



Universitetet
i Stavanger

DET TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE FAKULTET

MASTEROPPGAVE

Studieprogram/spesialisering: Master i realfag med teknologi – integreert lærerutdanningsprogram	Høst semesteret, 2011 Åpen
Forfatter: Jofrid Hetland Johnsen	<i>Jofrid Hetland Johnsen</i> (signatur forfatter)
Fagansvarlig og veileder: Gunnar Thorkildsen	
Tittel på masteroppgaven: <i>Røntgendiffraksjon Darwins dynamiske teori for transmisjonsgeometri</i>	
Studiepoeng: 30	
Emneord: - Dynamisk røntgendiffraksjon - Darwin teori - Transmisjonsgeometri - Symmetrisk Laue geometri - Asymmetrisk Laue geometri	Sidetall: 125 sider inkludert vedlegg Stavanger, 06.januar 2012

Sammendrag

En sentral teori innen fagfeltet røntgendiffraksjon, har tradisjonelt vært Ewald-von Laue teorien. En annen, mindre nyttet teori er den Darwin publiserte i 1914. Denne oppgaven tar først utgangspunkt i den kinematiske teorien til Darwin, hvor sentrale begrep blir definert (Darwin, 1914a). Deretter videreutvikles den dynamiske teorien Darwin publiserte i symmetrisk Bragg geometri, til å gjelde for symmetrisk Laue geometri. Dette er gjort i henhold til Bories (1966, 1967) og Warrens (1990) håndtering av tilsvarende problemstilling. Denne teorien blir så modifisert til også å gjelde i asymmetrisk geometri. Da er rekursjonsligningene håndtert med riktige refleksjonskoeffisienter, slik Kuznetsov og Fofanov (1970) påpeker. Det er også tatt hensyn til at det er absorpsjon i krystallen og at Bragg planene har en “fremside” og en “bakside”.

Basert på teorien som er utviklet, nyttes programvaren Mathematica 8.0 til å beregne intensiteten til transmittert og reflektert bølge. Det viser seg at Darwins teori gir samme resultat som ved å nytte programvare basert på fundamentalteorien og Takagi teorien.

Innhold

Sammendrag	3
Forord	7
Innledning	9
I Sentrale elementer innen røtgendiffraksjon	13
1 Grunnleggende definisjoner	15
1.1 Krystaller	17
1.2 Røntgenstråling	20
1.3 Diffraksjonsgeometri	22
1.4 Elektromagnetisk vekselvirkning	25
1.5 Kinematisk teori	30
1.6 Dynamisk teori	33
2 Darwin I: Innføring i notasjon og begrep	37
2.1 Beregninger for et enkelt plan	38
2.1.1 Bølge spredt av et plan	38
2.1.2 Refleksjonskoeffisient	41
2.1.3 Brytningsindeks	43
2.2 Beregninger for flere plan	46
2.2.1 Resultantamplitude	46
2.2.2 Intensitet og effekt til strålingen	50
II Darwins dynamiske teori for transmisjonsgeometri	51
3 Symmetrisk Laue geometri	53

3.1	Geometrisk betraktning	54
3.2	Refleksjon fra ett atomplan	57
3.3	Rekursjonsligninger	61
3.4	Intensitet	71
3.4.1	Uten absorpsjon	71
3.4.2	Med absorpsjon	74
4	Asymmetrisk Laue geometri	81
4.1	Refleksjonskoeffisienter	82
4.2	Nye rekursjonsligninger	87
4.3	Intensitet	95
4.4	Detalj resultater	98
	Oppsummering	101
	A Detaljer i Mathematica 8.0 for symmetrisk Laue geometri	105
	B Detaljer i Mathematica 8.0 for asymmetrisk Laue geometri	109
	Referanser	115
	Symboloversikt	117
	Register	123

Forord

I arbeidet med denne oppgaven vil jeg rette en stor takk til veileder, professor Gunnar Thorkildsen, ved Univeritetet i Stavanger. Det har vært til stor inspirasjon og gitt god faglig utvikling å få være under veiledning av ham. Jeg vil også takke min gode studievenninne, Ida Maria Ous, for godt samarbeid og vennskap gjennom flere studieår. Det har vært en glede å få skrive en del av masteroppgaven sammen med henne. En varm takk også til min mann, Gisle, som har vært en god støttespiller gjennom en lang prosess.

Takk til nær familie og venner for tilbakemeldinger, barnepass og oppmuntrende støtte.

Innledning

Dette er en avsluttende masteroppgave for studiet “master i realfag med teknologi - integrert lærerutdanningsprogram”. Studiet gir breddekunnskap i matematikk, fysikk og teknologi, og undervisningskompetanse i to realfag. Tittelen på oppgaven er:

*Røntgendiffraksjon
Darwins dynamiske teori for transmisjonsgeometri*

Bakgrunnen for valget av dette temaet er et ønske om å bruke matematikkunnskapene, ervervet i studietiden, til å løse oppgaver innenfor fysikk. Da dette temaet ble foreslått, virket det interessant med nye utfordringer og problemstillinger. Formålet med oppgaven er å kunne sette seg inn i fagfeltet røntgendiffraksjon, spesielt Darwins teori i transmisjonsgeometri, og selvstendig kunne finne og løse nye spørsmål med de kunnskaper som allerede er opparbeidet. Siste del av oppgaven legger vekt på Darwins teori i transmisjonsgeometri. Oppgaven har også et pedagogisk siktemål med at strukturen og innholdet skal være lett for andre med samme bakgrunn å sette seg inn i og lære. For å gjøre oppgaven mer oversiktlig, knyttet tre punkter til formålet og innholdet i den:

- sette seg inn i et nytt fagfelt, røntgendiffraksjon, og skrive et produkt som andre med de samme bakgrunnskunnskapene kan forstå
- finne nye spørsmål og uklarheter i sentrale, publiserte arbeider i tilknytning til Darwins teori i transmisjonsgeometri
- programmere resultatene i regneprogrammet Mathematica 8.0

I del I bli sentrale elementer innenfor røntgendiffraksjon belyst. Det hele dreier seg om røntgenbølger som vekselvirker med en krystall. Bølgene blir spredt inni krystallen og intensiteten av det som kommer ut måles. Dette kan igjen nyttes til å finne ut hvordan krystallen er bygget opp. For å gi observerbar intensitet, må bølgene interferere konstruktivt. Krystallen modelleres

som semiuendelig med endelig tykkelse mellom de parallelle ytterflatene. Med krystalloverflatene, menes de flatene av krystallen som den innkommende og reflekterte røntgenbølgen “treffer”. Dersom den innkommende og reflekterte bølgen “krysser” samme overflate, betegnes det som Bragg geometri. Dersom innkommende og reflektert bølge “krysser” motstående overflater, er dette Laue geometri. Sentrale teorier i dette fagfeltet er Ewald-von Laue teori-en og teorien. Denne oppgaven legger hovedvekt på den sistnevntes måte å håndtere utfordringene på.

På bakgrunn av dette starter kapittel 1 med å matematisk definere hva som kjennetegner en krystall. Her blir også resiprokt rom, strukturfaktor og atomformfaktor introdusert og definert. Deretter blir røntgenbølgene forklart som plan eller kulebølger. Det er hovedsakelig tre beskrivelser som gir betingel-sene for at konstruktiv interferens mellom røntgenbølgene skal inntreffe; von Laues interferensligninger, Braggs lov og Ewalds konstruksjon. Disse teoriene bygger på geometriske betraktninger av bølgene i krystallen. I vekselvirk-ningen mellom bølgene og krystallen blir begrepene elektrisk dipolmoment, elektrisk polarisasjon, brytningsindeks og elektrisk dipolstråling introdusert. Videre blir kinematisk teori forklart og sentrale matematiske uttrykk blir presentert.

Kapittel 2 er en gjennomgang av den første artikkelen Darwin (1914a) publiserte. Den bygger på kinematisk teori og tar utgangspunkt i modellen om at krystallen er bygget opp av suksessive plan. Først studerer en spredningen fra ett at disse planene, for så å anta at krystallen er bygget opp av uendelig mange plan. I denne delen bli de sentrale uttrykkene for refleksjonskoeffisient og brytningsindeks utledet.

Del I er en fellesdel skrevet sammen med Ida Maria Ous. Deretter er arbeidene delt i to selvstendige arbeider, hvor denne oppgaven fordyper seg i Darwins teori i transmisjonsgeometri (Laue geometri).

Kapittel 3 tar for seg det symmetriske tilfellet der de såkalte Bragg pla-nene står vinkelrett på krystalloverflaten. Det fører frem til to uttrykk for den transmitterte og reflekterte bølgen. Disse uttrykkene er programmert i Mathematica 8.0. Kapittel 4 utvider teorien i kapittel 3 til også å gjelde i asymmetriske tilfeller. Det vil si at planene er skråstilte i forhold til krystall-overflaten. En sentral kilde, (Borie, 1967), har gjort en feil på dette punktet. Det påpekes og rettes av Kuznetsov og Fofanov (1970), men løsningsmetoden er en annen enn det som er brukt i denne oppgaven. Feilen rettes også opp i denne oppgaven, og løses så med Darwins metode. Absorpsjonseffekter er inkludert i både kapittel 3 og 4.

Mathematica 8.0 er brukt som en standard programvare til å lage et program, basert på den teorien som er utviklet. Dette beregner intensiteten til transmittert og reflektert bølge for ulike krystallsystem og tykkelser. Nødvendige krystallparametere er hentet fra studiestedets egen programvare i Mathematica 8.0: Notatbøker og pakker for krystallografisk beregning. Videre i oppgaven henvises det til Mathematica 8.0 ved behov. Figurene er tegnet i tegneprogrammet CorelDRAW X3. For aktuelle illustrasjoner henvises det i figurteksten til tilsvarende figurer i litteraturen.

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):

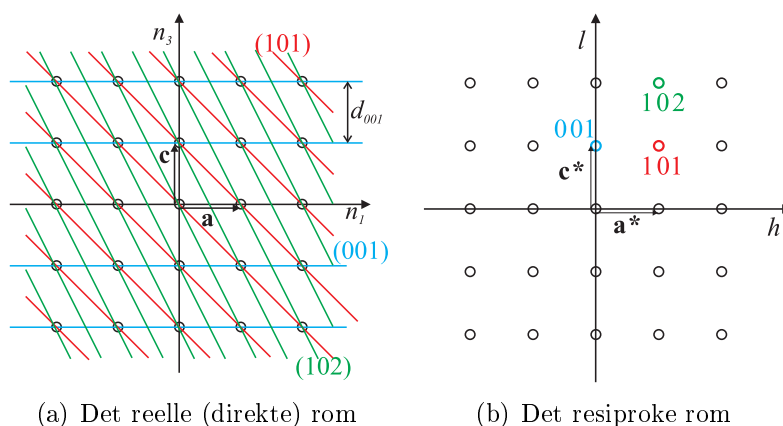
$$\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r} + \mathbf{T}) \quad (1.1)$$

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 tilfredsstillers relasjonen (Jens Als-Nielsen, 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 (Jens Als-Nielsen, 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 24.

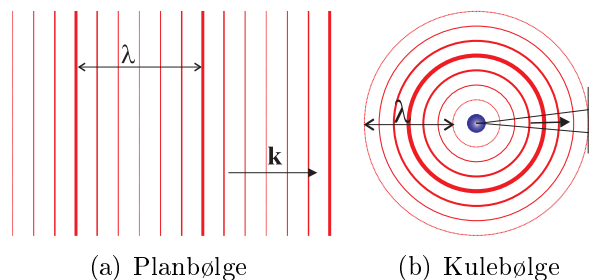
Ved også å ta hensyn til at elektronene er “bundne” får vi en korreksjon:

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

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.

