til θ_0 er i forhold til Bragg vinkelen.

$$\theta_0 - \theta_B = \Delta\theta_B = -\frac{q_0 |\mathbf{h}| \lambda}{2\pi \cos \theta_B} \approx \frac{\lambda^2 r_e C}{V_c \pi \sin 2\theta_B} \Re F_0 \quad (2.22)$$

Dette samsvarer med ligning (4.26) s. 572 i Authier (2001). Denne forskjellen er av størrelsesorden 10^{-6} . Ligning (2.20) viser også at $I_h \propto |F_{\mathbf{h}}|^2$ som forventes i en kinematisk modell (avsnitt 1.5).

Del II

Darwins dynamiske teori i refleksjonsgeometri

Kapittel 3

Darwin II: Symmetrisk refleksjon i Bragg geometri

Dette kapitlet tar for seg Bragg refleksjon med utgangspunkt i Darwins andre artikkel (Darwin, 1914b). Det er lagt vekt på å fornye språket og formlene slik at de lett kan brukes. De er i tillegg utvidet til å ta hensyn til anomal spredning og dermed også absorpsjon. For å sette kapitlet inn i en faglig sammenheng, vises det også til andre forfattere som har brukt Darwins bidrag innenfor dynamisk røtgendiffraksjonsteori.

Etter å ha utført eksperimenter, kom Darwin fram til at beregningene av intensiteten til diffrakterte røntgenstråler i en krystall, ikke samsvarte med det som ble observert. Dette er grunnen til at Darwin skriver en oppfølgende artikkel til Darwin I (Darwin, 1914a, s. 1). I Darwin II (Darwin, 1914b, s. 675) inkluderer han en ny faktor. Denne faktoren tar hensyn til at elektroner som blir truffet av elektromagnetisk stråling vil generere ny stråling som igjen vil påvirke de andre elektronene (se avsnitt 1.4). Darwin valgte nå å bruke planbølger siden dette forenklet beregningene.

3.1 Kombinasjon av plan

I tillegg til den multiple vekselvirkningen mellom de ulike bølgene, tok han også hensyn til en liten absorpsjon i planene. Fasefaktoren til den innkommende og transmitterte bølgen som treffer et plan av atomer kan skrives som:

$$\exp\{2\pi i[\nu t - k(x \cos \theta - z \sin \theta)]\} \quad (3.1)$$

Bølgevektoren, \mathbf{k}_o , til de to bølgene er:

$$\mathbf{k}_o = k(\cos \theta \hat{i} - \sin \theta \hat{k}) \quad (3.2)$$

Tilsvarende kan fasefaktoren til den reflekterte bølgen fra overflaten til krystallen skrives som:

$$\exp\{2\pi i[\nu t - k(x \cos \theta + z \sin \theta)]\} \quad (3.3)$$

assosiert med bølgevektor:

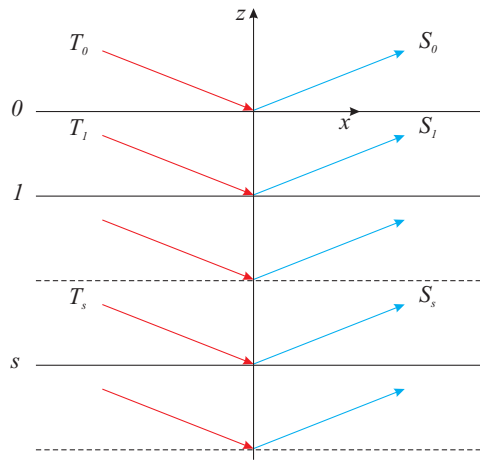
$$\mathbf{k}_h = k(\cos \theta \hat{i} + \sin \theta \hat{k}) \quad (3.4)$$

(se figur 1.5)

Darwin multipliserte den transmitterte bølgen med faktoren $(1 - b)$ hvor b representerer absorpsjonen i planet og er lik:

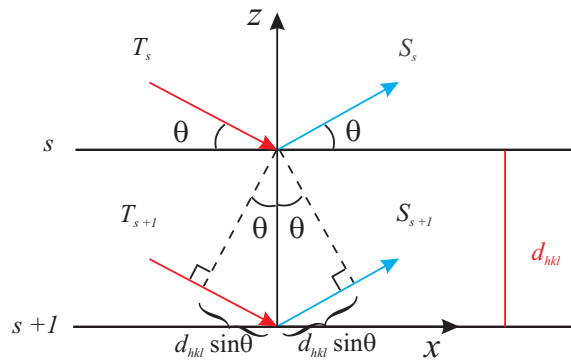
$$b = \frac{1}{2} \mu d_{hkl} \csc \theta \quad (3.5)$$

Fordi b og q_0 er små størrelser vil produktet $(1 - b)(1 - iq_0) \approx (1 - b - iq_0)$. Absorpsjonen kan også trekkes inn i imaginærdelen av q_0 (Als-Nielsen and McMorro, 2001, s. 68-69). Vi lar nå T_0 representere amplituden og fasen til den innkommende bølgen til plan θ , T_s representere amplituden og fasen til den transmitterte bølgen like over plan s og S_0 representere amplituden og fasen til den reflekterte bølgen fra plan θ . S_s er den totale reflekterte bølgen like over plan s (se figur 3.1).



Figur 3.1: Spredning i plan.

S_s er et resultat av den delen av T_s som blir reflektert i plan s og den delen av S_{s+1} som blir transmittert gjennom det (se figur 3.3). Vi ønsker å få uttrykket til den reflekterte bølgen, S_{s+1} , like under plan s . For å få denne multipliserer vi med en fasefaktor, $\exp(-i\phi)$, siden fasen til bølgen vil være forskjøvet (se figur 3.2). $\phi = 2\pi k d_{hkl} \sin \theta$.



Figur 3.2: $d_{hkl} \sin \theta$ er den ekstra lengden den reflekterte bølgen må gå.

Dersom den ekstra veilengden den transmitterte bølgen og den reflekterte bølgen tilsammen må gå, $2 d_{hkl} \sin \theta$, er lik et helt antall bølgelengder, vil den interferere konstruktivt med den reflekterte bølgen fra planet over (se avsnitt 1.3).

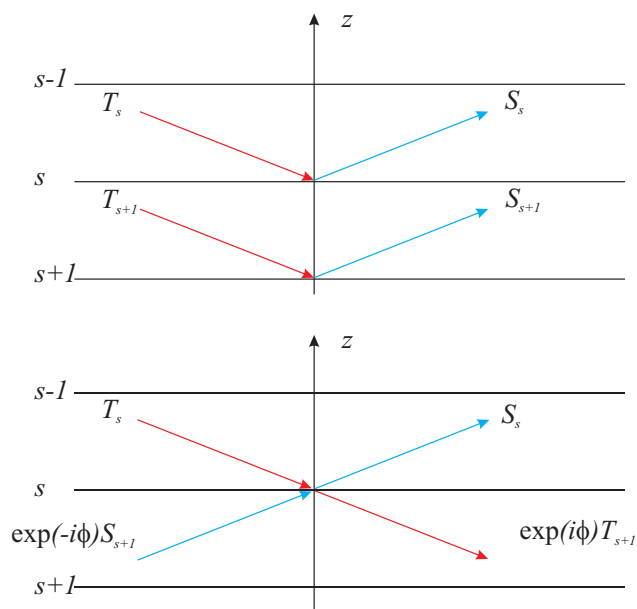
Den totale spredte bølgen gjennom plan s kan da skrives som:

$$S_s = -iqT_s + (1 - b - iq_0) \exp(-i\phi)S_{s+1} \quad (3.6)$$

Det første leddet tilsvarer den transmitterte bølgen inn på plan s multiplisert med den aktuelle refleksjonskoeffisient. Det siste leddet tilsvarer den reflekterte bølgen fra plan $s + 1$ fasekorrigert for å få bølgen like under plan s . Ved å multiplisere med $(1 - b - iq_0)$ får vi med tillegget for absorpsjon og transmisjon av denne bølgen i plan s . Dette er den første av de to rekursjonsligningene Darwin kom fram til.

På samme måte er T_{s+1} et resultat av den delen av T_s som er transmittert gjennom plan s og den delen av S_{s+1} som er reflektert i det (Se figur 3.3). Den totale transmitterte bølgen fra plan s blir da:

$$\exp(i\phi)T_{s+1} = (1 - b - iq_0)T_s - i\bar{q} \exp(-i\phi)S_{s+1} \quad (3.7)$$



Figur 3.3: S_s tilsvarer summen av den reflekterte bølgen fra plan s og den transmitterte S_{s+1} like under plan s . For å få S_{s+1} like under plan s er den multiplisert med aktuell fasefaktor.

Darwin tar ikke hensyn til anomal spredning. Ved å ta hensyn til det, vil refleksjonskoeffisienten ikke nødvendigvis være den samme for over- og undersiden til planet. James (1962) definerer derfor \bar{q} som refleksjonskoeffisienten til undersiden av planet og lar q være refleksjonskoeffisienten til oversiden av planet. Dette svarer til $F_{\bar{H}}$ og F_H (Tilley, 2007; James, 1962, s 56).

Ved å multiplisere ligning (3.7) med $\exp(-i\phi)$ får vi ligningen for T_{s+1} :

$$T_{s+1} = (1 - b - iq_0) \exp(-i\phi)T_s - i\bar{q} \exp(-i2\phi)S_{s+1} \quad (3.8)$$

(Warren, 1990, s. 321)

Vi ønsker nå å eliminere S_s og S_{s+1} fra ligning (3.6) og ligning (3.8) slik at vi får en rekursjonsligning som bare involverer transmitterte bølger. Ved å løse ligning (3.8) med hensyn på S_{s+1} og substituere $s + 1$ med s , får vi henholdsvis:

$$S_{s+1} = \frac{T_{s+1} - (1 - b - iq_0) \exp(-i\phi)T_s}{-i\bar{q} \exp(-i2\phi)} \quad (3.9a)$$

$$\text{og } S_s = \frac{T_s - (1 - b - iq_0) \exp(-i\phi)T_{s-1}}{-i\bar{q} \exp(-i2\phi)} \quad (3.9b)$$

Setter så ligning (3.9a) og (3.9b) inn i (3.6) og får:

$$\begin{aligned} & (1 - b - iq_0) \exp(-i\phi) [T_{s-1} + T_{s+1}] \\ & = [1 + q\bar{q} \exp(-i2\phi) + (1 - b - iq_0)^2 \exp(-i2\phi)] T_s \end{aligned} \quad (3.10)$$

Siden en standard rekusjonsligning på formen $y_{n+1} = y_n x$ har løsning $y_n = x^n y_0$ (Boyce and DiPrima, 2005, s. 121) prøver vi en løsningen til ligning (3.10) på formen:

$$T_s = T_0 x^s \quad (3.11)$$

Når vi bruker dette uttrykket i ligning (3.10), får vi en andregradsligning for x :

$$\begin{aligned} & (1 - b - iq_0) \exp(-i\phi) [x^{-1} + x] \\ & = 1 + q\bar{q} \exp(-i2\phi) + (1 - b - iq_0)^2 \exp(-i2\phi) \end{aligned} \quad (3.12)$$

For at ikke intensiteten til den transmitterte bølgen skal øke gjennom krystallen, må $|x| \leq 1$. Ved å sette inn løsningen $T_s = T_0 x^s$ i ligning (3.9a) og (3.9b) får vi at $S_{s+1} = S_s x$. Dette uttrykket i ligning (3.6) og sammen med ligning (3.11) gir:

$$S_s = T_0 \frac{-iqx^s}{1 - x(1 - b - iq_0) \exp(-i\phi)} \quad (3.13)$$

Ved å sette $s = 0$ får vi at forholdet mellom amplituden til den reflekterte bølgen og amplituden til den innkommende bølgen ved overflaten til krystallen blir:

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-iq}{1 - x(1 - b - iq_0) \exp(-i\phi)} \quad (3.14)$$

Definerer så en vinkel θ_0 som ligger nær Bragg vinkelen, θ_B , ved at:

$$\frac{2\pi d_{hkl} \sin \theta_0}{\lambda} = m\pi - q_0 \quad (3.15)$$

hvor q_0 er en reell størrelse og vil gi oss vinkelskiftet $\Delta\theta_B$.

Matematiske detaljer:

Ved å løse ligning (3.15) med hensyn på $m\lambda$ får vi:

$$m\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta_0 + \frac{q_0 \lambda}{\pi} \quad (3.16)$$

Fra avsnitt 2.1.3 ligning (2.17) har vi at brytningsindeksen er gitt ved:

$$n = 1 + \frac{q_0 \sin \theta_B}{2\pi k d_{hkl}} \rightarrow q_0 = \frac{2\pi d_{hkl}(n-1)}{\lambda \sin \theta_B} \quad (3.17)$$

Setter så ligning (3.17) inn i ligning (3.16) og får Braggs lov (se avsnitt 1.3) med korleksjon for brytning (Azároff, 1968, s. 131).

$$m\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta_0 \left[1 - \frac{1-n}{\sin \theta_0 \sin \theta_B} \right] \quad (3.18)$$

$$\approx 2d_{hkl} \sin \theta_0 \left[1 - \frac{1-n}{\sin^2 \theta_B} \right] \quad (3.19)$$

Derfor må θ_0 være den eksakte Bragg vinkelen der en har tatt hensyn til brytningsindeksen.