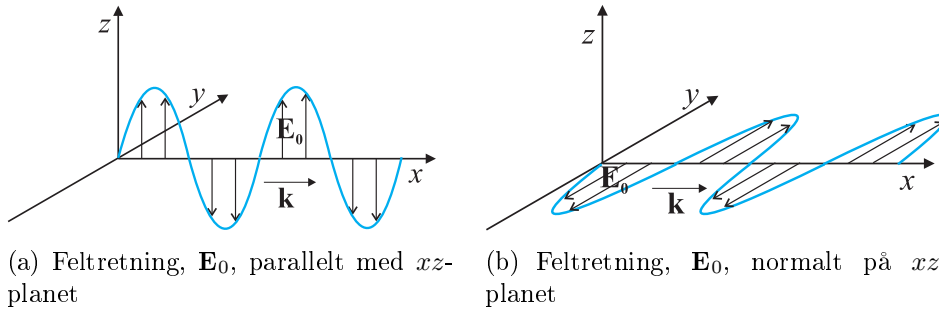
Bølgenes elektriske felt, \mathbf{E} , påvirker elektriske ladninger slik at disse vibrerer. En planbølge kan matematisk uttrykkes (Griffiths, 1989; Authier, 2001, s. 33):

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

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).

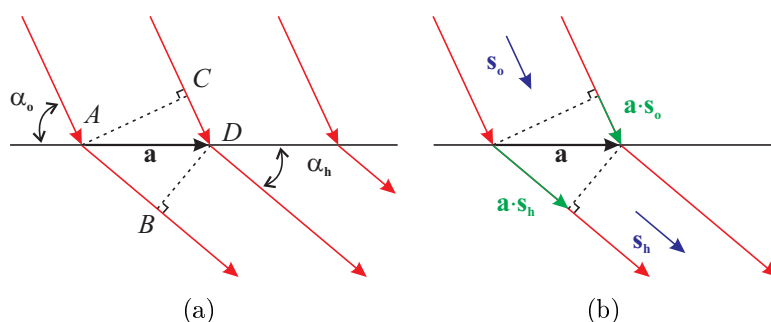
For en grundigere gjennomgang av elektromagnetisk stråling der det tilhørende magnetfeltet også omtales, se Griffiths (1989) kapittel 8.

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:

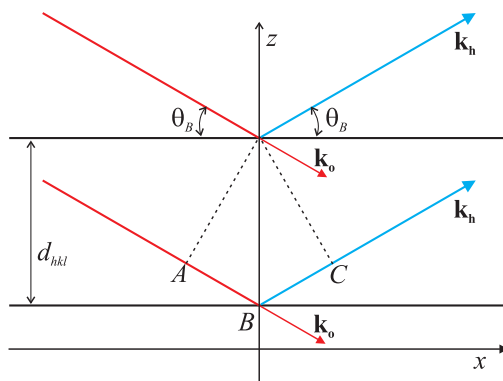
$$b(\cos \beta_h - \cos \beta_o) = \mathbf{b} \cdot (\mathbf{s}_h - \mathbf{s}_o) = k\lambda \quad (1.12)$$

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

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 parallelle 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} .

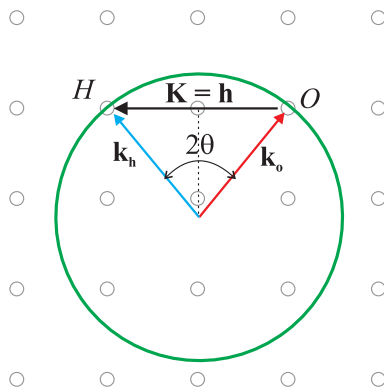
For konstruktiv interferens, må veiforskjellen, $(AB + BC)$, være lik et helt antall bølgelengder, $n\lambda$. Det gir sammenhengen (Bragg, 1913):

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

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 punktgitte 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

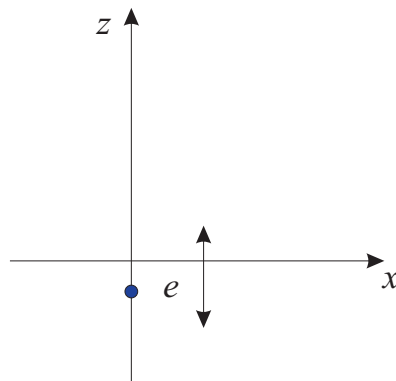
En fysisk elektrisk dipol består av to like ladninger, en negativ og en positiv, separert av en gitt avstand (Griffiths, 1989, s. 145). En enkel modell for en oscillerende elektrisk dipol er vist i figur 1.7. Systemet består av et elektron som kan forflytte seg langs z -aksen som funksjon av tiden t . 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) (Jens Als-Nielsen, 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:

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

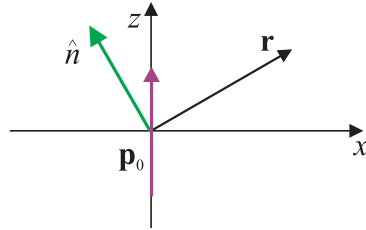
For en fullstendig utledning av Hertz vektoren og den elektriske feltvektoren,
se Authier (2001) side 32.

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):

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



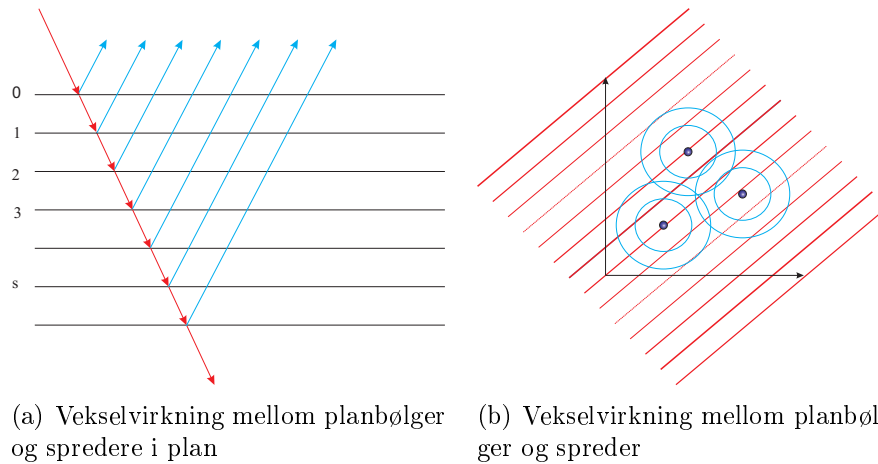
Figur 1.8: En kulebølge som brer seg radielt utover med observasjonsretning \mathbf{r} , dipolorientering \mathbf{p}_0 og feltretning \hat{n} . Alle er vektorer i xz -planet.

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 sprederne (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:

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

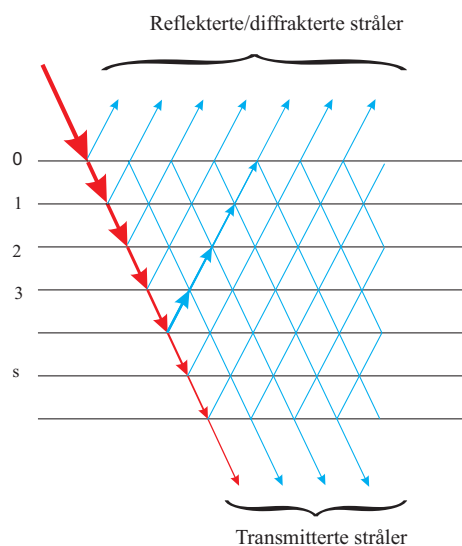
Dette er et nøkkelresultat for kinematisk teori.

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:

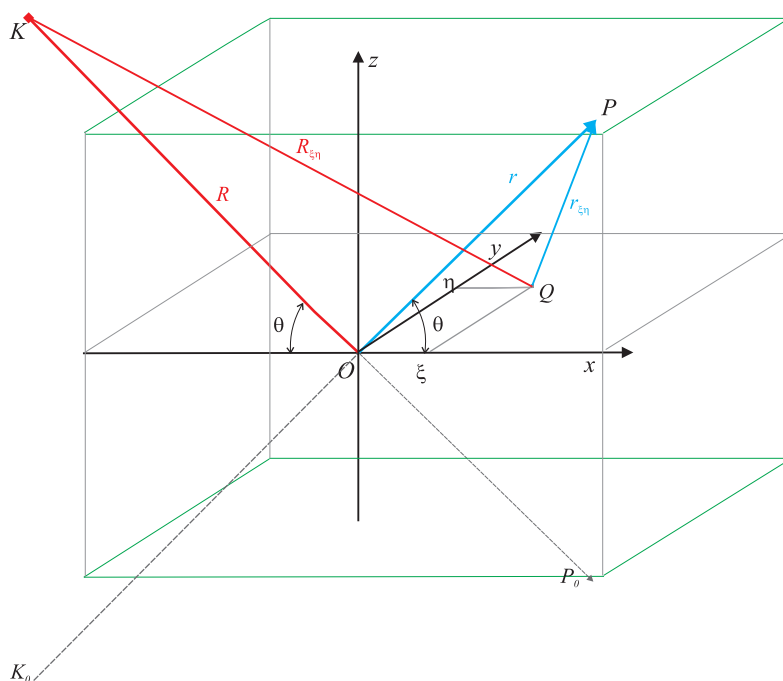
$$A_i = \tilde{A}_0 \frac{\exp[2\pi i(\nu t - k R)]}{R} \quad (2.1)$$

\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):

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

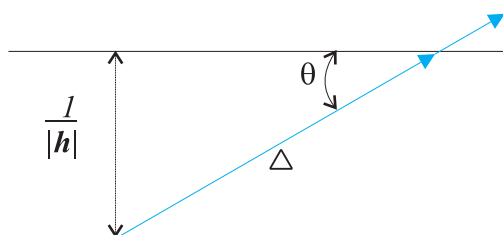
r_e er den klassiske elektronradien. $f(2\theta, k)$ er atomformfaktoren for røntgenstråling. Ved foroverspredning er den lik Z , antall elektroner assosiert med det gitte atomet. C er polarisasjonsfaktoren. I en standard tostrålesituasjon (avsnitt 1.3) er den lik $\cos 2\theta$ når den innkommende bølgens 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:

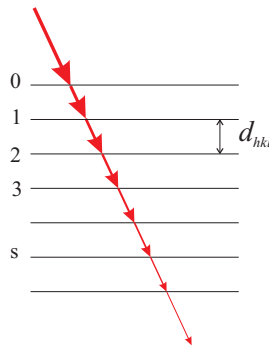
$$A_t^{(0)} = \tilde{A}_0 \frac{\exp[2\pi i(\nu t - kR)]}{R} - iq_0 \tilde{A}_0 \frac{\exp[2\pi i(\nu t - kR)]}{R} \quad (2.10)$$

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:

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

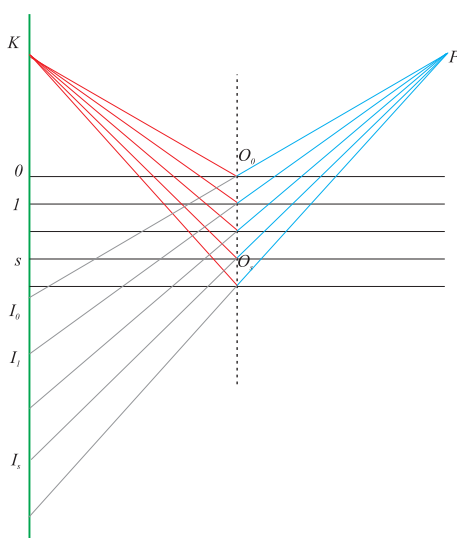
som tilsvareer ligning (1.29):

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

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:

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

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. 49) 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).

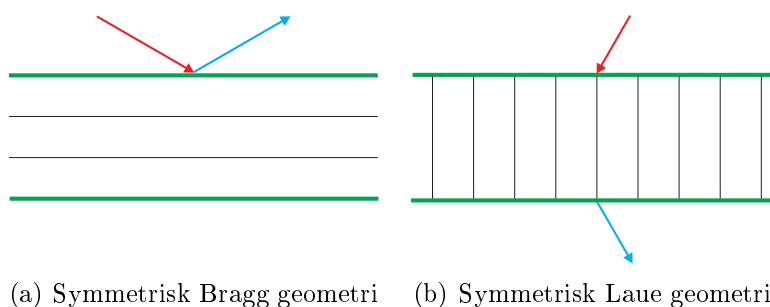
Del II

Darwins dynamiske teori for transmisjonsgeometri

Kapittel 3

Symmetrisk Laue geometri

Darwins metode for å håndtere multippel spredning, bestod i å sette opp rekursjonsligninger for spredningsprosessene i planene (Darwin, 1914b). Teorien tok utgangspunkt i Bragg geometri (figur 3.1(a)). I 1966 publiserte Borie en artikkel der han løste tilsvarende rekursjonsligninger med Laue geometri (figur 3.1(b)). Resultatet ble to ligninger for å beskrive transmitterte og reflekterte bølger. Vanligvis nyttes Ewald-von Laue teorien til dette, men Borie viste at Darwins teori, som av Borie blir beskrevet som en enklere teori, også er velegnet (Borie, 1966). Figur 3.1 viser de to ulike geometriene, symmetrisk Bragg- og symmetrisk Laue geometri.



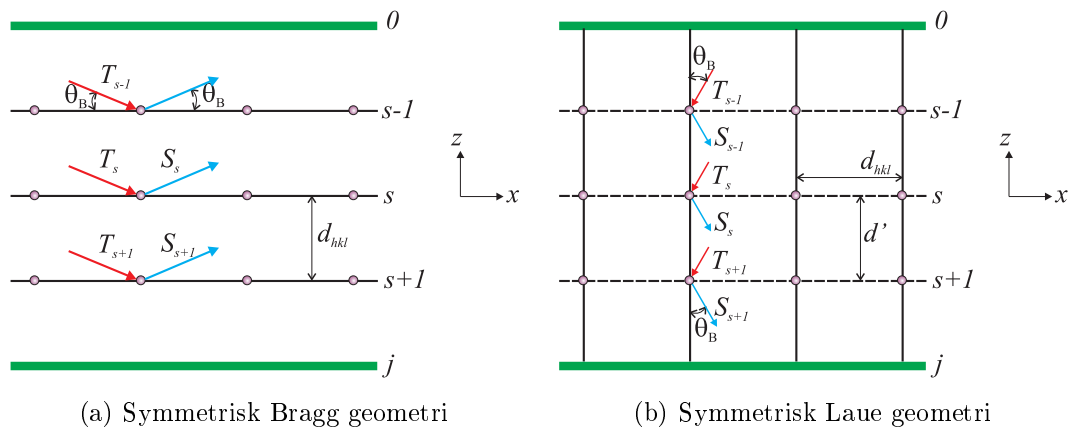
Figur 3.1: a) I symmetrisk Bragg geometri har den innkommende og reflekterte bølgen samme inngangs- og utgangsflate av krystallen. b) I symmetrisk Laue geometri “krysser” den innkommende og reflekterte bølgen motstående overflater av krystallen.

I denne delen blir den transmitterte strålen rett før plan s betegnet med symbolet T_s . Den innkommende bølgen rett før krystalloverflaten, merkes da T_0 . De reflekterte strålene merkes S_s , like etter plan s . T_s og S_s representerer både en amplitude og en fase.

3.1 Geometrisk betraktning

I symmetrisk Bragg geometri er planene som sprer parallelle med krystaloverflaten. Den innkommende og reflekterte bølgen danner Bragg vinkelen med disse planene, se figur 3.2(a).

I symmetrisk Laue geometri er krystallen utformet slik at planene som sprer, Bragg planene, er orientert normalt på krystaloverflaten. Braggs lov er fremdeles oppfylt, slik at bølgene danner Bragg vinkelen med disse planene. Fiktive telleplan legges parallelt med krystaloverflaten og nummereres $0, \dots, s-1, s, s+1, \dots, j$. 0 og j representerer overflatene som henholdsvis innkommende og reflektert stråling faller på. Ved å kjenne avstanden mellom de fiktive planene kan en regne ut hvor tykk krystallen er. Sprednerne postuleres å eksistere bare i skjæringspunktene mellom de to planene. Dersom en beregner spredningen fra slike skjæringspunkter, det vil si summerer opp all reflektert stråling parallelt med overflaten, finner en et samlet uttrykk for hva som blir reflektert assosiert med de fiktive planene. I figur 3.2(b) illustreres dette ved at T_s og S_s representerer det som blir transmittert og reflektert i tilknytning til aktuelle fiktive plan.



Figur 3.2: De heltrukne linjene illustrerer planene som sprer røntgenstrålingen, og planene som er stiplede er fiktive plan. Transmitterte bølger er merket rødt, mens reflekterte bølger er merket blått. Overflaten er farget grønn. y -aksen står vinkelrett inn i papirplanet.

Warren (1990) og Borie (1966) omtaler de heltrukne linjene i figur 3.2(b) som Bragg plan, mens de stiplede linjene blir omtalt som vertikale plan eller plan normalt på Bragg planene. Begge legger vekt på at disse planene ikke er de samme. Ved å betegne plan som Bragg plan, må det forstås slik at det er

disse planene som sprer i henhold til Braggs lov. Figurene som Warren (1990) refererer til, er lagt inn i et koordinatsystem der krystalloverflaten er orientert parallelt med yz -planet. For å gi en best mulig helhetlig presentasjon, er figurene i denne oppgaven orientert med krystalloverflater parallelt med xy -planet. Howie og Wheland (1961) omtaler de fiktive planene som atomplan, mens planene som sprer omtales som refleksjonsplan. Planene som sprer omtales i denne oppgaven som Bragg plan og planene parallelle med overflaten som fiktive plan eller atomplan.

Geometribegrunnelsen som Borie bruker i artikkelen fra 1967, er noe annerledes enn geometribetraktningene til Warren (1990) og Borie (1966). Utgangspunktet er Bragg geometrien som er presentert i figur 2.1 (s. 39) i denne oppgaven. Han stiller spørsmål ved hvordan en kan få reflektert stråling i retning av observasjonspunktet K_0 . Med dette kravet blir planene som sprer parallelle med yz -planet, slik de er tegnet inn i figur 3.2(b). Betingelsen for at dette skal forekomme, er at spredene i xy -planet må ligge på linjer parallelle med y -aksen, med en gitt avstand mellom seg. Dette gir opphav til Bragg plan normalt på krystalloverflaten og atomplan parallelt med krystalloverflaten. Siden en er interessert i Laue geometri, antar Borie at reflekterte bølger i retning av P i figur 2.1 interfererer destruktivt. I denne oppgaven er tilsvarende geometri valgt.

Warren (1990) og Kuznetsov og Fofanov (1970) legger til grunn at avstanden mellom de fiktive planene kan velges fritt. Det kan vises matematisk at dette gjelder, men det gjenstår å finne en god fysisk tolkning. I dette avsnittet er avstanden mellom de fiktive planene satt lik avstanden mellom Bragg planene.

Warren (1990) og Borie (1967) skiller mellom vinklene de transmitterte og reflekterte bølgene danner med Bragg planene, henholdsvis θ_1 og θ_2 . I dette kapitlet nyttes notasjonen θ_T og θ_S , for ikke å komme i konflikt med symbolene i kapittel 4. Håndteringen av ulike vinkler har bakgrunn i et avvik fra Bragg vinkelen, $\Delta\theta$, slik at

$$\theta_T = \theta_B + \Delta\theta \quad (3.1a)$$

$$\theta_S = \theta_B - \Delta\theta \quad (3.1b)$$

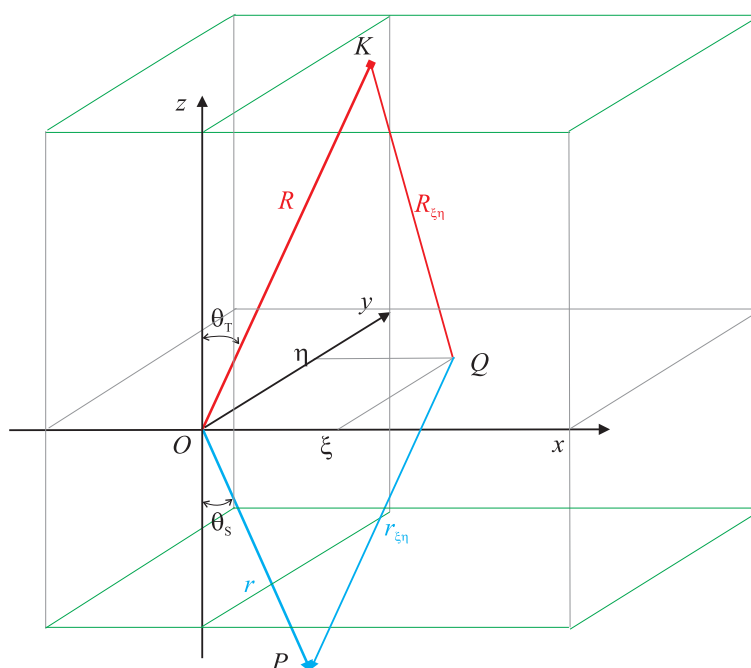
i symmetrisk geometri. I artikkelen til Borie fra 1967, var meningen med å bruke ulike vinkler for å kunne håndtere asymmetrisk geometri. I kapittel 4 vises det at Borie sin gjennomgang likevel bare er gyldig for symmetrisk Laue geometri. For rekursjonsligningene i kapittel 4 er det også tatt hensyn til at planene har "fremside" og "bakside", med $F_{\mathbf{h}}$ generelt ulik $F_{-\mathbf{h}}$. I

dette kapitlet er ikke det tatt hensyn til og sluttresultatet er dermed skrevet på en mer kompakt måte.

Tilsvarende bruk av Darwin teori i Laue geometri er også brukt av Kato (1963), Hirsch, Howie, Nicholson, Pashley og Wheland (1965), men da i tilknytning til andre problemstillinger enn de som er tatt opp her.

3.2 Refleksjon fra ett atomplan

Nå antar en at avstanden fra strålekilden og ned til origo går mot uendelig, slik at den innkommende bølgen kan betraktes som en planbølge. Planene normalt på krystalloverflaten sprer røntgenstrålingen. De fiktive planene, eller atomplanene, er parallelle med overflaten av krystallen.



Figur 3.3: Krystalloverflatene er parallelle med xy -planet. Ved å benytte symmetrisk Laue geometri, reflekterer yz -planet strålingen. Dette planet kalles for Bragg plan og står normalt på krystalloverflaten. Den innkommende strålingen danner vinkelen θ_T med dette planet og den reflekterte strålingen vinkelen θ_S . Disse vinklene representerer Bragg vinkelen med et korreksjonsledd for geometrisk avvik og refraksjon. xy -planet er parallelt med krystalloverflaten og blir omtalt som fiktivt plan eller atomplan. En tilfeldig spredner, Q , eksisterer i xy -planet, hvor et vilkårlig Bragg plan skjærer det fiktive planet. Sprederen har koordinatene $(\xi, \eta, 0)$ i det tredimensjonale koordinatsystemet. Strålekilden er plassert i K og observasjonspunktet i P , begge i xz -planet. Tegnet fritt fra Warren (1990) side 341.

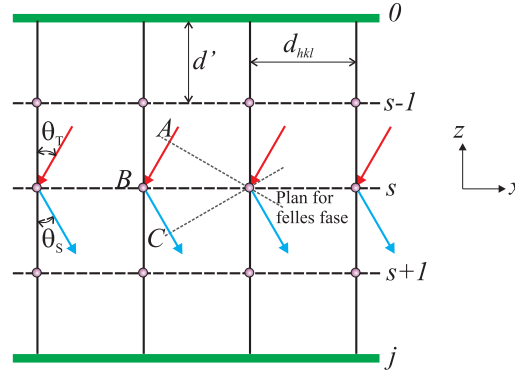
Veilengdene $R_{\xi\eta}$ og $r_{\xi\eta}$ kan nå utledes på tilsvarende måte som i avsnitt 2.1.

$$|\vec{KQ}| = R_{\xi\eta} = R - \xi \sin \theta_T + \frac{\xi^2 \cos^2 \theta_T + \eta^2}{2R}$$

$$|\vec{QP}| = r_{\xi\eta} = r - \xi \sin \theta_S + \frac{\xi^2 \cos^2 \theta_S + \eta^2}{2r}$$

Siden $R + r = \rho$ og $R \gg r$ kan summen av veilengdene skrives som:

$$|\vec{KQ}| + |\vec{QP}| = R_{\xi\eta} + r_{\xi\eta} \approx \rho - \xi(\sin \theta_T + \sin \theta_S) + \frac{\xi^2 \cos^2 \theta_S + \eta^2}{2r} \quad (3.2)$$



Figur 3.4: De fiktive planene (stiplet linje) nummereres $\dots, s-1, s, s+1, \dots$. En innkommende bølge danner vinkelen θ_T med planene som sprer (heltrukket linje). Strålen blir reflektert og danner vinkelen θ_S med de samme planene. Lengdestykkene AB og BC representerer ekstra veilengde, gitt av planene for felles fase. De grønne strekene illustrerer overflaten til krystallen, og merkes 0 og j . Tegnet fritt fra Warren (1990) side 341.