Siden vi kun er interessert i et vinkelintervall som ligger nær θ_0 , introduserer vi en liten størrelse v som modellerer vinkelavviket fra θ_0 slik at:

$$\frac{2\pi d_{hkl} \sin \theta_0}{\lambda} = m\pi - q_0 + v \quad (3.20)$$

hvor

$$v = \frac{2\pi d_{hkl}}{\lambda} (\sin \theta - \sin \theta_0) = \frac{2\pi d_{hkl}}{\lambda} \cos \theta_0 (\theta - \theta_0) \quad (3.21)$$

For matematiske detaljer se avsnitt 2.2 s 47.

Ved å kombinere at $\phi = 2\pi \frac{d_{hkl} \sin \theta}{\lambda}$ og ligning (3.20) får vi at:

$$\begin{aligned} \exp[-i\phi] &= \exp[-i(m\pi - q_0 + v)] \\ &= (-1)^m \exp[i(q_0 - v)] \\ &= (-1)^m \left(1 + iq_0 - iv + \frac{(iq_0 - iv)^2}{2} + \dots \right) \\ &\approx (-1)^m (1 + iq_0 - iv) \end{aligned} \quad (3.22)$$

Vi kan se bort fra ledd av andre orden fordi q_0 og v er små størrelser.

Ved å sette uttrykket for $\exp[-i\phi]$ inn i ligning (3.14) og igjen se bort fra ledd av andre orden (b er også liten), får vi:

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-iq}{1 - x(-1)^m(1 - b - iv)} \quad (3.23)$$

hvor x er roten av

$$(-1)^m(1 - b - iv)[x^{-1} + x] = 1 + q\bar{q} + (1 - b - iv)^2 \quad (3.24)$$

Denne ligningen kan finnes ved å sette uttrykket for $\exp[-i\phi]$ inn i ligning (3.12) og igjen se vekk fra ledd høyere enn orden to.

For å bestemme x , prøver vi:

$$x = (-1)^m(1 - \eta) \quad (3.25)$$

hvor η er en liten størrelse. Vi velger løsningen (ligning (3.27)) slik at $|x| \leq 1$. Vi får da, ved å bruke rekkeutvikling for $\frac{1}{1-\eta}$ og neglisjere ledd hvor η er av orden større enn to:

$$\begin{aligned} x^{-1} + x &= (-1)^m \left[\left(\frac{1}{1-\eta} \right) + (1-\eta) \right] \\ &= (-1)^m (1 + \eta + \eta^2 \dots + 1 - \eta) \\ &= (-1)^m (2 + \eta^2) \end{aligned} \quad (3.26)$$

Kombinerer så dette med ligning (3.24) og får:

$$\eta^2 = q\bar{q} + (b + iv)^2 \quad (3.27)$$

$$\rightarrow \eta = \pm [q\bar{q} + (b + iv)^2]^{\frac{1}{2}} \quad (3.28)$$

Bruker så ligning (3.25) og ligning (3.27) i ligning (3.23). Ser vekk fra b, v og η av høyere orden enn to siden de er små størrelser. Uttrykk for den reflekterte og innkommende bølgen til plan s avhengig av v blir da:

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-iq}{b + iv \pm [q\bar{q} + (b + iv)^2]^{\frac{1}{2}}} \quad (3.29)$$

Warren (1990) skriver uttrykket avhengig av en vinkelvariabel og innfører fire nye variabler: $\epsilon = \theta - \theta_0$, u , \bar{u} og h slik at:

$$\epsilon = \theta - \theta_0 = \frac{v\lambda}{2\pi d_{hkl} \cos \theta_B}, \quad u = \frac{q\lambda}{2\pi d_{hkl} \cos \theta_B}, \quad \bar{u} = \frac{\bar{q}\lambda}{2\pi d_{hkl} \cos \theta_B}, \quad h = \frac{b\lambda}{2\pi d_{hkl} \cos \theta_B}. \quad (3.30)$$

Tilsvarende:

$$\epsilon = \theta - \theta_0, \quad u = \frac{-\lambda^2 r_e}{V_c \pi \sin 2\theta_B} F_H, \quad \bar{u} = \frac{-\lambda^2 r_e}{V_c \pi \sin 2\theta_B} F_{\bar{H}}, \quad h = \frac{\mu\lambda}{\pi \sin 2\theta_B}. \quad (3.31)$$

Ved å sette de nye variablene inn i ligning (3.29) får vi at forholdet blir:

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-iu}{h + i\epsilon \pm [u\bar{u} + (h + i\epsilon)^2]^{\frac{1}{2}}} \quad (3.32)$$

3.2 Spredning i plan uten absorpsjon

Når absorpsjonen er så liten i forhold til refleksjonskoeffisienten, at den kan neglisjeres kan ligning (3.32) skrives som:

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-iu}{i\epsilon \pm (u\bar{u} - \epsilon^2)^{\frac{1}{2}}} \quad (3.33)$$

Dette uttrykket fungerer bra når $\epsilon^2 < u\bar{u}$ fordi vi da ikke får et negativt tall under rottegnet. Når $\epsilon^2 > u\bar{u}$ er det hensiktsmessig å skrive om uttrykket ved at $(u\bar{u} - \epsilon^2)^{\frac{1}{2}} = i(\epsilon^2 - u\bar{u})^{\frac{1}{2}}$. Forholdet mellom den reflekterte og innkommende bølgen kan da skrives som:

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-u}{\epsilon \pm (\epsilon^2 - u\bar{u})^{\frac{1}{2}}} \quad (3.34)$$

For å avgjøre hvilket fortegn som skal brukes i nevneren, tar Warren (1990) utgangspunkt i at nevneren ikke skal gå mot null for store verdier av ϵ . Vi må derfor bruke negativt fortegn når ϵ er negativ og positivt fortegn når ϵ er positiv. Als-Nielsen og McMorro (2001) kommer fram til samme avgjørelse, men bruker en annen argumentasjon. Ved valg av positivt fortegn, vil grensen $\epsilon \gg u$ gi en redusert intensitet tilsvarende $[u/(2\epsilon)]^2$. For negative ϵ , velger de negativt tegn slik at for $|\epsilon| \gg u$ vil dette igjen gi en redusert intensitet tilsvarende $[u/(2\epsilon)]^2$. Når $|\epsilon| < u$ vil roten bli imaginær og intensitetsforholdet vil da bli 1 (Warren, 1990; Als-Nielsen and McMorro, 2001, s. 182).

Forholdet mellom intensiteten til den totale spredte strålingen og intensiteten til den innkommende strålingen kan skrives som:

$$\frac{I_h}{I_0} = \left| \frac{S_0}{T_0} \right|^2 \quad (3.35)$$

Forholdet for de tre forskjellige vinkelområder blir da:

$$\frac{I_h}{I_0} = \begin{cases} \frac{|u|^2}{\left[\epsilon - (\epsilon^2 - u\bar{u})^{\frac{1}{2}} \right]^2} & \epsilon < -u \\ 1 & -u \leq \epsilon < u \\ \frac{|u|^2}{\left[\epsilon + (\epsilon^2 - u\bar{u})^{\frac{1}{2}} \right]^2} & \epsilon \geq u \end{cases} \quad (3.36)$$

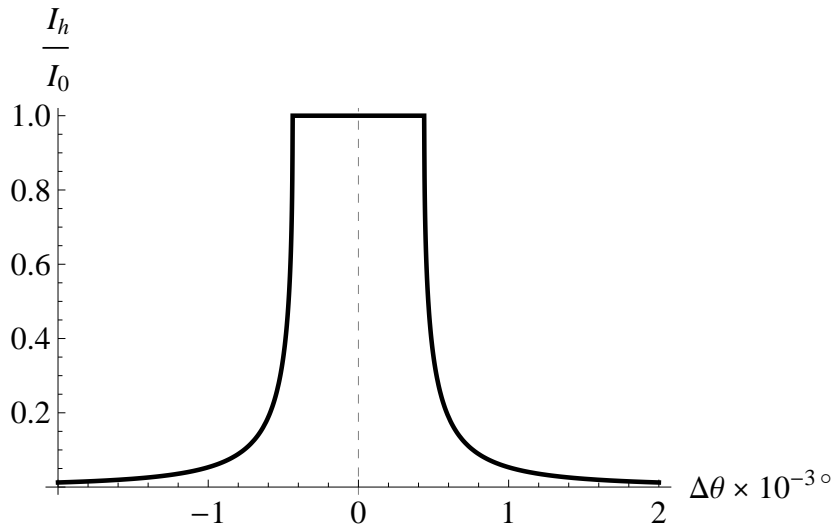
I området $-u < \epsilon < u$ er forholdet lik én. Det vil si at intensiteten til den reflekterte strålen er lik intensiteten til den innkommende. Vi sier da at refleksjonen er perfekt.

3.2.1 Grafisk framstilling av I_h/I_0 som funksjon av $\Delta\theta$

Det er hensiktsmessig å plote I_h/I_0 som funksjon av $\Delta\theta$. Dette kan gjøre ved å uttrykke ligning (3.36) som en funksjon av $\eta = \epsilon/u$. Intensitetsforholdet blir:

$$\frac{I_h}{I_0}(\eta) = \begin{cases} \frac{1}{\eta - (\eta^2 - 1)^{\frac{1}{2}}} & \eta < -1 \\ 1 & -1 \leq \eta < 1 \\ \frac{1}{\eta + (\eta^2 - 1)^{\frac{1}{2}}} & \eta \geq 1 \end{cases} \quad (3.37)$$

Dette uttrykket kan enkelt plottes, i for eksempel Mathematica 8.0 (se Appendix). Ved å erstatte η med $\frac{2\pi}{1000 \cdot 360} u$ plottes intensitetsforholdet som funksjon av $\Delta\theta$ i $\frac{1}{1000}$ grader. Resultatet blir da den kjente "rocking curve" (se figur 3.4) uten absorpsjon.



Figur 3.4: Darwin kurven for symmetrisk Bragg refleksjon uten absorpsjon. Her for Silisium, med valgte størrelser: $hkl = 202$ og $\lambda = 1.0 \text{ \AA}$. Kurven er symmetrisk om $\Delta\theta = 0$ som tilsvarer $\theta = \theta_0$ (Minner om at θ_0 er Bragg vinkelen korrigert for brytning). I det midterste området er intensitetsforholdet lik 1. Det vil si at refleksjonen er perfekt. Intensiteten til den innkommende strålen er altså lik intensiteten til den reflekterte.

3.3 Spredning i plan med absorpsjon

3.3.1 Darwins bidrag

Da Darwin hadde kommet fram til ligning (3.29) valgte han å se vekk i fra absorpsjon i videre beregninger fordi han mente at b var mye mindre enn q slik at b/q kunne neglisjeres. James (1962) brukte Darwins bidrag for å beregne intensitetsforholdet uten absorpsjon, men brukte Prins-metoden for beregninger med absorpsjon.

3.3.2 Prins-metoden

J. A. Prins (Prins, 1930) bygget videre på Darwin og Ewalds dynamiske teori. Han la vekt på innflytelsen absorpsjon har og kom fram til et uttrykk for intensitetsforholdet hvor absorpsjonen ikke var neglisjert. Prins gjorde dette på en enklere måte enn Darwin. I stedet for å introdusere absorpsjonsfaktoren b ved å multiplisere den innkommende amplituden med $(1 - b - iq_0)$ for å få amplituden til den transmitterte bølgen, antok Prins at q , \bar{q} og q_0 var komplekse størrelser (James, 1962, s. 57).

Warren (1990) bruker en forenklet Prins-metode blant annet fordi det nå finnes tabulerte verdier av imaginærdelen til atomformfaktoren. Det er denne metoden som blir brukt videre.

Fra avsnitt 3.1 ligning (3.32) og (3.30) har vi at:

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-iu}{h + i\epsilon \pm [u^2 + (h + i\epsilon)^2]^{\frac{1}{2}}}$$

$$u = \frac{q\lambda}{2\pi d_{hkl} \cos \theta_B} = \frac{-\lambda^2 r_e}{V_c \pi \sin 2\theta_B} F_H$$

$$h = \frac{b\lambda}{2\pi d_{hkl} \cos \theta_B} = \frac{\mu\lambda}{2\pi \sin 2\theta_B}.$$

hvor vi har satt $u = \bar{u}$.