Atomene i krystallen postuleres å eksistere i posisjoner der atomplanene skjærer Bragg planene, figur 3.4. Avstanden mellom planene som sprer skrives d_{hkl} . Posisjonen et atom kan ha langs x -aksen uttrykkes da som $\xi = m d_{hkl}$ hvor m er et vilkårlig heltall. Ved å bruke geometrien i figur 3.4, kan en finne sammenhengen mellom θ_T og θ_S . Den ekstra veilengden, $AB + BC$, må være lik et heltallig antall bølgelengder, $n\lambda$, slik at det oppstår konstruktiv interferens. Det gir:

$$d_{hkl}(\sin \theta_T + \sin \theta_S) = n \lambda \quad (3.3)$$

Dersom en antar at $\theta_T \approx \theta_S \approx \theta_B$, kan en se at uttrykket over vil gi Braggs lov. Sammenhengen i ligning 3.3 medfører nå at $\xi(\sin \theta_T + \sin \theta_S)$ i ligning

3.2 erstattes med $mn\lambda$ (Borie, 1967; Warren, 1990, s. 341). Uttrykket for den totale veilingden, ligning (3.2), settes inn i ligningen for kulebølge i avsnitt 2.1.1 (ligning (2.2)). Det gir uttrykket for den reflekterte bølgen fra et atomplan som:

$$d^2 A_r = \tilde{A}_0 f(\theta_T + \theta_S, k) N d' \frac{\exp\{2\pi i[\nu t - k(|\vec{KQ}| + |\vec{QP}|)]\}}{R(\rho - R)} d\xi d\eta \quad (3.4)$$

$$= \tilde{A}_0 f(\theta_T + \theta_S, k) N d' \frac{\exp\{2\pi i[\nu t - k(\rho - mn\lambda + \frac{\xi^2 \cos^2 \theta_S + \eta^2}{2r})]\}}{R(\rho - R)} d\xi d\eta \quad (3.5)$$

$f(\theta_T + \theta_S, k)$ er spredningslengden, N antall spredere per volumenhet og d' avstanden mellom de fiktive planene i krystallen. En kan se at leddet $\exp(2\pi i kmn\lambda)$ er lik 1. Ved å integrere på samme måte som i avsnitt 2.1.1, kan uttrykket for den samlede reflekterte bølgen fra et uendelig stort fiktivt plan skrives som:

$$A_r = f(\theta_T + \theta_S, k) \frac{N d'}{k \cos \theta_S} \exp(-i\frac{\pi}{2}) \tilde{A}_0 \frac{\exp[2\pi i(\nu t - k\rho)]}{\rho} \quad (3.6)$$

Refleksjonskoeffisient

På samme måte som i avsnitt 2.1.2, kan en nå finne refleksjonskoeffisienten uttrykt som:

$$-ig = f(\theta_T + \theta_S, k) \frac{N d'}{k \cos \theta_S} \exp(-i\frac{\pi}{2})$$

Borie (1967) og Warren (1990) bruker notasjonen g i stedet for q , slik det er gjort i kapittel 2. Dette er for å skille de to koeffisientene fra hverandre. Av ligningen kan en se at det er θ_S som gir bidrag til refleksjonskoeffisienten.

En er primært interessert i tilfeller der θ_T og θ_S går mot Bragg vinkelen, θ_B , slik at $\cos \theta_S \approx \cos \theta_B$. Ved å nytte oversettelsesskjemaet fra avsnitt 2.1.2, vet en at spredningslengden tilknyttet vekselvirkningen mellom røntgenstråling og et atom er gitt som:

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

Videre kan en nytte at strukturfaktoren kan finnes ved sammenhengen:

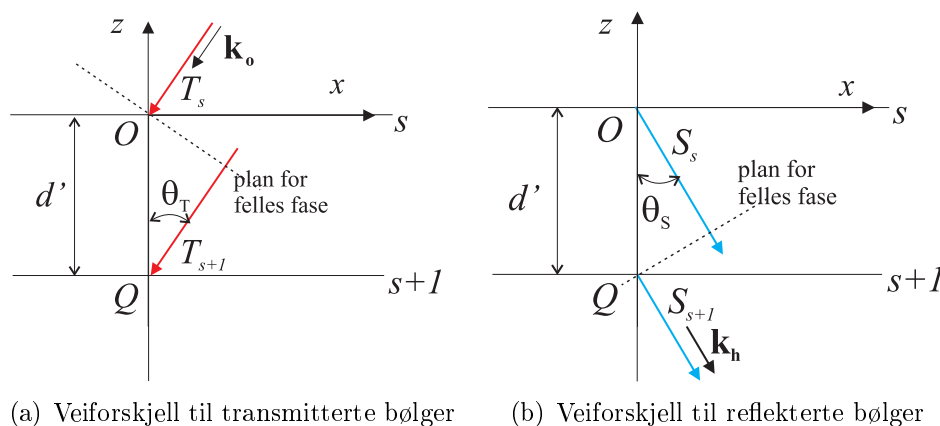
$$N f(2\theta_B, k) \rightarrow -\frac{r_e C F_{\mathbf{h}}}{V_c}$$

Refleksjonskoeffisienten blir da:

$$-ig = i \frac{\lambda d' r_e C}{V_c \cos \theta_B} F_{\mathbf{h}} \quad (3.7)$$

3.3 Rekursjonsligninger

Fra figur 3.5(a) ser en at T_{s+1} “forflytter seg” en ekstra veilengde i forhold til T_s , gitt av planet for felles fase. Veilengden kan uttrykkes som $d' \cos \theta_T$. For den reflekterte strålen er den ekstra veilengden lik $d' \cos \theta_S$, se figur 3.5(b).



Figur 3.5: (a) Bølgevektoren \mathbf{k}_0 definerer forplantningsretningen til transmittert bølge. Planet for felles fase står vinkelrett på begge bølgene og gir motstående katet i en rett-vinklet trekant. Ved denne geometribetraktningen ser en at den ekstra veilengden T_{s+1} tilbakelegger i forhold til T_s , kan uttrykkes som $d' \cos \theta_T$. Krystallen er lagt inn i et koordinatsystem, med x -aksen horisontalt, y -aksen inn i papirplanet og z -aksen vertikalt. Planet som reflekterer bølgene er orientert parallelt med yz -planet og de fiktive planene er parallelle med xy -planet. (b) De reflekterte bølgene har forplantningsretning \mathbf{k}_h . Den ekstra veilengden som S_s tilbakelegger, kan uttrykkes som $d' \cos \theta_S$. Med andre ord kan en si at en flytter S_s en lengde $d' \cos \theta_S$, for at bølgen skal ha samme bølgefront som S_{s+1} .

De ekstra veilengdene kan inkluderes i rekursjonsligningen ved å sette argumentet som angir faseforskyvningen lik (Borie, 1967; Warren, 1990, s. 342)

$$\phi_T = 2\pi k d' \cos \theta_T, \quad \phi_S = 2\pi k d' \cos \theta_S \quad (3.8)$$

og følgelig $\exp(-i\phi_T)$ og $\exp(-i\phi_S)$ som faseledd. Den transmitterte bølgen like før plan $s = 1$, kan da uttrykkes ved bølgen som treffer plan $s = 0$:

$$T_1 = (1 - ig_0) \exp(-i\phi_T) T_0 \quad (3.9)$$

hvor $(1 - ig_0)T_0$ er det som blir transmittert gjennom plan $s = 0$, se avsnitt 2.1.3. Dette multipliseres med $\exp(-i\phi_T)$ for at T_0 og T_1 skal være i samme

bølgefront.

Matematiske detaljer:

Ligningen for en planbølge, uten å ta med tidsleddet, er gitt som:

$$A = A_0 \exp(-2\pi i \mathbf{k}_o \cdot \mathbf{r})$$

hvor \mathbf{k}_o er bølgevektoren i retning av den innkommende bølgen, der $|\mathbf{k}_o| = k = \frac{1}{\lambda}$ og \mathbf{r} en retningsvektor. Fra figur 3.5(a) kan en se at:

$$\mathbf{k}_o = k (-\sin \theta_T \hat{i} - \cos \theta_T \hat{k})$$

$$\mathbf{r} = \overrightarrow{OQ} = -d' \hat{k}$$

Den ekstra veilengden i figur 3.5(a) kan da uttrykkes:

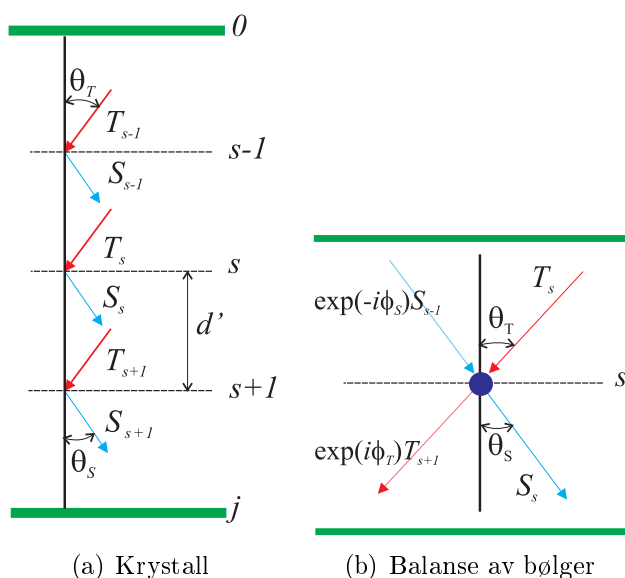
$$A = A_0 \exp(-2\pi i k d' \cos \theta_T) = A_0 \exp(-i\phi_T)$$

Nå skal det finnes et uttrykk for den transmitterte og reflekterte strålen fra plan s . Først finner en bidragene til den reflekterte strålen, S_s , i figur 3.6(a). Den er sammensatt av den reflekterte strålen fra T_s , pluss den delen av S_{s-1} som blir transmittert gjennom plan s . For at S_{s-1} og S_s skal ha samme fase, multipliseres faseleddet, $\exp(-i\phi_S)$, med den reflekterte bølgen, S_{s-1} (se figur 3.6(b)). Rekursjonsligningen for denne situasjonen blir da (Borie, 1966; Borie, 1967; Warren, 1990, s. 342):

$$S_s = (-ig)T_s + (1 - ig_0) \exp(-i\phi_S)S_{s-1} \quad (3.10)$$

Den transmitterte bølgen som treffer plan $s + 1$, T_{s+1} , er satt sammen av to bidrag. Det ene bidraget er den delen av T_s som blir transmittert gjennom plan s . Den gis et faseskifte grunnet veiforskjellen som er omtalt for ligning (3.8). Det andre bidraget er den delen av S_{s-1} som blir reflektert av plan s i retningen av T_{s+1} . For at S_{s-1} skal ha fase svarende til T_s og S_s , multipliserer en med faseleddet $\exp(-i\phi_S)$. Videre multipliserer en med faseleddet $\exp(-i\phi_T)$ for å få samme fase som T_{s+1} , se figur 3.6(b). Det gir rekursjonsligningen (Borie, 1966; Borie, 1967; Warren, 1990, s. 342):

$$\begin{aligned} \exp(i\phi_T)T_{s+1} &= (1 - ig_0)T_s + (-ig) \exp(-i\phi_S)S_{s-1} \\ \Rightarrow T_{s+1} &= (1 - ig_0) \exp(-i\phi_T)T_s + (-ig) \exp[-i(\phi_T + \phi_S)]S_{s-1} \end{aligned} \quad (3.11)$$



Figur 3.6: (a) Figuren viser røntgenstråling som treffer fiktive plan i en krystall. De innkommende (røde) bølgene blir reflektert (blå) en gang. Det vises ikke hvordan strålingen vekselvirker videre med planene. Tegnet fritt etter Borie (1966). (b) Illustrasjonen viser balanse av innkommende og reflekterte bølger for plan s . S_{s-1} flyttes en lengde $d \cos \theta_S$ for å ha samme bølgefront som S_s , det gir et faseledd. S_s består av bidrag fra T_s reflektert av plan s og S_{s-1} med faseforskjell transmittert gjennom plan s . T_{s+1} er flyttet en veilengde $-d \cos \theta_T$ for å ha samme bølgefront som T_s . Det gir at $\exp(i\phi_T)T_{s+1}$ er sammensatt av T_s transmittert gjennom plan s og den delen av $\exp(-i\phi_S)S_{s-1}$ som blir reflektert i retning T_{s+1} av plan s .

Ved å omforme ligning (3.11) og skifte indeksene slik at $s \rightarrow s + 1$ fås:

$$S_{s-1} = \frac{T_{s+1} - (1 - ig_0) \exp(-i\phi_T)T_s}{(-ig) \exp[-i(\phi_T + \phi_S)]}, \quad S_s = \frac{T_{s+2} - (1 - ig_0) \exp(-i\phi_T)T_{s+1}}{(-ig) \exp[-i(\phi_T + \phi_S)]}$$

Uttrykkene for S_{s-1} og S_s settes inn i ligning (3.10). Da fremkommer et uttrykk som bare involverer transmitterte bølger:

$$\begin{aligned}
T_{s+2} + [g^2 + (1 - ig_0)^2] \exp[-i(\phi_T + \phi_S)]T_s \\
= (1 - ig_0)[\exp(-i\phi_T) + \exp(-i\phi_S)]T_{s+1}
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Dette er en lineær, homogen, andre ordens rekursjonsligning med konstante koeffisienter. Ligningen gjelder for Laue geometri og tilsvarende rekursjonsligningen Darwin kom frem til ved å bruke Bragg geometri i 1914 (Darwin, 1914b, s. 678). Av resultater fra matematisk induksjon, må den generelle løsningen av ligningen ha samme form som rekursjonsligningen (Grimaldi, 2004, s. 447-456). Prøver da å sette løsningen lik:

$$T_s = Bx^s \tag{3.13}$$

Her er B og x konstanter uavhengige av s og $\neq 0$. Ved å sette løsningen inn i ligning (3.12), finnes en annengradsligning (karakteristisk ligning) som bare avhenger av x :

$$\begin{aligned}
(Bx^s)\{x^2 + [g^2 + (1 - ig_0)^2] \exp[-i(\phi_T + \phi_S)] \\
-x(1 - ig_0)[\exp(-i\phi_T) + \exp(-i\phi_S)]\} = 0
\end{aligned}$$

Siden $Bx^s \neq 0$ finnes to karakteristiske røtter, x_1 og x_2 , ved å løse annengradsligningen på standard måte.

Warren (1990) og Borie (1967) introduserer to nye variable, ϕ og $\Delta\phi$, slik at:

$$\phi_T = \phi + \Delta\phi, \quad \phi_S = \phi - \Delta\phi, \quad \phi_T + \phi_S = 2\phi, \quad \phi_T - \phi_S = 2\Delta\phi \tag{3.14}$$

Matematiske detaljer:

Uttrykkene i (3.14) fremkommer ved å bruke faseleddene i ligning (3.8), ϕ_T og ϕ_S :

$$\begin{aligned}\phi_T + \phi_S &= 2\pi k d'(\cos \theta_T + \cos \theta_S) = 2\phi \Rightarrow \phi = \pi k d'(\cos \theta_T + \cos \theta_S) \\ \phi_T - \phi_S &= 2\pi k d'(\cos \theta_T - \cos \theta_S) = 2\Delta\phi \Rightarrow \Delta\phi = \pi k d'(\cos \theta_T - \cos \theta_S)\end{aligned}$$

Når ϕ_T og ϕ_S nærmer seg Bragg vinkelen, det vil si at $\theta_T \approx \theta_S \approx \theta_B$, vil

$$\phi_T \approx \phi_S \approx \phi = 2\pi k d \cos \theta_B \text{ og } \Delta\phi = 0$$

Dette kan en bruke til å forenkle annengradsligningen slik at en får:

$$x^2 - 2(1 - ig_0) \cos \Delta\phi \exp(-i\phi) x + [g^2 + (1 - ig_0)^2] \exp(-i2\phi) = 0$$

Matematiske detaljer:

Ved å benytte uttrykkene i (3.14) kan en skrive:

$$\begin{aligned}\exp(-i\phi_T) + \exp(-i\phi_S) &= \exp[-i(\phi + \Delta\phi)] + \exp[-i(\phi - \Delta\phi)] \\ &= \exp(-i\phi)[\exp(-i\Delta\phi) + \exp(i\Delta\phi)] \\ &= \exp(-i\phi)2 \cos \Delta\phi\end{aligned}$$

Dette settes inn i annengradsligningen.

Finner x_1 og x_2 til å være

$$x_1 = \exp(-i\phi)[(1 - ig_0) \cos \Delta\phi + iu] \quad (3.15a)$$

$$x_2 = \exp(-i\phi)[(1 - ig_0) \cos \Delta\phi - iu] \quad (3.15b)$$

hvor

$$u = \sqrt{g^2 + (1 - ig_0)^2 \sin^2 \Delta\phi} \quad (3.16)$$

Differansen mellom de to røttene kan skrives $x_1 - x_2 = 2iu \exp(-i\phi)$. En kan også se at de karakteristiske røttene er lineært uavhengige av hverandre.

Matematiske detaljer:

Annengradsligningen løses ved abc-formelen:

$$x_{1,2} = -\frac{b}{2a} \pm \frac{\sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

I dette tilfellet er

$$a = 1$$

$$b = -2(1 - ig_0) \cos \Delta\phi \exp(-i\phi)$$

$$c = [g^2 + (1 - ig_0)^2] \exp(-i2\phi)$$

$$\begin{aligned} x_{1,2} &= \frac{2(1 - ig_0) \cos \Delta\phi \exp(-i\phi)}{2} \\ &\quad \pm \frac{\sqrt{4[(1 - ig_0) \cos \Delta\phi \exp(-i\phi)]^2 - 4[g^2 + (1 - ig_0)^2] \exp(-i2\phi)}}{2} \\ &= (1 - ig_0) \cos \Delta\phi \exp(-i\phi) \\ &\quad \pm \frac{\sqrt{4 \exp(-i2\phi) \{[(1 - ig_0) \cos \Delta\phi]^2 - [g^2 + (1 - ig_0)^2]\}}}{2} \\ &= \exp(-i\phi) \left[(1 - ig_0) \cos \Delta\phi \pm \sqrt{-g^2 + (1 - ig_0)^2 (\cos^2 \Delta\phi - 1)} \right] \\ &= \exp(-i\phi) \left[(1 - ig_0) \cos \Delta\phi \pm \sqrt{-g^2 - (1 - ig_0)^2 (\sin^2 \Delta\phi)} \right] \\ &= \exp(-i\phi) \left[(1 - ig_0) \cos \Delta\phi \pm i \sqrt{g^2 + (1 - ig_0)^2 (\sin^2 \Delta\phi)} \right] \\ &= \exp(-i\phi) [(1 - ig_0) \cos \Delta\phi \pm iu] \end{aligned}$$

Superposisjonsprinsippet sier at dersom x_1 og x_2 er lineært uavhengige løsninger av ligningen, vil en lineærkombinasjon av røttene også være en løsning. Den generelle løsningen med B_1 og B_2 som konstanter, blir da lik (Boyce and DiPrima, 2005, s. 145);(Grimaldi, 2004, s. 456):

$$T_s = B_1 x_1^s + B_2 x_2^s \quad (3.17)$$

For $s = 0$, får en randbetingelsen:

$$T_0 = B_1 + B_2 \quad (3.18)$$

Siden det ikke finnes plan med indeks $s = -1$, vet en at det heller ikke er noen spredning fra dette planet, $S_{s-1} = 0$. Fra ligning (3.11) for $s = 0$ følger det at $T_1 = (1 - ig_0) \exp(-i\phi_T)T_0$, som tilsvarer ligning (3.9). Dette kombineres med den generelle løsningen, ligning (3.17), slik at:

$$B_1x_1 + B_2x_2 = (1 - ig_0) \exp(-i\phi_T)T_0 \quad (3.19)$$

Nå har en to ligninger, (3.18) og (3.19), med to ukjente. Konstantene B_1 og B_2 kan en dermed finne til å være:

$$2B_1 = T_0 \left[1 - \frac{(1 - ig_0) \sin \Delta\phi}{u} \right] \quad (3.20a)$$

$$2B_2 = T_0 \left[1 + \frac{(1 - ig_0) \sin \Delta\phi}{u} \right] \quad (3.20b)$$

Borie har en tilsvarende generell løsning (ligning (3.17)) i artiklene fra 1966 og 1967. Mens Warren (1990) setter B i ligning (3.13) til å være lik T_0 og den generelle løsningen til å være et produkt av T_0 og formuleringen i ligning (3.17). Det vil gi tilsvarende løsning som fremgangsmåten her.

Matematiske detaljer:

En kan finne konstantene B_1 og B_2 på følgende måte:

$B_2 = T_0 - B_1$ settes inn i ligning (3.19) og sammen med differansen $x_1 - x_2$ gir dette:

$$\begin{aligned}
B_1 &= \frac{(1 - ig_0) \exp(-i\phi_T)T_0 - x_2T_0}{x_1 - x_2} = T_0 \left[\frac{(1 - ig_0) \exp(-i\phi_T) - x_2}{2iu \exp(-i\phi)} \right] \\
&= T_0 \left[\frac{(1 - ig_0) \exp(-i\phi_T) - \exp(-i\phi)[(1 - ig_0) \cos \Delta\phi - iu]}{2iu \exp(-i\phi)} \right] \\
&= \frac{T_0}{2} \left[\frac{(1 - ig_0) \exp(-i\phi_T)}{iu \exp(-i\phi)} - \frac{(1 - ig_0) \cos \Delta\phi \exp(-i\phi)}{iu \exp(-i\phi)} + \frac{iu \exp(-i\phi)}{iu \exp(-i\phi)} \right] \\
&= \frac{T_0}{2} \left[1 + \frac{(1 - ig_0) \{ \exp[-i(\phi_T - \phi)] - \cos \Delta\phi \}}{iu} \right] \\
&= \frac{T_0}{2} \left[1 + \frac{(1 - ig_0) [\exp(-i\Delta\phi) - \cos \Delta\phi]}{iu} \right] \\
&= \frac{T_0}{2} \left[1 + \frac{(1 - ig_0) [\cos \Delta\phi - i \sin \Delta\phi - \cos \Delta\phi]}{iu} \right]
\end{aligned}$$

Finner da B_1 til å være lik:

$$B_1 = \frac{T_0}{2} \left[1 - \frac{(1 - ig_0) \sin \Delta\phi}{u} \right]$$

Setter dette inn i $B_2 = T_0 - B_1$ og finner:

$$B_2 = \frac{T_0}{2} \left[1 + \frac{(1 - ig_0) \sin \Delta\phi}{u} \right]$$

Nå kombineres ligning (3.17) og (3.20). Det gir et generelt uttrykk for den transmitterte bølgen (Borie, 1967; Warren, 1990, s. 343):

$$T_s = \frac{T_0}{2} \left\{ \left[1 - \frac{(1 - ig_0) \sin \Delta\phi}{u} \right] x_1^s + \left[1 + \frac{(1 - ig_0) \sin \Delta\phi}{u} \right] x_2^s \right\} \quad (3.21)$$

Uttrykket for den reflekterte bølgen fra plan $s - 1$ kan utledes fra ligning

(3.11). Ved å sette inn uttrykkene T_s og T_{s+1} fra ligning (3.21) får en (Borie, 1967; Warren, 1990, s. 343):

$$\exp(-i\phi)S_{s-1} = \frac{-gT_0}{2u}(x_1^s - x_2^s) \quad (3.22)$$

Matematiske detaljer:

Fra ligning (3.11) finner en:

$$(-ig) \exp(-i2\phi)S_{s-1} = T_{s+1} - (1 - ig_0) \exp(-i\phi_T)T_s$$

Uttrykkene for T_s og T_{s+1} finnes fra ligning (3.21), ligningene faktoriseres og det settes inn for x_1 og x_2 . Minner om sammenhengen, $\phi_T = \phi + \Delta\phi$, i ligning (3.14). Dette medfører at

$$\exp(-i\phi_T) = \exp(-i\phi) \exp(-i\Delta\phi) = \exp(-i\phi)(\cos \Delta\phi - i \sin \Delta\phi)$$

$$(-ig) \exp(-i2\phi)S_{s-1}$$

$$= \frac{T_0}{2} \left\{ \left[1 - \frac{(1 - ig_0) \sin \Delta\phi}{u} \right] x_1^{s+1} + \left[1 + \frac{(1 - ig_0) \sin \Delta\phi}{u} \right] x_2^{s+1} \right\} \\ - \frac{T_0}{2} (1 - ig_0) \exp(-i\phi_T) \left\{ \left[1 - \frac{(1 - ig_0) \sin \Delta\phi}{u} \right] x_1^s + \left[1 + \frac{(1 - ig_0) \sin \Delta\phi}{u} \right] x_2^s \right\}$$

$$= \frac{T_0 x_1^s}{2} \left\{ \left[1 - \frac{(1 - ig_0) \sin \Delta\phi}{u} \right] x_1 - \left[1 - \frac{(1 - ig_0) \sin \Delta\phi}{u} \right] (1 - ig_0) \exp(-i\phi_T) \right\} \\ + \frac{T_0 x_2^s}{2} \left\{ \left[1 + \frac{(1 - ig_0) \sin \Delta\phi}{u} \right] x_2 - \left[1 + \frac{(1 - ig_0) \sin \Delta\phi}{u} \right] (1 - ig_0) \exp(-i\phi_T) \right\}$$

$$= \frac{T_0 x_1^s}{2u} [u - (1 - ig_0) \sin \Delta\phi] [x_1 - (1 - ig_0) \exp(-i\phi_T)] \\ + \frac{T_0 x_2^s}{2u} [u + (1 - ig_0) \sin \Delta\phi] [x_2 - (1 - ig_0) \exp(-i\phi_T)]$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{T_0 x_1^s}{2u} [u - (1 - ig_0) \sin \Delta\phi] \\
&\quad \times \left\{ \exp(-i\phi) [(1 - ig_0) \cos \Delta\phi + iu - (1 - ig_0) \cos \Delta\phi + (1 - ig_0)i \sin \Delta\phi] \right\} \\
&+ \frac{T_0 x_2^s}{2u} [u + (1 - ig_0) \sin \Delta\phi] \\
&\quad \times \left\{ \exp(-i\phi) [(1 - ig_0) \cos \Delta\phi - iu - (1 - ig_0) \cos \Delta\phi + (1 - ig_0)i \sin \Delta\phi] \right\} \\
&= i \exp(-i\phi) \left\{ \frac{T_0 x_1^s}{2u} [u - (1 - ig_0) \sin \Delta\phi] [u + (1 - ig_0) \sin \Delta\phi] \right. \\
&\quad \left. - \frac{T_0 x_2^s}{2u} [u + (1 - ig_0) \sin \Delta\phi] [u - (1 - ig_0) \sin \Delta\phi] \right\} \\
&= i \exp(-i\phi) \left(\frac{T_0}{2u} \left\{ [u - (1 - ig_0) \sin \Delta\phi] [u + (1 - ig_0) \sin \Delta\phi] \right\} (x_1^s - x_2^s) \right)
\end{aligned}$$

Ser på det midterste leddet og setter inn for u , ligning (3.16).

$$\begin{aligned}
[u - (1 - ig_0) \sin \Delta\phi][u + (1 - ig_0) \sin \Delta\phi] &= u^2 - (1 - ig_0)^2 \sin^2(\Delta\phi) \\
&= g^2 + (1 - ig_0)^2 \sin^2 \Delta\phi - (1 - ig_0)^2 \sin^2 \Delta\phi \\
&= g^2
\end{aligned}$$

Finner nå uttrykket for den reflekterte bølgen som:

$$(-ig) \exp(-i2\phi) S_{s-1} = i \exp(-i\phi) \frac{T_0 g^2}{2u} (x_1^s - x_2^s)$$

$$\Rightarrow \exp(-i\phi) S_{s-1} = \frac{-gT_0}{2u} (x_1^s - x_2^s)$$

3.4 Intensitet

Warren (1990) og Borie (1966) betrakter videre spesialtilfeller der Braggs lov er nøyaktig tilfredsstilt. Det medfører at $\Delta\phi = 0$ og $\theta_T = \theta_S = \theta_B$. Ved å bruke dette på ligning (3.21) og (3.22) reduseres de til:

$$T_s = \frac{T_0}{2} \exp(-i\phi s) [(1 - ig_0 + ig)^s + (1 - ig_0 - ig)^s] \quad (3.23)$$

$$\exp(-i\phi)S_{s-1} = -\frac{T_0}{2} \exp(-i\phi s) [(1 - ig_0 + ig)^s - (1 - ig_0 - ig)^s] \quad (3.24)$$

Siden g og g_0 er små størrelser, nyttes rekkeutvikling av eksponentialfunksjonen til andre ordens ledd. Da kan ligning (3.23) og (3.24) uttrykkes:

$$T_s \approx \frac{T_0}{2} \exp(-i\phi s) \{ \exp[-i(g_0 - g)s] + \exp[-i(g_0 + g)s] \} \quad (3.25)$$

$$\exp(-i\phi)S_{s-1} \approx -\frac{T_0}{2} \exp(-i\phi s) \{ \exp[-i(g_0 - g)s] - \exp[-i(g_0 + g)s] \} \quad (3.26)$$

3.4.1 Uten absorpsjon

Ved å anta at refleksjonskoeffisienten er en reell størrelse, neglisjeres absorpsjonen. Da kan eksponentialfunksjonene uttrykkes ved hjelp av sinus og cosinus. Sum -og differens sammenhengene mellom de trigonometriske funksjonene gir:

$$T_s = T_0 \exp(-i\phi s) \exp(-ig_0 s) \cos(g s) \quad (3.27)$$

$$\exp(-i\phi)S_{s-1} = -iT_0 \exp(-i\phi s) \exp(-ig_0 s) \sin(g s) \quad (3.28)$$

Ligningene over multipliseres med respektive komplekskonjugerte. Det gir intensiteten til den innkommende og reflekterte strålen til å være lik:

$$I_T = I_0 \cos^2(g s) \quad (3.29)$$

$$I_S = I_0 \sin^2(g s) \quad (3.30)$$

Ved å adderer disse uttrykkene finner en at $\frac{I_T}{I_0} + \frac{I_S}{I_0}$ hele tiden er lik 1. Ingenting av energien går tapt i krystallen. Dette viser at det ikke er regnet med absorpsjon i dette tilfellet.

Matematiske detaljer:

Eksempel på en overgang mellom ligning (3.25), (3.27) og (3.29):

$$\begin{aligned} & \exp[-i(g_0 - g)s] + \exp[-i(g_0 + g)s] \\ &= \cos[(g_0 - g)s] - i \sin[(g_0 - g)s] + \cos[(g_0 + g)s] - i \sin[(g_0 + g)s] \\ &= [\cos[(g_0 - g)s] + \cos[(g_0 + g)s]] - i[\sin[(g_0 - g)s] + \sin[(g_0 + g)s]] \\ &= 2 \cos(g_0 s) \cos(g s) - 2i \sin(g_0 s) \cos(g s) \\ &= 2 \cos(g s)[\cos(g_0 s) - i \sin(g_0 s)] \\ &= 2 \cos(g s) \exp(-ig_0 s) \end{aligned}$$

Ligning (3.27) kan skrives ut med en real og en imaginærdel:

$$\begin{aligned} T_s &= T_0 \exp(-i\phi s) \cos(g s) \exp(-ig_0 s) \\ &= T_0 \cos(g s) \cos[(\phi + g_0)s] - iT_0 \cos(g s) \sin[(\phi + g_0)s] \end{aligned}$$

Den kompleksskonjugerte skrives:

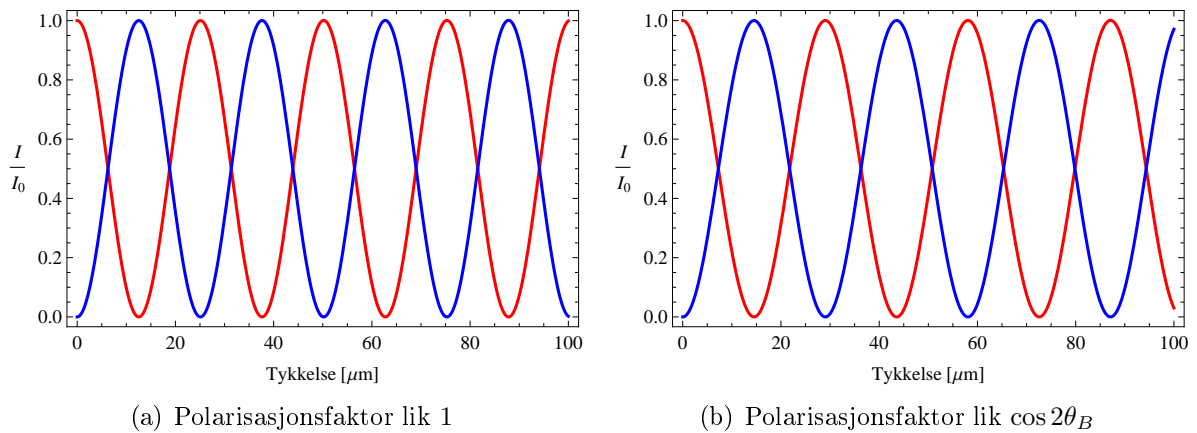
$$T_s^* = T_0 \cos(g s) \cos[(\phi + g_0)s] + iT_0 \cos(g s) \sin[(\phi + g_0)s]$$

Intensiteten er gitt som $I_T = T_s \cdot T_s^*$. Ser at tredje kvadratsetning gjør uttrykket enklere slik at:

$$\begin{aligned} I_T &= \{T_0 \cos(g s) \cos[(\phi + g_0)s]\}^2 - \{iT_0 \cos(g s) \sin[(\phi + g_0)s]\}^2 \\ &= T_0^2 \cos^2(g s) \{\cos^2[(\phi + g_0)s] + \sin^2[(\phi + g_0)s]\} \\ &= T_0^2 \cos^2(g s) \end{aligned}$$

T_0^2 tilsvarer intensiteten til den innkommende bølgen, I_0 . Fremgangsmåten kan en også bruke for å finne intensiteten til den reflekterte bølgen.

Disse uttrykkene for intensiteten kan en plote i Mathematica 8.0. Da er $\frac{I_T}{I_0} = \cos^2(g s)$ for den transmitterte bølgen og $\frac{I_S}{I_0} = \sin^2(g s)$ for den reflekterte. I dette eksemplet er krystallen en silisiumkrystall. Bølgelengden er satt til å være $\lambda = 1.0 \text{ \AA}$ og refleksjonsplanskaren er (202) plan. Bragg vinkelen er i dette tilfellet da lik $\theta_B = 15.094^\circ$. Siden avstanden mellom de fiktive planene ikke har betydning, settes denne til å være lik d_{hkl} (slik det er antatt på s. 54). Notatboken fra Mathematica 8.0 er lagt ved i tillegg A. Først studerer en situasjoner der Bragg vinkelen er nøyaktig oppfylt og tykkelsen varierer.



Figur 3.7: Viser intensitetsforholdet, $\frac{I}{I_0}$, for den transmitterte (rød) og reflekterte (blå) bølgen når polarisasjonsfaktoren $C = 1$ og $C = \cos 2\theta_B$. Her er Bragg vinkelen nøyaktig oppfylt.