I atomformfaktoren, $f_n = f_n^{(0)} + f'_n + if''_n$, er det if''_n som gir opphav til absorpsjon og at spredningsevnen til planet avviker i forhold til forside og bakside. q må derfor være en kompleks størrelse og av det følger det at u

også må være kompleks. En lar derfor $u = u_r(1 + i\sigma)$ hvor u_r er realdelen til u og σ er forholdet mellom imaginærdelen og realdelen til f_n , slik at:

$$\sigma = \frac{f_n''}{f_n^{(0)} + f_n'} \quad (3.38)$$

Warren (1990) introduserer så to nye parametre:

$$p = \frac{\epsilon}{u_r}, \quad g = \frac{h}{u_r} = \frac{-\mu V_c}{2\lambda r_e C F_{\mathbf{h}}}. \quad (3.39)$$

Forholdet mellom den reflekterte og innkommende bølgen ved plan $s = 0$ med de nye parameterene blir da:

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-i(1 + i\sigma)}{g + ip \pm [(1 + i\sigma)^2 + (g + ip)^2]^{\frac{1}{2}}} \quad (3.40)$$

For å gjøre beregningene lettere lar vi:

$$(1 + i\sigma)^2 + (g + ip)^2 = Z \exp(i\gamma) = Z(\cos \gamma + i \sin \gamma) \quad (3.41)$$

Ved å dele opp ligning (3.41) i imaginærdel og realdel får vi to nye ligninger:

$$1 + g^2 - \sigma^2 - p^2 = Z \cos \gamma \quad (3.42)$$

$$2(\sigma + gp) = Z \sin \gamma \quad (3.43)$$

Kvadrerer og adderer vi de to ligningene (3.42) får vi:

$$Z^2 = (1 + g^2 - \sigma^2 - p^2)^2 + 4(\sigma + gp)^2 \quad (3.44)$$

og ved å dividere dem får vi:

$$\tan \gamma = \frac{\sin \gamma}{\cos \gamma} = \frac{2(\sigma + gp)}{1 + g^2 - \sigma^2 - p^2} \quad (3.45)$$

Ved å kombinere ligning (3.40) med (3.41) får vi at forholdet er gitt ved:

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-i(1 + i\sigma)}{g + ip \pm [Z \exp(i\gamma)]^{\frac{1}{2}}} \quad (3.46)$$

For å få intensitetsforholdet mellom den innkommende og den reflekterte strålingen, finner vi absoluttverdien kvadrert:

$$\frac{I_h}{I_0} = \left| \frac{S_0}{T_0} \right|^2 = \frac{1 + \sigma^2}{g^2 + p^2 + Z \pm 2Z^{1/2}[g \cos(\frac{\gamma}{2}) + p \sin(\frac{\gamma}{2})]} \quad (3.47)$$

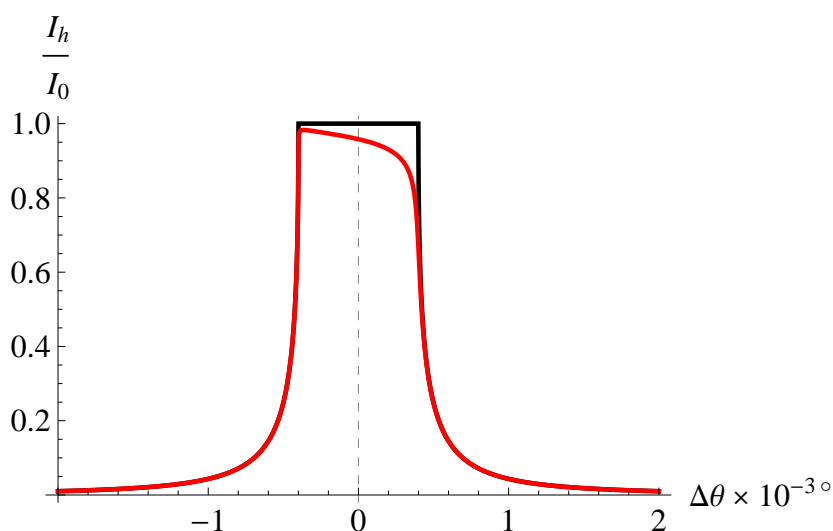
Når vi kvadrerer et rotuttrykk med cos og sin, vil vi få flere verdier:

$$\begin{aligned} \left(\sqrt{\cos\left(\frac{\gamma}{2}\right)} \right)^2 &= \cos\left(\frac{\gamma}{2} + n\pi\right) = \pm \cos\left(\frac{\gamma}{2}\right) \\ \left(\sqrt{\sin\left(\frac{\gamma}{2}\right)} \right)^2 &= \sin\left(\frac{\gamma}{2} + n\pi\right) = \pm \sin\left(\frac{\gamma}{2}\right) \end{aligned} \quad (3.48)$$

Tegntvetydigheten vi får her legges inn i den vi har fra før i ligning (3.47) og denne ligningen er derfor gyldig.

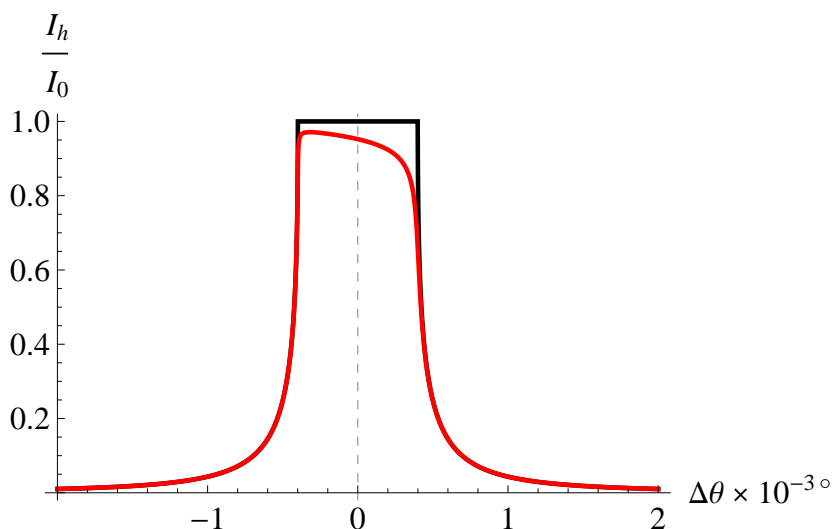
3.3.3 Grafisk framstilling av I_h/I_0 som funksjon av $\Delta\theta$ med absorpsjon

Tegntvetydigheten i ligning (3.47) avgjøres ut i fra at $\frac{I_h}{I_0}$ ikke kan være større enn 1. Setter vi inn de aktuelle verdiene for Silisium, blir svaret større enn 1 for negativt fortegn og mindre enn 1 for positivt fortegn. Velger derfor positivt fortegn videre.



Figur 3.5: Darwin kurven for symmetrisk Bragg refleksjon uten absorpsjon (svart kurve) og med absorpsjon (rød kurve). Her for Silisium, med valgte størrelser: $hkl = 202$ og $\lambda = 1.0 \text{ \AA}$. Kurven er ikke lengre symmetrisk for $\Delta\theta = 0$ og intensitetsforholdet er som forventet alltid mindre enn 1. Refleksjonen er altså ikke perfekt.

I de foregående plottene er polarisasjonsfaktoren satt til å være lik 1, det vil si at den innkommende bølgens elektriske feltvektor står vinkelrett på spredningsplanet. Når den innkommende bølgens elektriske feltvektor ligger i spredningsplanet, vil polarisasjonsfaktoren være lik $\cos 2\theta_B$ (se avsnitt 1.2). I figur 3.6 vises darwin kurven med polarisasjonsfaktor lik $\cos 2\theta_B$.

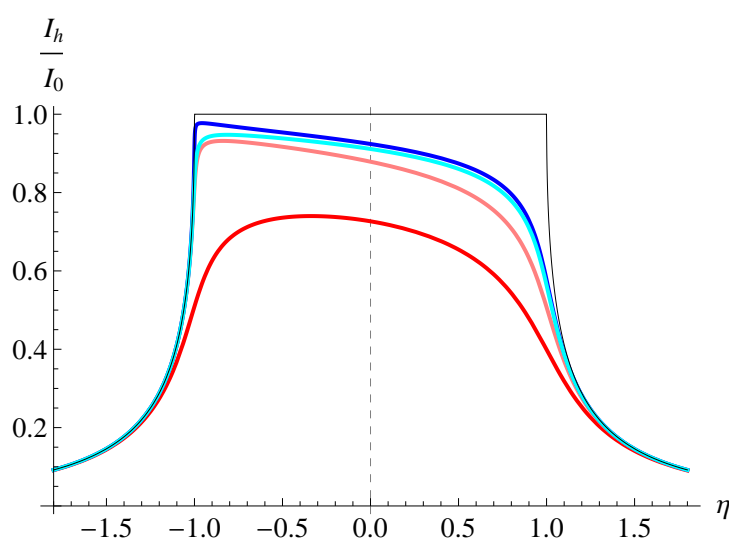


Figur 3.6: Darwin kurven for Silisium, med valgte størrelser: $hkl = 202$ og $\lambda = 1.0$ Å. Rød kurve er med absorpsjon og svart kurve er uten. Polarisasjonsfaktoren er satt til $\cos(2\theta_B) = 0.8743$.

3.3.4 Samsvar med andre kilder

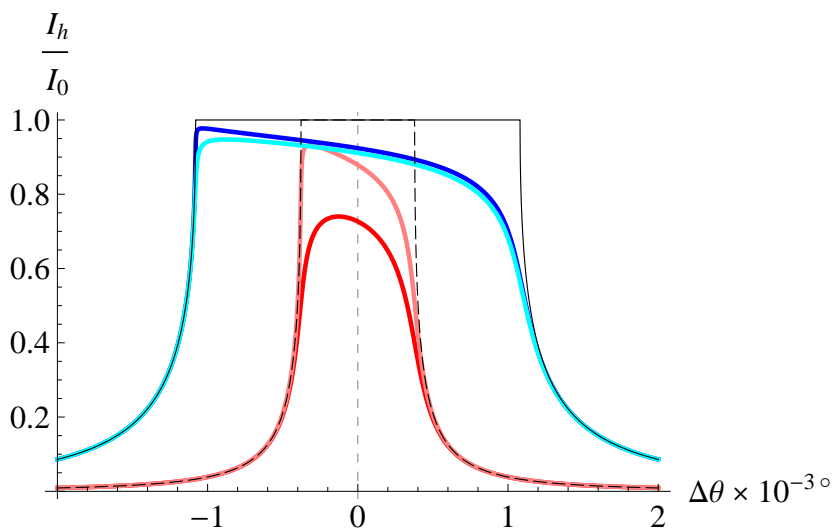
Kurvene i figur 3.5 og 3.6 har tilsvarende form som dem Allison (1932) kom fram til for kalsitt. Han brukte bølglengder fra 0.21Å til 2.3Å . Tilsvarende stemte Renninger beregninger for NaCl med $\text{CuK}\alpha$ -stråling. Dette tilsvarer beregningene til Warren (1990). Jeg vil se nærmere på disse, ved å lage et program i Mathematica 8.0 som framviser kurvene (se Appendiks). Allison og Renninger tok begge utgangspunkt i Darwins arbeid og brukte Prins-metoden for å beregne intensitetsforholdet til en absorberende perfekt krystall (Allison, 1932), (Renninger, 1934).

Warren (1990) har gjort beregninger for NaCl og plottet inntensitesforholdet for $hkl = 200$ og 400 med $\text{CuK}\alpha$ -stråling. Han bruker de to forskjellige polarisasjonsfaktorene. Kurvene han får fram tilsvarer figur 3.7 (Warren, 1990, s. 338).



Figur 3.7: Darwin kurver for NaCl med bølgelende $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$. Svart kurve: uten absorpsjon med $hkl = 200$. Mørk blå kurve: med absorpsjon, $hkl = 200$ og polarisasjonsfaktor er lik 1. Lys blå kurve: med absorpsjon, $hkl = 200$ og polarisasjonsfaktor er lik $\cos 2\theta_B = 0.9371$. Rosa kurve: med absorpsjon, $hkl = 400$ og polarisasjonsfaktor er lik 1. Rød kurve: med absorpsjon, $hkl = 400$ og polarisasjonsfaktor er lik $\cos 2\theta_B = 0.7485$.

Intensitetsforholdet i figur 3.7 gitt som funksjon av $\Delta\theta$ i 1/1000 grader; figur 3.8:

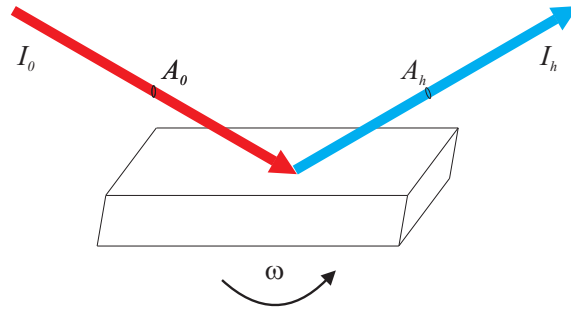


Figur 3.8: Darwin kurver som funksjons av $\Delta\theta$ for bølgelende $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$. Svart kurve: uten absorpsjon med $hkl = 200$. Mørk blå kurve: med absorpsjon, $hkl = 200$ og polarisasjonsfaktor er lik 1. Lys blå kurve: med absorpsjon, $hkl = 200$ og polarisasjonsfaktor er lik $\cos 2\theta_B = 0.9371$. Rosa kurve: med absorpsjon, $hkl = 400$ og polarisasjonsfaktor er lik 1. Rød kurve: med absorpsjon, $hkl = 400$ og polarisasjonsfaktor er lik $\cos 2\theta_B = 0.7485$.

3.4 Integrert intensitet

Den innkommende strålen med intensitet I_0 , treffer en krystall som roterer med en konstant vinkelhastighet ω slik at Braggs lov er oppfylt. Tversnittet til den innkommende strålen er lik A_0 . Den totale diffrakterte energi blir registrert av en detektor som er så stor at hele den diffrakterte energien blir målt (Se figur 3.9). Energien, E , er da gitt som en integrasjon av I_h over tid og tverrsnittsareal:

$$E = \iint I_h dA dt \quad (3.49)$$



Figur 3.9: En stråle med intensitet I_0 , treffer en krystall som roterer med en konstant vinkelhastighet ω slik at Braggs lov er oppfylt. Tversnittet til den innkommende strålen er lik A_0 og tversnittet til den diffrakterte strålen er A_h .