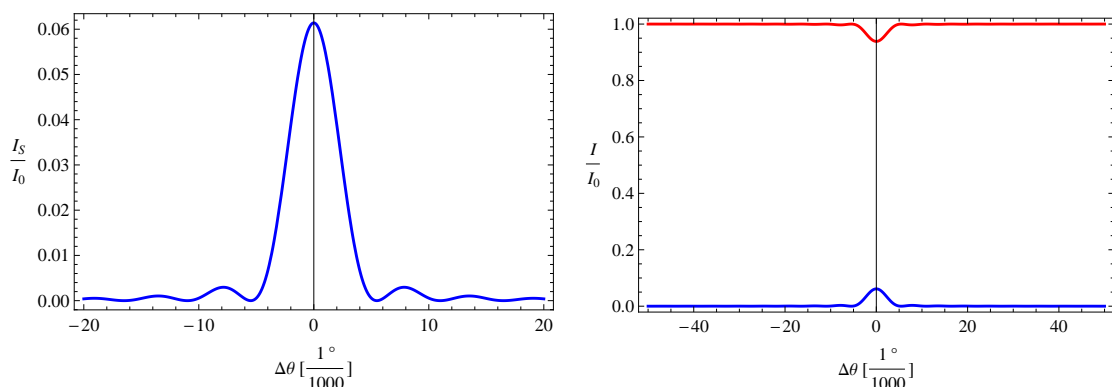
En observerer at effekttapet til den innkommende bølgen tilsvarer økningen i intensitet til den reflekterte bølgen, slik at summen av intensitetsforholdet hele tiden er lik 1. Dette er i samsvar med det en forventet ut i fra ligning (3.29) og (3.30). Når intensitetsforholdet til den transmitterte bølgen er lik 1, svarer det til at bølgen går rett gjennom krystallen og ingenting blir reflektert. Når polarisasjonsfaktoren er lik $\cos 2\theta_B$, vil en endring i tykkelsen medføre en mindre endring for intensiteten enn når polarisasjonsfaktoren er lik 1.

Ved å bruke egnet programvare, som Mathematica 8.0, kan en studere tilfeller der Bragg betingelsen ikke er nøyaktig oppfylt. Siden dette er en symmetrisk situasjon, antar en fra ligning (3.3) at θ_T og θ_S har et like stort, motsatt rettet, avvik fra Bragg vinkelen, $\Delta\theta$. Det gir $\theta_T = \theta_B + \Delta\theta$ og $\theta_S = \theta_B - \Delta\theta$ (ligning (3.1a) og (3.1b)). Ved å bruke at $\Delta\theta$ er et svært lite avvik, kan cosinus og sinus rekkeutvikles til første orden. Uttrykkene for $\Delta\phi$ og ϕ i ligning (3.14) kan da skrives:

$$\begin{aligned}\phi &= \pi k d' (\cos \theta_T + \cos \theta_S) = 2\pi k d' \cos \theta_B \cos \Delta\theta \\ &\approx 2\pi k d' \cos \theta_B\end{aligned}\quad (3.31a)$$

$$\begin{aligned}\Delta\phi &= \pi k d' (\cos \theta_T - \cos \theta_S) = -2\pi k d' \sin \theta_B \sin \Delta\theta \\ &\approx -2\pi k d' \sin \theta_B \Delta\theta\end{aligned}\quad (3.31b)$$

Ved å multiplisere ligning (3.21) og (3.22) med respektiv komplekskonjugert, finnes ett uttrykk for intensitetsforholdet til den transmitterte og reflekterte bølgen.



(a) Intensitetsforhold til reflektert bølge

(b) Intensitetsforhold til reflektert (blå) og transmittert (rød) bølge

Figur 3.8: Intensitetsforholdet plottet med hensyn på avvik fra Bragg vinkelen. Avviket måles i $\frac{1^\circ}{1000}$. Polarisasjonsfaktoren er lik 1 i begge grafene. Tykkelsen til krystallen er i dette tilfellet $2\mu\text{m}$. Dataene er de samme som for figur 3.7.

Når bølgene har et lite avvik fra Bragg vinkelen, $\Delta\theta < \frac{5^\circ}{1000}$, vil intensiteten til den reflekterte bølgen øke, med en topp ved Bragg vinkelen. Tilsvarende vil den transmitterte bølgen miste intensitet. For $\Delta\theta > \frac{5^\circ}{1000}$ inntreffer små interferenseffekter, som vises i figur 3.8(a). Når polarisasjonsfaktoren er lik $\cos 2\theta_B$, ser grafene helt tilsvarende ut, men med andre akseverdier.

3.4.2 Med absorpsjon

Nå antas det at krystallen er tykk og at absorpsjonsevnen er så stor at den ikke kan neglisjeres. I realiteten er refleksjonskoeffisienten satt sammen av en realdel og en imaginærdel. Ved å bruke den såkalte Prins metoden, kan refleksjons- og transmisjonskoeffisienten uttrykkes (James, 1962, s. 62):

$$g = g' + ig'' \quad g_0 = g'_0 + ig''_0$$

Den imaginære delen uttrykker absorpsjonen. Det er strukturfaktoren som gir opphav til denne skrivemåten. Når en tar hensyn til anomal spredning vil den være $F_{\mathbf{h}} = F'_{\mathbf{h}} + iF''_{\mathbf{h}}$ (Authier, 2001, s.38). Borie (1966) og Warren (1990) antar videre at den imaginære delen av $F_{\mathbf{h}}$ er uavhengig av 2θ slik at $F''_{\mathbf{h}} = F''_0$. Denne tilnærmingen brukes i den videre utledningen men implementeres ikke i Mathematica 8.0. Selv om de to faktorene er tilnærmet like, gir ikke programmet tilfredsstillende resultat når krystallen er tykk.

Fra avsnitt 3.2 er refleksjonskoeffisienten uttrykt som

$$g = -\frac{\lambda d' r_e C}{V_c \cos \theta_B} F_{\mathbf{h}} = -\frac{\lambda d' r_e C}{V_c \cos \theta_B} (F'_{\mathbf{h}} + iF''_{\mathbf{h}}) \quad (3.32)$$

Her er altså $g' = -\frac{\lambda d' r_e C}{V_c \cos \theta_B} F'_{\mathbf{h}}$ og $g'' = -\frac{\lambda d' r_e C}{V_c \cos \theta_B} F''_{\mathbf{h}}$.

Tilfelle I

Når polarisasjonsfaktoren er lik 1, uttrykkes refleksjons- og transmisjonskoeffisienten som:

$$g = -\frac{\lambda d' r_e}{V_c \cos \theta_B} F'_{\mathbf{h}} - i \frac{\lambda d' r_e}{V_c \cos \theta_B} F''_{\mathbf{h}}$$

og

$$g_0 = -\frac{\lambda d' r_e}{V_c \cos \theta_B} F'_0 - i \frac{\lambda d' r_e}{V_c \cos \theta_B} F''_0$$

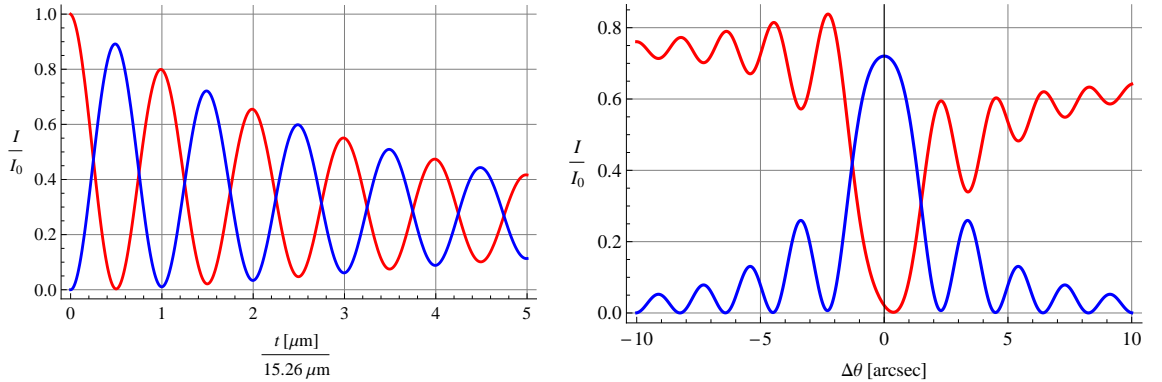
Av ligningene over observerer en at $g'' = g''_0$. Dette medfører at eksponentialfunksjonene i ligning (3.25) og (3.26) kan uttrykkes (Warren, 1990, s. 345):

$$\begin{aligned} \exp[-i(g_0 - g)s] &= \exp[-i(g'_0 + ig''_0 - g' - ig'')s] \\ &= \exp[-i(g'_0 - g')s] \exp[-i(ig''_0 - ig'')s] \\ &= \exp[-i(g'_0 + g')s] \exp[g''_0(1 - 1)s] \\ &= \exp[-i(g'_0 + g')s] \end{aligned} \quad (3.33)$$

$$\begin{aligned}
\exp[-i(g_0 + g)s] &= \exp[-i(g'_0 + ig''_0 + g' + ig'')s] \\
&= \exp[-i(g'_0 + g')s] \exp[-i(ig''_0 + ig'')s] \\
&= \exp[-i(g'_0 + g')s] \exp(2g''_0 s)
\end{aligned} \tag{3.34}$$

I tilfeller der krystallen blir veldig tykk, kan en se fra uttrykk (3.34) at absorpsjonen vil få uttrykket til å gå mot null. Det vil likevel bli et bidrag til intensiteten fra uttrykk (3.33), hvor en ser at absorpsjonen forsvinner.

I boken til Authier (2001) har han to plott som svarer til symmetrisk Laue geometri, (s. 96-97). Han har satt bølgelengden lik $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$. Pendelløsningsavstanden, det vil si avstanden mellom to intensitetsmaksima, er lik $15.26 \mu\text{m}$. Forholdet mellom tykkelsen og pendelløsningsavstanden er lik $\frac{t[\mu\text{m}]}{15.26\mu\text{m}}$. For plottet i figur 3.9(b) er dette forholdet lik 1.5. Refleksjonen er fra (220) planskaren og Bragg vinkelen er lik $\theta_B = 23.671^\circ$. Med disse dataene kan grafene til Authier (2001) gjenskapes ved å bruke Darwin teorien i transmisjonsgeometri.

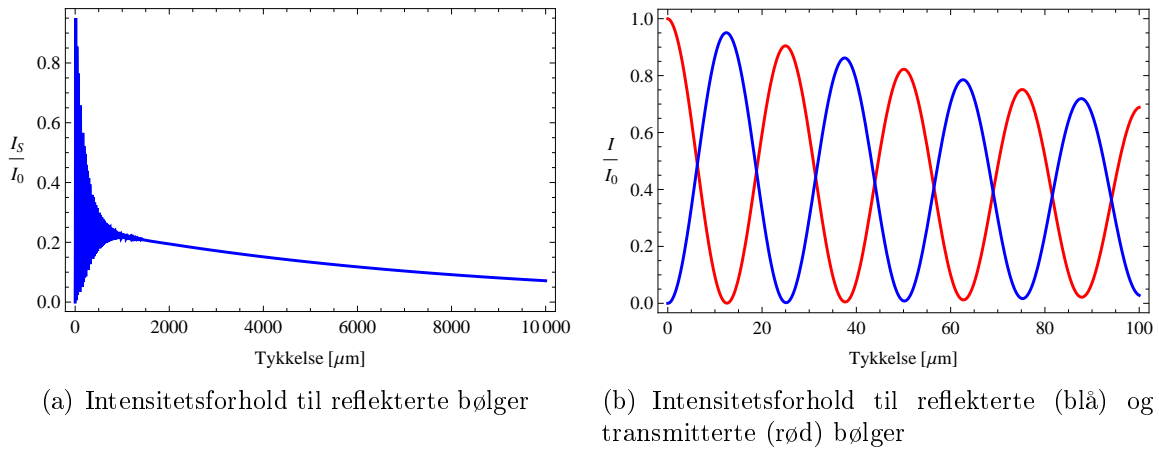


(a) Intensitetsforholdets avhengighet av krystalltykkelsen

(b) Intensitetsforholdets avhengighet av vinkelavvik fra Bragg vinkelen, θ_B

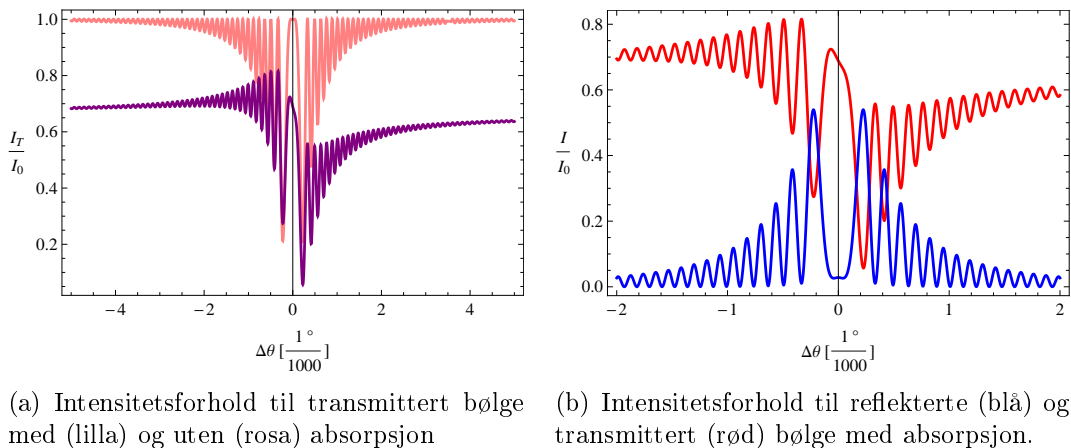
Figur 3.9: Den røde bølgen viser intensiteten til den transmitterte bølgen, mens intensiteten til den reflekterte bølgen er merket med blå. a) Authier (2001) plotter tykkelsen delt på pendelløsningsavstanden, som i dette tilfellet er $15.26 \mu\text{m}$. Det medfører at bølgetoppene for transmittert intensitet og bølgedalene for reflektert intensitet har heltallig tykkelsesforhold. b) Her er vinkelavviket gitt med enhet arcsec.