Bruker at effekten til den diffrakterte strålen er gitt ved $P_h = \int I_h dA$ og at $dt = \frac{d\epsilon}{\omega}$ og setter dette inn i ligning (3.49):

$$E = \frac{1}{\omega} \int P_h d\epsilon \quad (3.50)$$

Ved symmetrisk refleksjon vil tversnittsarealet, A_0 , til den innkommende strålen være lik tversnittsarealet, A_h , til den spredte strålen slik at:

$$\frac{P_h}{P_0} = \frac{I_h A_h}{I_0 A_0} = \frac{I_h}{I_0} \quad (3.51)$$

Den diffrakterte energien kan da skrives som:

$$E = \frac{P_0}{\omega} \int \frac{I_h}{I_0} d\epsilon \rightarrow \frac{E\omega}{P_0} = \int \frac{I_h}{I_0} d\epsilon \quad (3.52)$$

Bruker intensitets forholdet fra ligning (3.36) til å beregne integralet:

$$\frac{E\omega}{P_0} = \int_{\epsilon=-\infty}^{-u} \frac{u^2 d\epsilon}{\left[\epsilon - (\epsilon^2 - u^2)^{\frac{1}{2}}\right]^2} + \int_{-u}^u (1) d\epsilon + \int_{\epsilon=u}^{\infty} \frac{u^2}{\left[\epsilon + (\epsilon^2 - u^2)^{\frac{1}{2}}\right]^2} \quad (3.53)$$

Integralene kan lett løses ved for eksempel å bruke Mathematica 8.0:

$$\text{Integrate}\left[\frac{u^2}{\left(\epsilon - \sqrt{\epsilon^2 - u^2}\right)^2}, \{\epsilon, -\infty, -u\}\right]$$

$$\frac{u}{3}$$

Figur 3.10: Det første integralet beregnet i Mathematica 8.0. Siden u er kvadrert i ligning (3.51), må vi tilføye et absoluttverditegn rundt u .

$$\frac{E\omega}{P_0} = \frac{|u|}{3} + 2|u| + \frac{|u|}{3} = \frac{8|u|}{3} \quad (3.54)$$

Setter så inn for u (se ligning (3.30)) og bruker at (se avsnitt 2.1):

$$q = r_e \frac{a\lambda}{V_c \sin \theta} |F_{\mathbf{h}}| \quad (3.55)$$

Vi får da at:

$$\frac{E\omega}{P_0} = \frac{8}{3\pi} \frac{r_e \lambda^2}{V_c \sin 2\theta} |F_{\mathbf{h}}| \quad (3.56)$$

Darwin kommer altså fram til at den integrerte intensiteten er proporsjonal med $|F_{\mathbf{h}}|$ og ikke $|F_{\mathbf{h}}|^2$ som han kom fram til i Darwin I og som er “fingeravtrykket” til en kinematisk teori (Azároff, 1968, s. 209).

(Darwin, 1914b; Warren, 1990, s. 320-326)

Kapittel 4

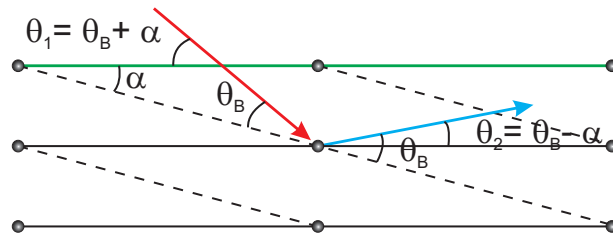
Asymmetrisk Bragg geometri

Når krystallens Bragg plan ikke lenger er parallelle med krystallens overflate, må dette tas hensyn til i beregningene for intensitetsforholdet. For å håndtere asymmetrisk Bragg geometri, har jeg tatt utgangspunkt i Warren (1990). Han går grundig igjennom de matematiske overgangene og kommer fram til et uttrykk for intensitetsforholdet. Refleksjonskoeffisientene og vinklene som angir faseforskyvningen blir gitt ut i fra Bragg planene. Jeg har valgt å gi dem ut i fra de fiktive planene som er parallelle med krystallens innfallsflate. Dette gjør jeg for å få en bedre sammenheng med symmetrisk Bragg refleksjon og fordi jeg synes logikken blir bedre. Resultatet blir det samme uavhengig av “innfallsvinkel”.

4.1 Asymmetrisk Bragg refleksjon uten absorpsjon

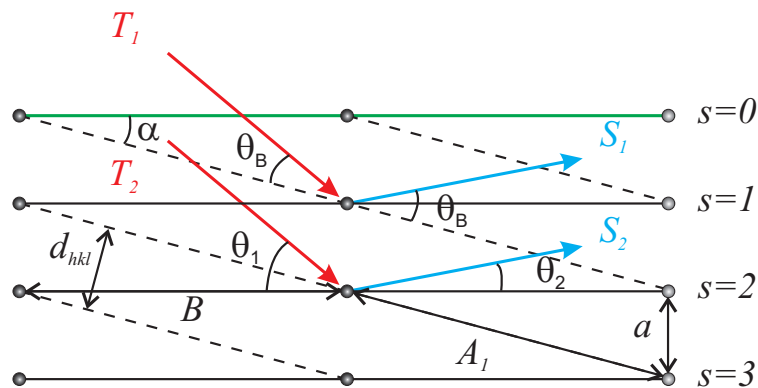
Asymmetrisk refleksjon vil si at overflaten til krystallen ikke er parallell med Bragg planene. Vinkelen mellom overflaten og Bragg planene er α og vinkelen mellom den innkommende strålen og Bragg planene er fremdeles θ_B . Det følger da at vinkelen mellom krystaloverflaten og den innkommende strålen er $\theta_B + \alpha$, og vinkelen mellom den reflekterte strålen og overflaten er $\theta_B - \alpha$ (se figur 4.1). α må ligge i området $\pm\theta_B$.

Warren (1990) viderefører en utledning brukt av Borie (Borie, 1966, s. 470-472) for symmetriske von Laue geometri. Han antar at krystallen kun består av en atomtype og at absorpsjonen kan neglisjeres. I figur 4.2 utgjør gitteret av de svarte kulene et sett av plan parallelt med inngangsflaten (grøn



Figur 4.1: Asymmetrisk Bragg refleksjon. Bragg planene (stiplede linje) er ikke lengre parallelle med krystallens innfallsflate (grønn linje).

linje). Vinkelen mellom den innkommende strålen og de horisontale planene betegnes ved θ_1 og vinkelen mellom den reflekterte strålen og de horisontale planene ved θ_2 . De horisontale planene har en avstand, a , mellom seg. En velger så en repetisjon, A_1 , i figurplanet og A_2 normalt til figurplanet slik at $A_1 A_2 = 1/M$ hvor M er antall atomer per arealenh. Det vil si at hver arealenh inneholder ett atom. Vi lar så $A_1 = \frac{a}{\sin \alpha}$ (Warren, 1990, s. 348-349).



Figur 4.2: Den grønne, de stiplede og de heltrukne linjene representerer hhv krystall-overflaten, Bragg planene og plan parallelle med krystalloverflaten. T_s representerer den innkommende bølgen som treffer plan s og S_s representerer den reflekterte bølgen fra plan s .

Fra avsnitt 2.1.1 og figur 2.1 har vi at:

$$\begin{aligned} R_{\xi\eta} &= R + \xi \cos \theta_1 + \frac{\xi^2 \sin^2 \theta_1 + \eta^2}{2R} \\ r_{\xi\eta} &= r - \xi \cos \theta_2 + \frac{\xi^2 \sin^2 \theta_2 + \eta^2}{2r} \end{aligned} \quad (4.1)$$

Ved å la $R \gg r$, får vi at summen blir:

$$R_{\xi\eta} + r_{\xi\eta} = R + r + \xi (\cos \theta_1 - \cos \theta_2) + \frac{\xi^2 \sin^2 \theta_2 + \eta^2}{2r} \quad (4.2)$$

I de horisontale planene befinner atomene seg langs gitterlinjene i posisjon $\xi = nB$, hvor $B = A_1 \cos \alpha$. Ved å innføre restriksjonen:

$$\cos \theta_1 - \cos \theta_2 = \lambda/B \quad (4.3)$$

forkortes uttrykket

$$\xi (\cos \theta_1 - \cos \theta_2) \quad (4.4)$$

i ligning (4.2) ned til $n\lambda$. Leddet gir da fasebidraget $2\pi n$ og kan forkortes vekk. Ved samme framgangsmåte som i avsnitt 2.1, fås en ligning som tilsvarer ligning (2.5):

$$A_r = -iq_2 \tilde{A}_0 \frac{\exp [2\pi i (\nu t - k \rho)]}{\rho} \quad (4.5)$$

hvor

$$q_2 = \frac{\lambda r_e C}{V_c |\mathbf{h}'| \sin \theta_2} F_{\mathbf{h}} \quad (4.6)$$

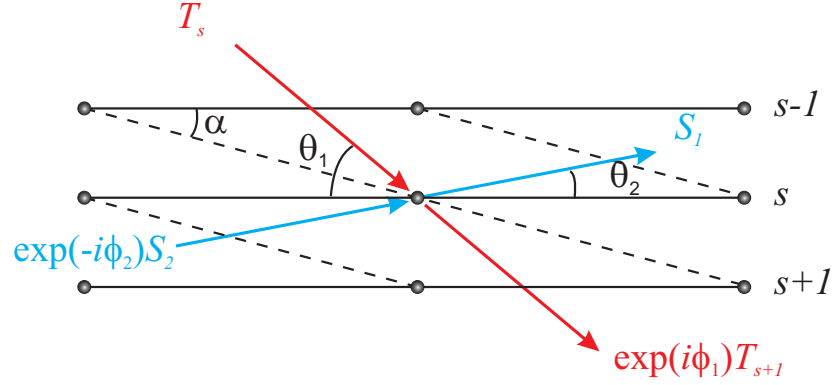
$|\mathbf{h}'|$ er den “resiproke” gittervektoren for de horisontale planene slik at $|\mathbf{h}'| = |\mathbf{h}| \cos \alpha$.

Ved å sette inn uttrykket for q (se ligning (2.7)) fås q_2 uttrykt ved q for symmetrisk refleksjon ved en vinkel lik θ_0 med Bragg planene:

$$q_2 = \frac{q \sin \theta_0}{\cos \alpha \sin \theta_2} \quad (4.7)$$

Warren (1990) introduserer så vinkler som gir faseforskyvningen (se avsnitt 3.1):

$$\phi_1 = 2\pi k \frac{d_{hkl}}{\cos \alpha} \sin \theta_1 \quad , \quad \phi_2 = 2\pi k \frac{d_{hkl}}{\cos \alpha} \sin \theta_2 \quad (4.8)$$



Figur 4.3: Den grønne, de stiplete og de heltrukne linjene representerer hhv krystall-overflaten, Bragg planene og plan parallelle med krystalloverflaten. T_s representerer den innkommende bølgen som treffer plan s og S_s representerer den reflekterte bølgen fra plan s .

Ut i fra figur 4.2 og 4.3 kan vi nå sette opp tilsvarende ligninger til ligning (3.6) og ligning (3.8):

$$S_s = -iq_2 T_s + (1 - iq_{02}) \exp(-i\phi_2) S_{s+1} \quad (4.9)$$

$$T_{s+1} = (1 - iq_{01}) \exp(-i\phi_1) T_s - iq_1 \exp[-i(\phi_1 + \phi_2)] S_{s+1} \quad (4.10)$$

q_1 , q_{01} og q_{02} er gitt på tilsvarende måte som q_2 (ligning 4.7):

$$q_1 = \frac{q \sin \theta_0}{\cos \alpha \sin \theta_1} \quad (4.11)$$

$$q_{01} = \frac{q_0 \sin \theta_0}{\cos \alpha \sin \theta_1} \quad (4.12)$$

$$q_{02} = \frac{q_0 \sin \theta_0}{\cos \alpha \sin \theta_2} \quad (4.13)$$

Ved å bruke ligning (4.10) får vi rekursjonsligninger for S_{s+1} og S_s :

$$S_{s+1} = \frac{T_{s+1} - (1 - iq_{01}) \exp(-i\phi_1) T_s}{-iq_1 \exp[-i(\phi_1 + \phi_2)]} \quad (4.14)$$

$$S_s = \frac{T_s - (1 - iq_{01}) \exp(-i\phi_1) T_{s-1}}{-iq_1 \exp[-i(\phi_1 + \phi_2)]} \quad (4.15)$$

Ved å sette disse ligningene inn i ligning 4.9 fås en ligning som kun inneholder T_s :

$$\begin{aligned} & (1-iq_{02}) \exp(-i\phi_2)T_{s+1} + (1-iq_{01}) \exp(-i\phi_1)T_{s-1} \\ & = \{1 + q_1q_2 \exp[-i(\phi_1 + \phi_2)] + (1-iq_{02})(1-iq_{01}) \exp[-i(\phi_1 + \phi_2)]\} T_s \end{aligned} \quad (4.16)$$

Ligning (4.16) tilsvarener ligning (3.10) og vi kan derfor også her prøve en løsning på formen:

$$T_s = T_0 x^s \quad (4.17)$$

Ved å sette inn løsningen i ligning (4.16) fås en andregrads ligning for x :

$$\begin{aligned} & (1-iq_{02}) \exp(-i\phi_2)x + (1-iq_{01}) \exp(-i\phi_1)x^{-1} \\ & = 1 + q_1q_2 \exp[-i(\phi_1 + \phi_2)] + (1-iq_{02})(1-iq_{01}) \exp[-i(\phi_1 + \phi_2)] \end{aligned} \quad (4.18)$$

Definerer så en vinkel θ_{01} for den innkommende strålen. θ_{01} ligger nær θ_B og er definert ved:

$$2 \pi k \frac{d_{hkl}}{\cos \alpha} \sin \theta_{01} = m\pi - q_{01} \quad (4.19)$$

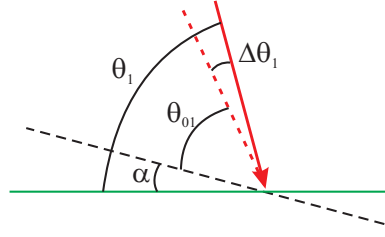
Setter så $\theta_1 = \theta_{01} + \Delta\theta_1$ inn i ligning (4.8) og får:

$$\phi_1 = 2 \pi k \frac{d_{hkl}}{\cos \alpha} \sin(\theta_{01} + \Delta\theta_1) \quad (4.20)$$

θ_{01} er Bragg vinkelen der en har tatt hensyn til brytning og $\Delta\theta_1$ er vinkelen mellom den innkommende strålen og retningen til den eksakte retningen der Braggs lov med korreksjon for brytning er oppfylt (se figur 4.4).

Når $\Delta\theta_1$ er liten, vil ϕ_1 skille seg lite fra ligning (4.19) og vi får at:

$$\phi_1 = 2 \pi k \frac{d_{hkl}}{\cos \alpha} \sin(\theta_{01} + \Delta\theta_1) = m\pi - q_{01} + v_1 \quad (4.21)$$



Figur 4.4: Den røde linjen er den innkommende strålen og den røde stiplede linjen viser den eksakte retningen der Braggs lov med korreksjon for brytning er oppfylt.

Fra ligning (4.19) og ligning (4.21) følger det at:

$$v_1 = 2\pi k \frac{d_{hkl}}{\cos \alpha} \cos \theta_{01} \Delta \theta_1 \quad (4.22)$$

og at:

$$\exp[-i\phi_1] = \exp[-i(m\pi - q_{01} + v_1)] \approx (-1)^m (1 + iq_{01} - iv_1) \quad (4.23)$$

Se ligning (3.22) for matematiske detaljer. På samme måte definerer vi en vinkel θ_{02} for den reflekterte strålen:

$$2\pi k \frac{d_{hkl}}{\cos \alpha} \sin \theta_{02} = m\pi - q_{02} \quad (4.24)$$

Setter så $\theta_2 = \theta_{02} + \Delta \theta_1$ inn i ligning (4.8) og får:

$$\phi_2 = 2\pi k \frac{d_{hkl}}{\cos \alpha} \sin(\theta_{02} + \Delta \theta_2) = m\pi - q_{02} + v_2 \quad (4.25)$$

hvor

$$v_2 = 2\pi k \frac{d_{hkl}}{\cos \alpha} \cos \theta_{02} \Delta \theta_2 \quad (4.26)$$

og at:

$$\exp[-i\phi_2] = \exp[-i(m\pi - q_{02} + v_2)] = (-1)^m (1 + iq_{02} - iv_2) \quad (4.27)$$

Kombinerer så ligning (4.23) og ligning (4.27) med ligning (4.18) og ser bort fra ledd av andre orden. Vi får da at:

$$(-1)^m[(1 - iv_1)x^{-1} + (1 - iv_2)x] = 1 + q_1q_2 + (1 - iv_1)(1 - iv_2) \quad (4.28)$$

lar vi:

$$v_1 = v + \Delta v, \quad v_2 = v - \Delta v, \quad v_1 + v_2 = 2v \quad (4.29)$$

får vi at:

$$(1 - iv_1) = \exp(-iv_1) = (1 - iv) \exp(-i\Delta v) \quad (4.30)$$

$$(1 - iv_2) = \exp(-iv_2) = (1 - iv) \exp(i\Delta v) \quad (4.31)$$

Ligning (4.22) og ligning (4.26) gir oss at v kan skrives som:

$$v = \frac{v_1 + v_2}{2} \approx \pi \frac{d_{hkl}}{\lambda \cos \alpha} \cos \theta_B (\Delta \theta_1 + \Delta \theta_2) \quad (4.32)$$

Siden θ_1 og θ_2 må tilfredstille ligning (4.3), er sammenhengen mellom $\Delta \theta_1$ og $\Delta \theta_2$:

$$\sin \theta_1 \Delta \theta_1 - \sin \theta_2 \Delta \theta_2 = 0 \quad (4.33)$$

Ved å løse ligning (4.33) med hensyn på $\Delta \theta_2$ og sette inn i ligning (4.32) får vi at v blir:

$$v = \pi \frac{d_{hkl}}{\lambda \cos \alpha} \cos \theta_B \left(1 + \frac{\sin \theta_1}{\sin \theta_2} \right) \Delta \theta_1 \quad (4.34)$$

$$= 2\pi \frac{d_{hkl} \cos \theta_B \sin \theta_B}{\lambda \sin \theta_2} \Delta \theta_1 \quad (4.35)$$

Bruker så ligning (4.30) og ligning (4.31) i ligning (4.28) og får at:

$$(-1)^m(1 - iv) \{ [\exp(i\Delta v)x]^{-1} + \exp(i\Delta v)x \} = 1 + q_1q_2 + (1 - iv)^2 \quad (4.36)$$

For å løse denne ligningen lar vi:

$$\exp(i\Delta v)x = (-1)^m(1 - \eta) \quad (4.37)$$

hvor η er en liten størrelse. Se ligning (3.26) for matematiske detaljer. Ved å rekkeutvikle $\frac{1}{1-\eta}$ får vi at:

$$[\exp(i\Delta v)x]^{-1} + \exp(i\Delta v)x = (-1)^m(2 + \eta^2) \quad (4.38)$$

Ligning (4.36) reduseres da til:

$$(1 - iv)(2 + \eta^2) = 1 + q_1q_2 + (1 - iv)^2 \quad (4.39)$$

som gir:

$$\eta = \pm(q_1q_2 - v^2)^{\frac{1}{2}} \quad (4.40)$$

Bruker ligning (4.40) i ligning (4.37) og løser med hensyn til x :

$$x = \exp(-i\Delta v)(-1)^m \left[1 \mp (q_1q_2 - v^2)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (4.41)$$

Fra ligning (4.14) og ligning (4.17) følger det at $S_{s+1} = xS_s$. Ved å bruke ligning (4.9) og sette $s = 0$ får vi at forholdet mellom den innkommende og reflekterte bølgen blir:

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-iq_2}{1 - x(1 - iq_2)\exp(-i\phi_2)} \quad (4.42)$$

Setter så inn for x fra ligning (4.41) og bruker ligning (4.27) og ligning (4.31), slik at:

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-iq_2}{1 - (1 - iv)[1 - (\pm)(q_1q_2 - v^2)^{\frac{1}{2}}]} = \frac{-iq_2}{iv \pm (q_1q_2 - v^2)^{\frac{1}{2}}} \quad (4.43)$$

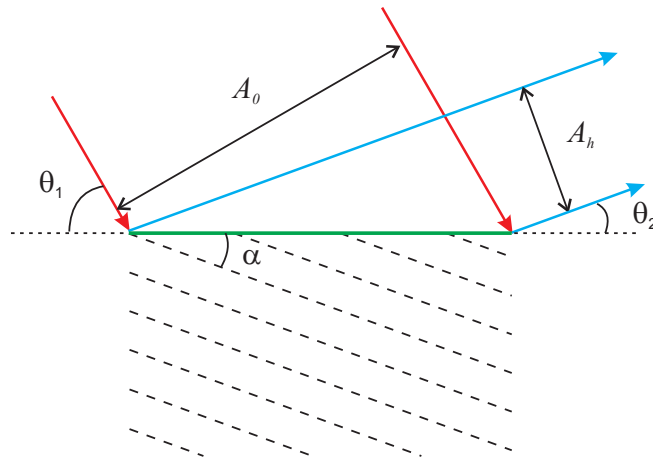
I området der $v^2 < q_1q_2$ er intensitetsforholdet gitt ved:

$$\frac{I_h}{I_0} = \left(\frac{S_0}{T_0}\right) \left(\frac{S_0}{T_0}\right)^* = \left[\frac{-iq_2}{iv \pm (q_1q_2 - v^2)^{\frac{1}{2}}}\right] \left[\frac{iq_2}{-iv \pm (q_1q_2 - v^2)^{\frac{1}{2}}}\right] = \frac{q_2}{q_1} \quad (4.44)$$

Fra ligning (4.7) og ligning (4.11) følger det at:

$$\frac{I_h}{I_0} = \frac{\sin \theta_1}{\sin \theta_2} \quad (4.45)$$

Fra geometri gitt i figur 4.2 vil ligning (4.45) gi et intensitetsforhold som er større enn en. Dette skyldes at bredden til den innkommende strålen og den reflekterte strålen er forskjellige. Effekten til den innkommende strålen, $P_0 = I_0 A_0$, vil i det midterste området da være lik effekten til den reflekterte strålen, $P_h = I_h A_h$ (se figur 4.5) (Als-Nielsen and McMorrow, 2001, s. 194).



Figur 4.5: Tverrsnittsarealet, A_0 , til den innkommende strålen er større enn tverrsnittsarealet, A_h , til den reflekterte når $\theta_1 > \theta_2$.

Intensitetsforholdet for hele vinkelområdet er:

$$\frac{I_h}{I_0} = \begin{cases} \frac{q_2^2}{\left[v - (v^2 - q_1 q_2)^{\frac{1}{2}}\right]^2} & v < -\sqrt{q_1 q_2} \\ \frac{q_2}{q_1} & -\sqrt{q_1 q_2} \leq v < \sqrt{q_1 q_2} \\ \frac{q_2^2}{\left[v + (v^2 - q_1 q_2)^{\frac{1}{2}}\right]^2} & v \geq \sqrt{q_1 q_2} \end{cases} \quad (4.46)$$

4.2 Asymmetrisk Bragg refleksjon med absorpsjon

Absorpsjon kan enklest inkluderes ved å ta utgangspunkt i ligning (4.21) og ligning (4.25):

$$\phi_1 = 2\pi k \frac{d_{hkl}}{\cos \alpha} \sin(\theta_{01} + \Delta\theta_1) = m\pi - q_{01} + v_1$$

$$\phi_2 = 2\pi k \frac{d_{hkl}}{\cos \alpha} \sin(\theta_{02} + \Delta\theta_2) = m\pi - q_{02} + v_2$$

Definerer nå to nye størrelser \tilde{v}_1 og \tilde{v}_2 ved at:

$$v_1 = \tilde{v}_1 + q_{01} \quad (4.47)$$

$$v_2 = \tilde{v}_2 + q_{02} \quad (4.48)$$

Det følger at v er gitt ved:

$$v = \frac{\tilde{v}_1 + \tilde{v}_2}{2} = \frac{q_{01} + q_{02}}{2} \quad (4.49)$$

$$= \tilde{v} + \frac{q_{01} + q_{02}}{2} \quad (4.50)$$

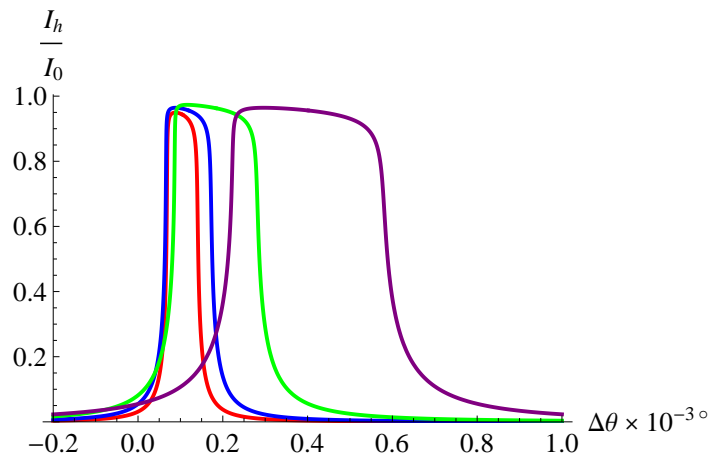
som settes inn i ligning (4.43) slik at intensitetsforholdet med absorpsjon blir:

$$\frac{S_0}{T_0} = \frac{-q_2}{\tilde{v} + \frac{q_{01} + q_{02}}{2} \pm \left(\left(\tilde{v} + \frac{q_{01} + q_{02}}{2} \right)^2 - q_1 q_2 \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (4.51)$$

\tilde{v} er fremdeles gitt ved ligning (4.35), men $\Delta\theta_1$ må nå forstås som avviket for den innkommende stråle fra den geometriske Bragg vinkel θ_B .

4.2.1 Grafisk framstilling av asymmetrisk Bragg refleksjon med absorpsjon

Når α minker vil tvernsnittsarealet, A_1 , også minke (se figur 4.5). Følgende vil A_2 øke når α minker. Dette fører til at refleksjonsområdet vil øke når α minker (se figur 4.6). Dette er en konsekvens av Liouvilles teorem som sier at for partikkelbølger, vil produktet av strålebredde og divergens være konstant (Als-Nielsen and McMorrow, 2001, s. 194). Figur 4.6 er lagd i Mathematica 8.0 (se Appendix).



Figur 4.6: Darwin kurver med absorpsjon for asymmetrisk refleksjon. Her for Silisium med $hkl = 111$, $\lambda = 1.000 \text{ \AA}$ og med polarisasjonsfaktor lik 1. $\theta_B = 9.176^\circ$ Rød kurve: $\alpha = 7.000^\circ$. Blå kurve: $\alpha = 5.000^\circ$. Grøn kurve: $\alpha = 0.000^\circ$. Lilla kurve: $\alpha = -5.000^\circ$.

Del III

Takagi ligningene

Kapittel 5

Takagi ligningene

Ved å ta utgangspunkt i von Laues dynamiske teori (avsnitt 1.6), kan en komme fram til en generell dynamisk teori som gjelder for alle typer innkommende bølger og for både perfekte og imperfekte krystallsystemer. Denne teorien kalles Takagi teori (Takagi, 1962; Takagi, 1969). Dette kapitlet vil vise hvordan en kommer fram til et sett av koblede partielle differensialligninger for amplitudene $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$.

5.1 Utledning av Takagis differensialligninger

I Takagis definisjon av forskyvningsfeltet er amplituden posisjonsavhengig. Forskyvningsfeltet er da gitt ved ligning (1.41):

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \sum_p \mathbf{D}_p(\mathbf{r}) e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r})}$$

Bølgevektoren, \mathbf{k}_p , inne i krystallen er fiksert av standard grensebetingelser i elektromagnetisk teori.

Bølgeligningen for forskyvningsfeltet er gitt ved ligning (1.40):

$$\nabla \times \nabla \times (1 - \chi_e) \mathbf{D} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} \quad (5.1)$$

som tilsvarer:

$$-\nabla^2 \mathbf{D} + \chi_e \nabla^2 \mathbf{D} + (\nabla \times \mathbf{D}) \times \nabla \chi_e + (\nabla \chi_e \cdot \nabla) \mathbf{D} - (\mathbf{D} \cdot \nabla) \nabla \chi_e + \mathbf{D} \nabla^2 \chi_e = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} \quad (5.2)$$

Beregner så hvert av leddene i bølgeligningen:

$$\begin{aligned} -\nabla^2 \mathbf{D} &= \sum_p [-(\nabla^2 \mathbf{D}_p) e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r})} + \mathbf{D}_p (-\nabla^2 e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r})})] \\ &= \sum_p [-(\nabla^2 \mathbf{D}_p) e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r})} \\ &\quad + 2 \cdot 2\pi i (\mathbf{k}_p \cdot \nabla) \mathbf{D}_p e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r})} + 4\pi^2 (\mathbf{k}_p)^2 \mathbf{D}_p e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r})}] \\ &= \sum_p [-\nabla^2 \mathbf{D}_p + 4\pi i (\mathbf{k}_p \cdot \nabla) \mathbf{D}_p + 4\pi^2 (\mathbf{k}_p)^2 \mathbf{D}_p] e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r})} \quad (5.3) \end{aligned}$$

Ved å multiplisere med den dielektriske susceptibiliteten (se ligning (1.42)) på begge sider får vi:

$$\chi_e \nabla^2 \mathbf{D} = \sum_g \sum_h [\chi_h \nabla^2 \mathbf{D}_g - 4\pi i \chi_h (\mathbf{k}_g \cdot \nabla) \mathbf{D}_g - 4\pi^2 \chi_h (\mathbf{k}_g)^2 \mathbf{D}_g] e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_{g+h} \cdot \mathbf{r})} \quad (5.4)$$

Bruker at:

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \times \mathbf{C} = -\mathbf{C} \times (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \quad (5.5)$$

$$\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \quad (5.6)$$

Til å bestemme:

$$\begin{aligned} (\nabla \times \mathbf{D}) \times \nabla \chi_e &= \sum_g \sum_h \{ 2\pi i \chi_h [\mathbf{h} \times (\nabla \times \mathbf{D}_g)] \} e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_{g+h} \cdot \mathbf{r})} \\ &\quad + \sum_g \sum_h \{ 4\pi^2 \chi_h [\mathbf{k}_g (\mathbf{h} \cdot \mathbf{D}_g) - \mathbf{D}_g (\mathbf{h} \cdot \mathbf{k}_g)] \} e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_{g+h} \cdot \mathbf{r})} \end{aligned} \quad (5.7)$$

$$\begin{aligned}
(\nabla\chi_e \cdot \nabla)\mathbf{D} &= \sum_g \sum_h \{-2\pi i \chi_h (\mathbf{h} \cdot \nabla) \mathbf{D}_g\} e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_{g+h} \cdot \mathbf{r})} \\
&\quad - \sum_g \sum_h \{4\pi^2 \chi_h (\mathbf{h} \cdot \mathbf{k}_g) \mathbf{D}_g\} e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_{g+h} \cdot \mathbf{r})} \quad (5.8)
\end{aligned}$$

$$-(\mathbf{D} \cdot \nabla) \nabla \chi_e = \sum_g \sum_h \{4\pi^2 \chi_h \mathbf{h} (\mathbf{h} \cdot \mathbf{D}_g)\} e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_{g+h} \cdot \mathbf{r})} \quad (5.9)$$

$$\mathbf{D} \nabla^2 \chi_e = \sum_g \sum_h \{-4\pi \chi_h (\mathbf{h})^2 \mathbf{D}_g\} e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_{g+h} \cdot \mathbf{r})} \quad (5.10)$$

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} &= -\frac{1}{c^2} \sum_p \{-4\pi^2 \nu^2 \mathbf{D}_p\} e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r})} \\
&= \sum_p \{4\pi K^2 \mathbf{D}_p\} e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r})} \quad (5.11)
\end{aligned}$$

hvor K er $\frac{\nu^2}{c^2}$.

Det er vanlig å neglisjere andre ordens ledd som er $\propto \nabla^2 \mathbf{D}_p$ og produkt av første ordens ledd $\propto \chi_h \nabla \mathbf{D}_p$. Ligningene kan da skrives som:

$$\begin{aligned}
-\nabla^2 \mathbf{D} &\approx \sum_p [4\pi i (\mathbf{k}_p \cdot \nabla) \mathbf{D}_p + 4\pi^2 (\mathbf{k}_p)^2 \mathbf{D}_p] e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r})} \\
\chi_e \nabla^2 \mathbf{D} &\approx -\sum_g \sum_h [4\pi^2 \chi_h (\mathbf{k}_g)^2 \mathbf{D}_g] e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_{g+h} \cdot \mathbf{r})} \\
(\nabla \times \mathbf{D}) \times \nabla \chi_e &\approx \sum_g \sum_h \{4\pi^2 \chi_h [\mathbf{k}_g (\mathbf{h} \cdot \mathbf{D}_g) - \mathbf{D}_g (\mathbf{h} \cdot \mathbf{k}_g)]\} e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_{g+h} \cdot \mathbf{r})} \\
(\nabla \chi_e \cdot \nabla) \mathbf{D} &\approx -\sum_g \sum_h \{4\pi^2 \chi_h (\mathbf{h} \cdot \mathbf{k}_g) \mathbf{D}_g\} e^{2\pi i(\nu t - \mathbf{k}_{g+h} \cdot \mathbf{r})} \quad (5.12)
\end{aligned}$$

Den partielle differensialligningen kan da skrives som:

$$\frac{i}{\pi} (\mathbf{k}_p \cdot \nabla) \mathbf{D}_p = (K^2 - \mathbf{k}_p^2) \mathbf{D}_p + \mathbf{k}_p^2 \sum_g \chi_{p-g} \mathbf{D}_{g[p]} \quad (5.13)$$

hvor $\mathbf{D}_{g[p]}$ er definert ved:

$$\mathbf{D}_{g[p]} = \mathbf{D}_g - \frac{\mathbf{k}_p(\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{D}_g)}{\mathbf{k}_p^2} \quad (5.14)$$

Kapittel 6

Oppsummering

Denne masteroppgaven gir en introduksjon i grunnleggende størrelser og begreper innenfor dynamisk røntgendiffraksjonsteori. Dette er gjort for å legge grunnlaget for forståelse av Darwins to artikler fra 1914.

Darwin I

C. G. Darwins kinematiske teori fra 1914 gir oss en god beskrivelse av intensiteten til diffrakterte røntgenstråler i en krystall. Denne teorien har blitt “gjenfortalt” og oppdatert. Etter å ha utført eksperimenter, kom Darwin fram til at teorien ikke var god nok. Resultatet ble en ny artikkel: Darwin II.

Darwin II

Masteroppgaven fortsetter så med Darwins dynamiske teori (Darwin II). I denne tok Darwin hensyn til at den reflekterte strålen kunne spres på nytt av mediet. Han kom fram til et uttrykk for forholdet mellom intensiteten til den totale spredte strålingen og intensiteten til den innkommende strålingen. Resultatet gav en kurve for symmetrisk Bragg refleksjon uten absorpsjon. For å gi et fullstendig bilde av symmetrisk Bragg refleksjon, er J. A. Prins (1930) bidrag også tatt med. Han bygget videre på Darwin og Ewalds dynamiske teori og inkluderte absorpsjon. Kurven for symmetrisk Bragg refleksjon ble da “avrundet” og stemte bedre overens med observasjonene som var gjort. Det er så lagt vekt på å lage et matematisk program i Mathematica 8.0 som beregner intensitetsforholdet mellom den innkommende strålen og den reflek-

terte. Dette gir mulighet for grafisk framstilling. I tillegg blir den integrerte intensiteten beregnet.

Asymmetrisk Bragg refleksjon

I Darwin I og Darwin II tas det ikke hensyn til asymmetrisk spredningsgeometri: Situasjoner der krystallens Bragg plan ikke er parallelle med krystallens overflate. For å inkludere dette i masteroppgaven, er det tatt utgangspunkt i Warrens (1990) arbeid. Han håndterte denne geometrien ved å la vinkelen mellom den innkommende strålen og kystalloverflaten være θ_1 og vinkelen mellom den reflekterte strålen og overflate være θ_2 . Utregningene kan dermed utføres på tilsvarende måte som for symmetrisk Bragg refleksjon. Warren tok utgangspunkt i Bragg planene for å angi refleksjonskoeffisienten og vinklene som angir faseforskyvningen, mens det her er tatt utgangspunkt i de fiktive planene som er parallelle med krystallens innfallsflate. Resultatet blir det samme. Det ligger likevel utfordringer knyttet til de geometriske tenkemåtene i forhold til hvordan refleksjonskoeffisientene blir håndtert. Warren (1990) tar ikke hensyn til absorpsjon i asymmetrisk Bragg refleksjon. I denne masteroppgaven er dette gjort ved å redefinere noen sentrale parametre slik at absorpsjon inngår eksplisitt i uttrykket for intensitetsforholdet.

Takagi-ligningene

I Takagi teorien er amplitudene til forskyvningsfeltet posisjonsavhengige. Ved å ta utgangspunkt i von Laues dynamiske teori, kan det utledes en ekvivalent generell dynamisk teori. I denne oppgavene er det vist hvordan man kommer fram til den generelle differensialligningen for amplituden $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$. Det hadde vært interessant å sett nærmere på denne ligningen og lagd et program i Mathematica 8.0 som ga løsningene i en tostrålesituasjon. I tillegg kunne det vært vist at Takagi teorien tilsvarer fundamentalteorien for perfekte krystaller.

Appendiks

```
AppendTo[$Path, "C:\\M8p0\\X-ray-diffraction\\Packages"];
Get["sfcalc.m"];
```

```
datan
```

```
sfcalc
```

■ To be set globally

```
λ = lambda = 1.54059290;
compound
NaCl
```

■ Bragg refleksjon uten absorpsjon

```
plotuten[Δθ_, hkl_List, bolgelengde_, valg_] :=
Module[{v, re, Fh, F0, θ0, θB, λ, g, imo, u, Nega, Posi, f},
λ = lambda = bolgelengde;
v = Sqrt[Det[gmatrix]];
re = 2.8179 × 10-5;
Fh = Re[sf[hkl][[3]]];
θB = theta[hkl, lambda];
F0 = Re[sf[{0, 0, 0}][[3]]];

θ0 = ArcSin[
$$\frac{\lambda}{2 dhkl[hkl] \left(1 - \frac{\frac{re \lambda^2 F0}{2 \pi v}}{(\sin[\theta B])^2}\right)}]; \quad (* \text{ Fra ligning 3.17 og 3.19 } *)$$


u = 
$$\frac{-\lambda^2 re}{v \pi \sin[2 * \theta 0]} Fh; \quad (* \text{ Ligning 3.30 } *)$$


Nega[η_] := 
$$\frac{1}{\eta - (\eta^2 - 1)^{\frac{1}{2}}}; \quad (* \text{ Ligning 3.37 } *)$$


Posi[η_] := 
$$\frac{1}{\eta + (\eta^2 - 1)^{\frac{1}{2}}}; \quad (* \text{ Ligning 3.37 } *)$$


g[η_] := Which[η < -1, (Abs[Nega[η]])2, -1 ≤ η < 1, 1, 1 ≤ η, (Posi[η])2];

imo = If[valg,  $\frac{2 \pi}{1000 * 360} / u$ , Sign[ $\frac{2 \pi}{1000 * 360} / u$ ]];
g[imo * Δθ]
```

■ **Bragg refleksjon med absorpsjon.**

```

plot[Δθ_, hkl_List, bolgelengde_, pflag_, valg_] :=
  Module[{v, re, θB, Fh, F0, θ0, c, μ, σ, λ, Z, γ, Pos, Neg, f, imo, u, g},
    λ = lambda = bolgelengde;
    v = √{Det[gmatrix]};
    re = 2.8179 × 10-5;
    θB = theta[hkl, lambda];
    c = If[pflag == 1, Cos[2 * θB], 1];
    Fh = Re[sf[hkl][[3]]];
    F0 = Re[sf[{0, 0, 0}][[3]]];

    θ0 = ArcSin[
$$\frac{\lambda}{2 \text{dhkl}[hkl] \left(1 - \frac{\frac{\text{re} \lambda^2 \text{F0}}{2 \pi v}}{(\sin[\theta B])^2}\right)}]; \quad (* \text{Ligning 3.17 og 3.19} *)$$


    μ = abscoeff[lambda] * 10-8;
    σ = 
$$\frac{\text{Im}[sf[hkl][[3]]]}{\text{Re}[sf[hkl][[3]]]}; \quad (* \text{Ligning 3.38} *)$$

    u = 
$$\frac{-\lambda^2 \text{re}}{v \pi \sin[2 * \theta 0]} \text{Fh}; \quad (* \text{Ligning 3.30} *)$$

    g = 
$$\frac{-\mu v}{2 \lambda \text{re} c \text{Fh}}; \quad (* \text{Ligning 3.39} *)$$

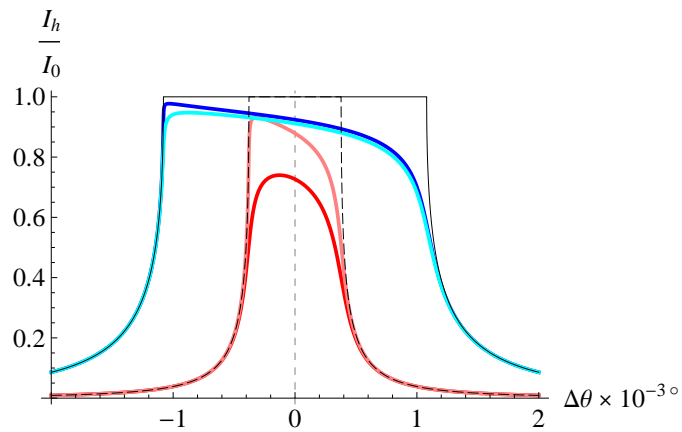

    Z[η_] := √{(1 + g2 - σ2 - η2)2 + 4 (σ + g η)2}; \quad (* \text{Ligning 3.44} *)
    γ[η_] := ArcTan[1 + g2 - σ2 - η2, 2 (σ + g η)]; \quad (* \text{Ligning 3.45} *)

    Pos[η_] := (1 + σ2) / (g2 + η2 + Z[η] + 2 √{Z[η]} (g Cos[(γ[η]) / 2] + η Sin[(γ[η]) / 2]));
    (* Ligning 3.47 *)
    Neg[η_] := (1 + σ2) / (g2 + η2 + Z[η] - 2 √{Z[η]} (g Cos[(γ[η]) / 2] + η Sin[(γ[η]) / 2]));
    (* Ligning 3.47 *)
    f[η_] := If[Pos[η] < 1, Pos[η], Neg[η]];
    imo = If[valg == 1,  $\frac{2 \pi}{1000 * 360} / u$ , Sign[ $\frac{2 \pi}{1000 * 360} / u$ ]];
    f[imo * Δθ] ]

```

■ **Figur 3.8: NaCl, $\lambda = 1.5406$**

```
Plot[ {plot[x, {4, 0, 0}, lambda, 1, 1], plot[x, {4, 0, 0}, lambda, 2, 1],
      plot[x, {2, 0, 0}, lambda, 2, 1], plot[x, {2, 0, 0}, lambda, 1, 1],
      plotuten[x, {4, 0, 0}, lambda, 1], plotuten[x, {2, 0, 0}, lambda, 1]}, {x, -2, 2},
      PlotStyle -> {{Red, Thick}, {Pink, Thick}, {Blue, Thick}, {Cyan, Thick},
                   {Black, Dashing[{0.02, 0.01}]}, {Black}}, AxesLabel -> {" $\Delta\theta \times 10^{-3}^\circ$ ", " $\frac{I_h}{I_0}$ "},
      AxesOrigin -> {-2, 0}, AxesStyle -> Directive[14], GridLines -> {{0, Dashed}}, None]
```



■ **Asymmetrisk Bragg refleksjon med absorpsjon.**

```

plotmed[deltaθ_, hkl_List, bolgelengde_, polfak_, agrader_] :=
Module[{α, pf, V, re, Fho, Foh, F0, θB, λ, f, q1, q2, q01, q02, Pos1, Pos2, Neg1, Neg2},
  α = agrader * π / 180;
  λ = lambda = bolgelengde;
  Δθ = deltaθ;
  V = √{Det[gmatrix]};
re = 2.8179 × 10-5;
Fho = sf[hkl][[3]];
  Foh = sf[-hkl][[3]];
  θB = theta[hkl, lambda];
  F0 = sf[{0, 0, 0}][[3]];
  pf = If[polfak == 1, Cos[2 * θB], 1];
  q1 = 
$$\frac{-\lambda re pf \sin[\theta B] dhkl[hkl]}{V \sin[\theta B + \alpha] \cos[\alpha]} Foh; \quad (* \text{ Ligning 4.11 } *)$$

  q2 = 
$$\frac{-\lambda re pf \sin[\theta B] dhkl[hkl]}{V \sin[\theta B - \alpha] \cos[\alpha]} Fho; \quad (* \text{ Ligning 4.5 } *)$$

  q01 = 
$$\frac{-\lambda re \sin[\theta B] dhkl[hkl]}{V \sin[\theta B + \alpha] \cos[\alpha]} F0; \quad (* \text{ Ligning 4.12 } *)$$

  q02 = 
$$\frac{-\lambda re \sin[\theta B] dhkl[hkl]}{V \sin[\theta B - \alpha] \cos[\alpha]} F0; \quad (* \text{ Ligning 4.13 } *)$$

  v[Δθ_] := 
$$\frac{2 \pi dhkl[hkl] \cos[\theta B] \sin[\theta B]}{\lambda \sin[\theta B - \alpha]} \Delta\theta \frac{2 \pi}{1000 * 360}; \quad (* \text{ Ligning 4.35 } *)$$

  Pos1[Δθ_] := 
$$\frac{-q2}{v[\Delta\theta] + \frac{q01+q02}{2} + \left( \left( v[\Delta\theta] + \frac{q01+q02}{2} \right)^2 - q1 * q2 \right)^{1/2}}; \quad (* \text{ Ligning 4.51 } *)$$

  Pos2[Δθ_] := Chop[Conjugate[Pos1[Δθ]] * Pos1[Δθ]];
  Neg1[Δθ_] := 
$$\frac{-q2}{v[\Delta\theta] + \frac{q01+q02}{2} - \left( \left( v[\Delta\theta] + \frac{q01+q02}{2} \right)^2 - q1 * q2 \right)^{1/2}}; \quad (* \text{ Ligning 4.51 } *)$$

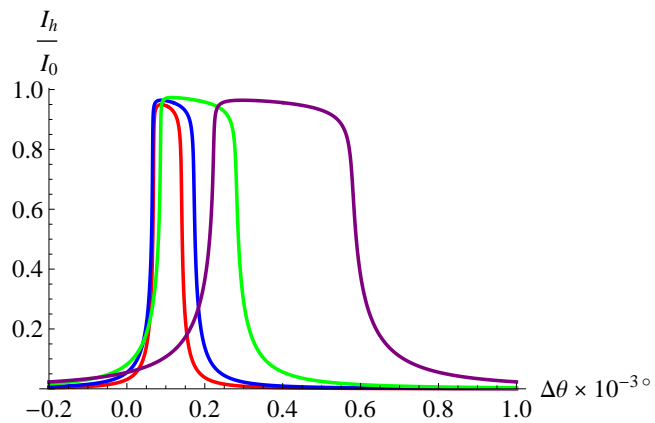
  Neg2[Δθ_] := Chop[Conjugate[Neg1[Δθ]] * Neg1[Δθ]];
  f[Δθ_] := Min[(Pos2[Δθ]), (Neg2[Δθ])];
  f[Δθ] * 
$$\frac{\sin[\theta B - \alpha]}{\sin[\theta B + \alpha]}$$

]

```

▪ **Figur 4.6** $\alpha = 7,5, 0$ og -5 , polarisasjonsfaktor = 1, $\lambda = 1.0$, {1,1,1} Silisium

```
Plot[ {plotmed[ $\Delta\theta$ , {1, 1, 1}, lambda, 2, 7],
      plotmed[ $\Delta\theta$ , {1, 1, 1}, lambda, 2, 5], plotmed[ $\Delta\theta$ , {1, 1, 1}, lambda, 2, 0],
      plotmed[ $\Delta\theta$ , {1, 1, 1}, lambda, 2, -5]}, { $\Delta\theta$ , -0.2, 1}, PlotRange -> {0, All},
      PlotStyle -> {{Red, Thick}, {Blue, Thick}, {Green, Thick}, {Purple, Thick}},
      AxesLabel -> { " $\Delta\theta \times 10^{-3}^\circ$ ", " $\frac{I_h}{I_0}$ " }, AxesOrigin -> {-0.2, 0}, AxesStyle -> Directive [14] ]
```



Referanser

- (2011). *Wolfram Mathematica 8.0.1.0 for Students*. Wolfram Research Inc.
- Allison, S. K. (1932). *The Physical Review* **41**, 1–21.
- Als-Nielsen, J. & McMorrow, D. (2001). *The Optical Principles of the Diffraction of X-rays*. England: John Wiley and Sons, Ltd.
- Authier, A. (2001). *Dynamical theory of x-ray diffraction*. New York: Oxford University Press.
- Authier, A. (2006). Volum B, Kapittel 5.1 Dynamical theory of X-ray diffraction, ss. 534–551. International Union of Chrystallography.
- Azároff, L. V. (1968). *Elements of X-ray Crystallography*. USA: McGraw-Hill, Inc.
- Borie, B. (1966). *Acta Crystallographica* **21**, 470–472.
- Born, M. & Wolf, E. (1980). Kapittel 1.3.2. Cambridge University Press, 6 utgave.
- Boyce, W. E. & DiPrima, R. C. (2005). *Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems*. USA: John Wiley and Sons, Inc.
- Bragg, W. L. (1913). *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **17**, 43–57.
- Darwin, C. G. (1914a). *Philosophical Magazine* **27**, 315–333.
- Darwin, C. G. (1914b). *Philosophical Magazine* **27**, 675–690.
- Ewald, P. P. (1913). *Physikalische Zeitschrift* **14**, 465–472.
- Ewald, P. P. (1925). *Physikalische Zeitschrift* **26**, 29–32.
- Giacovazzo, C. (2011). Kapittel 3, ss. 157–192. Oxford University Press, 3 utgave.

- Griffiths, D. J. (1989). *Introduction to electrodynamics*. New Jersey: Prentice-Hall, Inc.
- Hammond, C. (2009). *The Basics of Crystallography and Diffraction*. New York: Oxford University Press.
- James, R. W. (1962). *The Optical Principles of the Diffraction of X-rays*. London: G. Bell and Sons LTD.
- Laue von, M. (1912). *Sitzungsberichte der Kgl. Bayer. Akad.* **41**, 363–373.
- Laue von, M. (1931). *Ergebnisse der exacten Naturwissenschaften* **10**, 133–158.
- Prins, J. A. (1930). *Zeitschrift für Physik* **63**, 477–493.
- Renninger, M. (1934). *Zeitschrift für Kristallographie* **89**, 344–374.
- Takagi, S. (1962). *Acta Crystallographica* **15**, 1311–1312.
- Takagi, S. (1969). *The Physical Society of Japan* **26**, 1239–53.
- Tilley, R. (2007). ss. 122–128. England: John Wiley and Sons, Ltd.
- W. Friedrich, P. K. & Laue von, M. (1912). *Sitzungsberichte der Kgl. Bayer. Akad.* ss. 303–322.
- Wagenfeld, H. (1968). *Acta Crystallographica* **A 24**, 170–174.
- Warren, B. E. (1990). Kapitel 14, ss. 315–357. New York: Dover Publications, Inc.

Symboloversikt

a	Avstand mellom fiktive(horisontale) plan
$\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$	Basisvektorer som definerer en enhetscelle i det reelle rom
$\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$	Basisvektorer i det resiproke rom
A_0	Tverrsnittsarealet til den innkommende strålen, del II
A_1, A_2, B	lokale strørrelser
A_h	Det totale bidraget fra den spredte strålingen, del I
A_h	Tverrsnittsarealet til den reflektert strålen, del II
A_i	Innkommende kulebølge
A_o	Den totale transmitterte bølge
$A_r^{(s)}$	Bølgen reflektert fra plan nummer s og $\sum_{s=0}^{\infty} A_r^{(s)} = A_h$
$A_t^{(s)}$	Bølgen transmittert gjennom plan nummer s og $\sum_{s=0}^{\infty} A_t^{(s)} = A_o$
\tilde{A}_0	Amplitude med dimensjon lik den elektromagnetiske bølgen multiplisert med en lengdeenhet
b	Dempningsfaktor for absorpsjon i planene
\mathbf{B}	Magnetisk flukstetthet
c	Massehastighet i vakuum
C	Polarisasjonsfaktor lik 1 eller $\cos 2\theta_B$
d_{hkl}	Avstanden mellom refleksjonsplanene
\mathbf{D}	Forskyvningsfelt
e	Elektronladning
E	Diffraktert energi
E_o	Innkommende bølge
E_h	Spredt bølge
\mathbf{E}	Elektrisk felt
\mathbf{E}_0	Feltretning

f_n	Atomformfaktor
$f_n^{(0)}$	Ordinær atomformfaktor
f'_n, f''_n	Real og imaginær del av det komplekse korreksjonsleddet til atomformfaktoren
$f(2\theta, k)$	Spredningslengden eller atomformfaktoren
$F_{\mathbf{h}}$	Strukturfaktor
$F(\mathbf{K})$	Systemets spredningsamplitude
g	Lokal variabel avhengig av h og u_r
g_j	Oscillatorstyrke
h	Lokal variabel avhengig av b
\mathbf{h}	Resiprok gittervektor
\mathbf{h}'	“Resiprok” gittervektor for fiktive(horisontale) plan
hkl	Gitterpunkt i det resiproke rom
(hkl)	Planskare i det reelle rom
H	Resiprokt gitterpunkt
$I_{\mathbf{h}}$	Intensitet til totalt spredt stråling
I_i	Intensitet til innkommende bølge
$I_{\mathbf{K}}$	Intensitet til spredt stråling
I_s	Tenkt strålekilde for den reflekterte bølgen fra plan nummer s
j	Totalt antall plan
$k = \mathbf{k} $	Bølgetallet i vakuum, $k = \frac{1}{\lambda}$
$\mathbf{k}, \mathbf{k}_{\mathbf{h}}, \mathbf{k}_{\mathbf{o}}$	Bølgevektor til bølgefelt, med indeks \mathbf{h} for spredt og \mathbf{o} for innkommende bølge
K	Kildepunktet for stråling
\mathbf{K}	Spredningsvektor
K_0	Symmetripunktet til K om x -aksen
l_0	Veilengde gjennom krystallen
m_e	Elektronets masse
M	antall atomer per arealenhet

n	Brytningsindeks
\hat{n}	Enhetsvektor langs feltretningen
n_1, n_2, n_3	Gir et gitterpunkt i det reelle rom. Aksene n_1, n_2, n_3 ligger parallelt med basisvektorene i det reelle rommet
N	Antall spredere per volumenhet
N_n	Antall elektroner i atom n
p	Lokal variabel avhengig av ϵ og u_r
$p(t)$	Elektrisk dipolmoment
\mathbf{p}	Atomets dipolmoment
P	Observasjonspunkt
P_h	Effekten til den diffrakterte strålen
\mathbf{P}	Elektrisk polarisasjon
P_0	Symmetripunktet til P om x -aksen
q	Refleksjonskoeffisient for Bragg geometri
\bar{q}	Refleksjonskoeffisient til undersiden av planet
q_0	Transmisjonskoeffisient for Bragg geometri
q_1, q_2	Refleksjonskoeffisienter for asymmetrisk Bragg geometri
q_{01}, q_{02}	Transmisjonskoeffisienter for asymmetrisk Bragg geometri
Q	Vilkårlig punkt i planet
\mathbf{r}	Posisjonsvektor i det reelle rom
\mathbf{r}_n	Atomets posisjon i enhetscellen
r_e	Klassisk elektronradius
$r_{\xi\eta}$	Avstand fra et vilkårlig punkt i planet til et observasjonspunkt
R	Avstand fra strålekilde til origo
$R_{\xi\eta}$	Avstand fra strålekilde til et vilkårlig punkt i planet
$\Re(x)$	Realdelen til x
s	Tellevariabel for plan
$\mathbf{s}_h, \mathbf{s}_o$	enhetsvektor langs henholdsvis de reflekterte og transmitterte bølgene
S_0	Reflektert bølge fra plan 0
S_s	Reflektert bølge fra plan s
t	Tid
t	Total tykkelse av krystallen, produktet $aj = t$
T	Periode
T_0	Innkommende bølge
T_s	Transmittert bølge like over plan s
\mathbf{T}	Translasjonsvektor

u	Lokal variabel avhengig av q
\bar{u}	Lokal variabel avhengig av \bar{q}
u_r	Realdelen til u
v	Liten korreksjonsstørrelse
\tilde{v}	Liten korreksjonsstørrelse for asymmetrisk Bragg geometri med absorpsjon
v_1, v_2	Små korreksjonsstørrelser for asymmetrisk Bragg geometri
\tilde{v}_1, \tilde{v}_2	Små korreksjonsstørrelser for asymmetrisk Bragg geometri med absorpsjon
V_c	Volum i en enhetscelle
Z	Atomnummer

α	Vinkelen mellom overflaten og Bragg planene for asymmetrisk Bragg geometri
$\alpha_{\mathbf{o}}, \alpha_{\mathbf{h}}$	Vinkelen den innkommende (indeks \mathbf{o}) og spredte (indeks \mathbf{h}) bølgen danner med akse n_1
$\beta_{\mathbf{o}}, \beta_{\mathbf{h}}$	Vinkelen den innkommende (indeks \mathbf{o}) og spredte (indeks \mathbf{h}) bølgen danner med akse n_2
$\gamma_{\mathbf{o}}, \gamma_{\mathbf{h}}$	Vinkelen den innkommende (indeks \mathbf{o}) og spredte (indeks \mathbf{h}) bølgen danner med akse n_3
γ_0	“Dempningskraft” er innkodet i denne parameteren
ϵ	Vinkelvariabel
ϵ_0	Permittiviteten i vakuum
η	Vilkårlig y -koordinat, del I
η	Liten størrelse, del II
θ_0	Den virkelige vinkelen mellom den innkommende strålen og planene
θ_{01}, θ_{02}	Bragg vinkelen der en har tatt hensyn til brytning for asymmetrisk Bragg geometri
$\theta_1 = \theta_B + \alpha$	Vinkelen mellom overflate og innkommende stråle for asymmetrisk Bragg geometri
$\theta_2 = \theta_B - \alpha$	Vinkelen mellom overflate og reflektert stråle for asymmetrisk Bragg geometri
θ_B	Bragg vinkelen
θ_s	Vinkel mellom reflektert stråle fra plan nummer s og plan nummer s
2θ	Vinkel mellom transmittert stråle og spredt stråle
$\Delta\theta_1$	Vinkel mellom den innkommende strålen og retning til der Braggs lov med korreksjon for brytning er oppfylt
$\Delta\theta_2$	Vinkel mellom den reflekterte strålen og retning til der Braggs lov med korreksjon for brytning er oppfylt
κ	Spredningsevnen per lengdeenhet
λ	Bølgelengde i vakuum
μ	Linær absorpsjonskoeffisient
μ_0	Permeabiliteten i vakuum
ν	Frekvens
ν_0	“Fjærkraften” innkodet i denne parameteren
ξ	Vilkårlig x -koordinat

$\mathbf{\Pi}_e$	Elektrisk Hertz vektor
ρ	Avstand fra strålekilde til origo, og videre til et observasjonspunkt, $R+r$
$\rho_n^{(a)}$	Elektrontettheten assosiert med atom nummer n
$\rho(\mathbf{r})$	Elektrontetthet
σ	Forholdet mellom imaginærdelen og realdelen til f
v	Spredningsvolum til en krystall
ϕ	argument som angir faseforskyvning
ϕ_1, ϕ_2	argument som angir faseforskyvning i asymmetrisk Bragg geometri
χ_e	Dielektrisk susceptibilitet
χ_0	Midlet dielektrisk susceptibilitet
ω	Vinkelhastighet
Δ	Veilengde til reflektert bølge mellom to naboplan

Register

- Ångström, 15
- absorpsjon, 3, 9, 41, 42, 44–46, 51, 52, 54, 59, 61, 62, 65–68, 71, 81, 82, 89, 90
- absorpsjonsfaktor, 62
- absorpsjonskoeffisient, 42
- amplitude, 3, 13, 28, 32, 35, 36, 42, 44, 45, 48, 52, 56, 62, 85, 90
- asymmetri, 23, 45, 82, 90
- asymmetrisk Bragg geometri, 71
- atomformfaktor, 16, 17, 25, 39, 41, 62
- korreksjon, 17, 24
 - ordinær, 17
- atomgitter, 20
- bølge
- fase, 18
 - felt, 32
 - front, 18
 - spredt, 28
- bølgeforplantning, 22
- bølgelengde, 18, 20, 21, 53, 66
- bølgeligning, 26, 32, 85, 86
- bølgetall, 43
- vakuum, 18, 36
- bølgevektor, 18, 29, 32, 52, 85
- spredt bølge, 21
 - transmittert bølge, 21
- basisvektor, 15
- Borie, 39, 71
- Bragg
- plan, 37, 71–74
 - refleksjon, 9, 51, 61, 65, 71, 89, 90
 - vinkel, 21, 46–48, 56, 57, 75, 81
- Bragg, W. H., 13, 21
- Bragg, W. L., 13, 21
- Braggs
- lov, 22, 30, 45, 46, 57, 68, 69, 75, 76
 - teori, 35
- brytningsindeks, 26, 43–45, 57
- Darwin, 3, 9, 13, 28, 31, 35, 36, 38, 39, 41, 43, 45, 51, 52, 54, 55, 61, 62, 65–68, 70, 82, 89
- Darwin I, 9, 13, 51, 70, 90
- Darwin II, 9, 13, 51, 89, 90
- dempningsfaktor, 41
- dempningskraft, 23
- dielektrisk medium, 25
- dielektrisk susceptibilitet, 14, 25, 26, 32, 86
- diffraksjon, 35
- teori, 28
- diffraktert
- energi, 68, 69
- dipol, 13, 23, 26, 28, 32, 36
- moment, 23, 24, 26
- dispersjon, 35
- dispersjonsflate, 3, 32
- dynamisk teori, 31, 51
- elastisk spredning, 22
- elektrisk
- dipolstråling, 26
 - felt, 18, 23–27
 - feltvektor, 39, 65

Hertz vektor, 26
 polarisasjon, 24, 25
 elektriske egenskaper, 25
 elektromagnetisk
 bølge, 18, 26, 32
 stråling, 19
 elektron
 masse, 23
 radius, 24, 39
 elektrontetthet, 25, 29
 atom, 16
 Fourierrekke, 16
 periodisk, 15
 energibevaring, 31
 enhetscelle, 15
 elektrontetthet, 15
 volum, 15, 39
 Ewald, 13, 14, 22, 31, 32
 kulen, 13, 22
 Ewalds
 dynamiske teori, 62
 fase, 52, 53
 faktor, 43, 51–53
 forskyvning, 71, 73
 korreksjon, 54
 motfase, 38
 skifte, 38
 feltretning, 19
 feltvektor, 19
 fjærkraft, 23
 foroverspredning, 39
 forskyvningsfelt, 25, 26, 32, 85
 frekvens, 18, 23, 36
 Fresnel
 integral, 38
 fundamentalteori, 32
 geometrisk
 teori, 28
 geometrisk teori, 13
 gitter, 71
 gitterplan, 13, 21, 31
 gitterpunkt, 20
 reelle, 15
 intensitet, 13, 29, 35, 42, 48, 51, 56,
 60, 68
 forhold, 64, 71, 78, 81
 funksjon, 48
 integrert, 31, 70
 maksimum, 48
 interferens, 35
 destruktiv, 38
 konstruktiv, 20, 21, 35, 53
 James, R. W., 55, 62
 kinematisk
 teori, 28, 31
 komplekskonjugert, 48
 krystall
 perfekt, 66
 semiuendelig, 13, 37
 volum, 30
 volumenhet, 36
 kulebølge, 18, 35, 36
 innkommende, 36, 39
 matematiske, 18
 reflektert, 36, 38, 39
 ladningsfordeling, 23
 Liouvilles teorem, 82
 magnetfelt, 19
 magnetisk flukstetthet, 25
 Maxwells ligninger, 14, 25, 32
 multippel spredning, 13, 31, 45
 oscillatorstyrke, 24
 oscillere, 23
 partikkelbølge, 82
 periode, 18

permeabilitet, 25
 permittivitet, 24
 plan
 fiktive, 71
 horisontale, 73
 skare, 15
 planbølge, 18, 28, 32, 51
 innkommende, 51, 59
 matematisk, 18
 reflektert, 44, 52–54, 59
 spredt, 53
 transmittert, 51–56, 62
 polarisasjon, 27
 polarisasjon av
 bølge, 19
 mediet, 26
 polarisasjonsfaktor, 19, 27, 39, 65
 posisjonsvektor, 15
 Prins, J. A., 62
 Prins-metoden, 62

 røntgenstråling, 17, 18, 32, 36, 39
 refleksjon
 asymmetrisk, 71
 symmetrisk, 69, 73
 refleksjonskoeffisient, 39, 44, 54, 55, 59, 71
 Bragg geometri, 39
 størrelsesorden, 40
 refleksjonsområde, 82
 refraksjonseffekt, 45
 rekkeutvikling, 37, 38, 47
 Taylorrekke, 46, 47
 rekursjonsligning, 31, 54, 55, 74
 resiprok
 gitter, 13
 gitterpunkt, 15, 22
 gittervektor, 16, 22, 32, 39, 73
 rom, 15, 22
 resultantamplitude, 44
 rocking curve, 61

 spredere, 28
 per arealenhet, 36
 per volumenhet, 36
 spredning
 anomal, 51, 55
 sprednings
 evne, 17, 40, 62
 geometri, 22
 lengde, 36, 39
 plan, 19, 22, 37, 39, 65
 prosess, 28
 vektor, 22, 29
 vinkel, 22
 stråle
 bredde, 82
 diffraktert, 69
 innkommende, 79
 reflektert, 79
 stråling
 elektromagnetisk, 51
 innkommende, 64
 reflektert, 64
 strukturfaktor, 16, 25, 32, 39
 symmetrisk Laue geometri, 71

 Takagi teori, 33, 85
 teori
 elektromagnetisk, 35
 optisk, 35
 tostrålesituasjon, 22, 39, 90
 totalrefleksjonsamplitude, 45, 46
 translasjonssymmetri, 15
 translasjonsvektor, 15, 16, 29
 transmisjonskoeffisient, 41, 48

 veiforskjell, 21
 veilengde, 38, 42
 vekselvirkning, 13, 36, 39
 gjensidig, 13
 multippel, 51
 vinkelhastighet, 68

vinkelvariabel, 59
von Laue, 13, 28, 31
 teori, 14
von Laues
 dynamisketeori, 85
 interferensfunksjon, 29, 30
 interferensligninger, 20
 ligninger, 35