I de resterende eksemplene brukes de samme verdiene for bølgelengde og plan som i tilfellene der absorpsjon neglisjeres.



Figur 3.10: Viser intensitetsforholdet, $\frac{I}{I_0}$, avhengig av tykkelsen på krystallen. For disse plottene er det ikke avvik fra fra Bragg vinkelen, $\Delta\theta_B = 0$.

Fra figur 3.10 kan en nå se at absorpsjon i krystallen er inkludert. Summen av intensitetsforholdet til den transmitterte og reflekterte bølgen blir ikke lenger lik 1, men noe av intensiteten forsvinner. Den blir absorbert i krystallen. Dersom krystallen er veldig tykk, vil en forvente at all intensitet blir absorbert. Da vil en hverken kunne observere transmittert eller reflektert intensitet. Men av figur 3.10(a) ser en at dette ikke er tilfelle. Dette stemmer med ligning (3.33), hvor den effektive absorpsjonen er lik null. Dette kalles i litteraturen for Borrmann effekten (Borie, 1966; Warren, 1990, s. 340, 345).



Figur 3.11: For disse plottene antar en at krystallen er $100 \mu\text{m}$ tykk. a) Den rosa grafen viser intensitetsforholdet for transmitterte bølger uten absorpsjon, mens den lilla bølgen illustrerer transmitterte bølger med absorpsjon i krystallen.

Ved å la θ_T og dermed θ_S ha et avvik fra Bragg vinkelen, kan en illustrere hvordan intensitetsforholdet avhenger av dette avviket. To av disse plottene er gjengitt i figur 3.11(a). Der ser en tydelig at intensiteten til transmitterte bølger blir mindre med absorpsjon i krystallen enn uten. Av den rosa grafen kan en også se at formen på kurven har endret seg når krystallen er tykk i forhold til når den er tynn, figur 3.8(b). Fra figur 3.11(b) ser en at den reflekterte bølgen har intensitet som er symmetrisk om Bragg vinkelen, hvor den også har et bunnpunkt (for dette eksemplet). Den transmitterte bølgen har et ekstremalpunkt ved et lite avvik fra Bragg vinkelen. De detaljerte formene på denne type grafer er svært avhengige av tykkelsen på krystallen.

Tilfelle II

Når polarisasjonsfaktoren, C , er lik $\cos 2\theta_B$ uttrykkes refleksjons- og transmisjonskoeffisientene som:

$$g = -\frac{\lambda d' r_e \cos 2\theta_B}{V_c \cos \theta_B} F'_h - i \frac{\lambda d' r_e \cos 2\theta_B}{V_c \cos \theta_B} F''_h$$

og

$$g_0 = -\frac{\lambda d' r_e}{V_c \cos \theta_B} F'_0 - i \frac{\lambda d' r_e}{V_c \cos \theta_B} F''_0$$

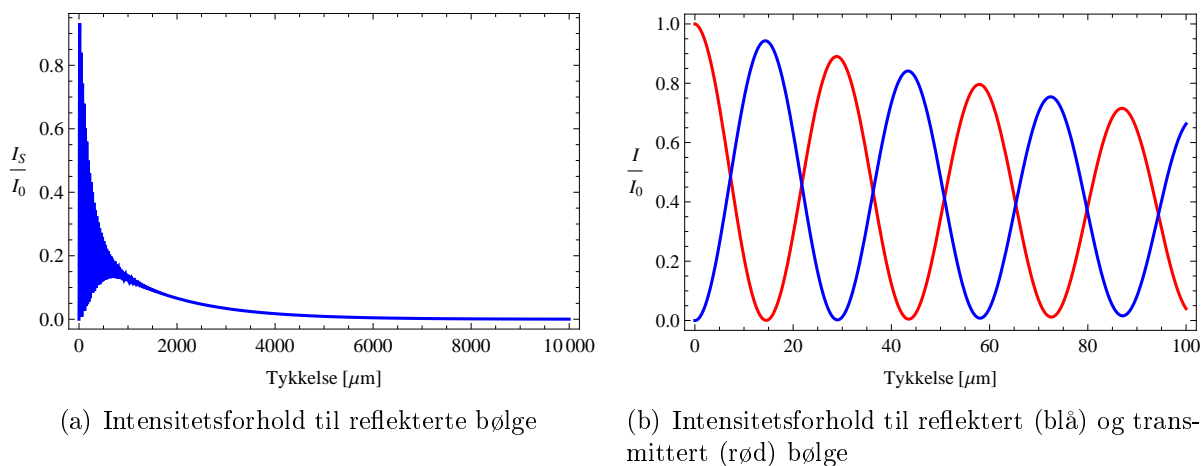
Av uttrykkene over finnes sammenhengen $g'' = g'_0 \cos 2\theta_B$. Dette medfører at eksponentialfunksjonene i ligning (3.25) og (3.26) kan skrives:

$$\begin{aligned} \exp[-i(g_0 - g)s] &= \exp[-i(g'_0 + ig''_0 - g' - ig'')s] \\ &= \exp[-i(g'_0 - g')s] \exp[-i(ig''_0 - ig'')s] \\ &= \exp[-i(g'_0 + g')s] \exp[g''_0(1 - \cos 2\theta_B)s] \end{aligned} \quad (3.35)$$

$$\begin{aligned} \exp[-i(g_0 + g)s] &= \exp[-i(g'_0 + ig''_0 + g' + ig'')s] \\ &= \exp[-i(g'_0 + g')s] \exp[-i(ig''_0 + ig'')s] \\ &= \exp[-i(g'_0 + g')s] \exp[g''_0(1 + \cos 2\theta_B)s] \end{aligned} \quad (3.36)$$

I begge tilfellene vil absorpsjonen i en tykk krystall medføre at eksponentialfunksjonene går mot null. Ut i fra dette forventer en at for veldig tykke

krystaller vil en ikke registrere hverken transmitterte eller reflekterte bølger i en detektor. Dette kan illustreres ved å plote ulike situasjoner.



Figur 3.12: Viser intensitetsforholdet, $\frac{I}{I_0}$, avhengig av tykkelsen på krystallen.

Som en forventet av uttrykkene over, kan en se av figur 3.12(a) at intensiteten vil bli totalt absorbert av krystallen når den er veldig tykk. Det gjelder både den transmitterte og reflekterte bølgen (se tillegg A). Ved å sammenligne figur 3.12(b) med figur 3.10(b), kan en se at intensiteten varierer mindre med tykkelsen for denne situasjonen. Det vil si at ekstingsjonslengden er endret.

Kapittel 4

Asymmetrisk Laue geometri

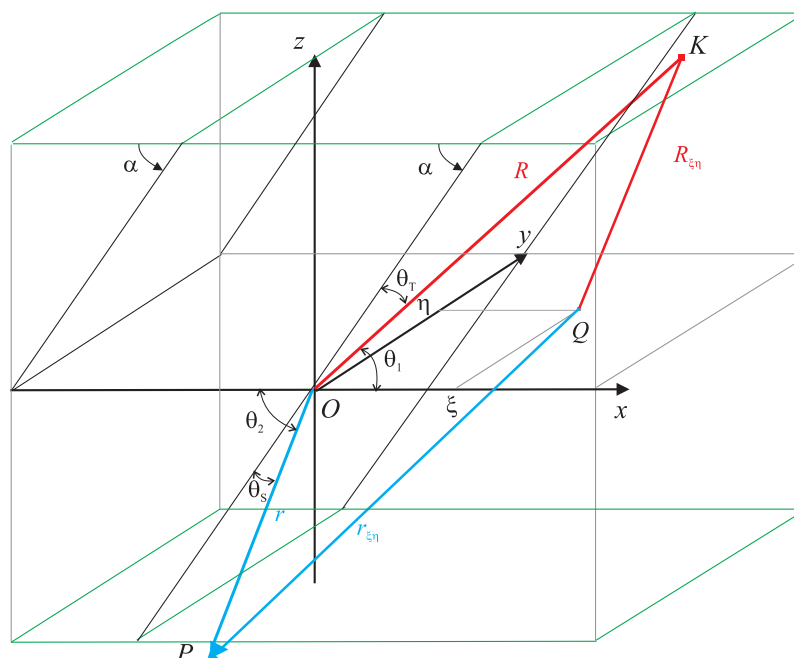
I 1967 publiserte Borie enda en artikkel med utgangspunkt i Darwins dynamiske røntgendiffraksjonsteori. I denne artikkelen er rekursjonsligningene for transmitterte og reflekterte bølger, analysert for asymmetrisk Laue geometri. Fremgangsmåten for å sette opp rekursjonsligningene og løse dem, tilsvarer det som er gjort i avsnitt 3.2 og 3.3.

Kuznetsov og Fofanov (1970) hevder at Borie har gjort en feil i artikkelen fra 1967. Borie har bare tatt hensyn til asymmetri i fasefaktoren, og ikke i refleksjonskoeffisienten. Dette medfører at ligningene til Borie i praksis bare gjelder i det symmetriske tilfellet som er beskrevet i kapittel 3. I artikkelen til Kuznetsov og Fofanov (1970) vises det hvor Borie har tatt feil og korrekte rekursjonsligninger settes opp. Disse blir gjort om til en differensialligning, som løses. I dette kapitlet blir feilen til Borie nærmere diskutert. Videre finnes intensiteten til transmittert og reflektert bølge ved ett sett nye rekursjonsligninger, på tilsvarende måte som i avsnitt 3.3.

Kuznetsov og Fofanov (1970) legger en annen mening i notasjonen for de transmitterte bølgene. I artikkelen henviser bølgenes indeks til planet de er transmittert gjennom. T_{s+1} betegner da amplitude og fase like etter plan $s+1$. Dette medfører at de får andre faseledd i sine rekursjonsligninger. Planene som sprer omtales som Bragg plan og er asymmetriske i forhold til krystall-overfalten. I Warren (1990) sin behandling av asymmetrisk Bragg refleksjon, eksisterer spredene langs loddlinjer normalt Bragg planene. For det videre arbeidet i dette kapitlet, nyttes en geometri der spredene eksisterer langs loddlinjer normalt på overflaten. Notasjon for de transmitterte bølgene er som i kapittel 3.

4.1 Refleksjonskoeffisienter

For å utlede et uttrykk for refleksjonskoeffisienten, beregnes spredningen fra et fiktivt plan i krystallen. De fiktive planene er orientert parallelt med den bestrålte krystalloverflaten. Planene som er asymmetriske i forhold til overflaten omtales som Bragg plan, det er disse som sprer røntgenbølgene. Fra avsnitt 3.2 er det antatt at tilnærmingen $\theta_S \approx \theta_B$ gjelder for refleksjonskoeffisienten. I Warren (1990) sin gjennomgang av asymmetrisk Bragg refleksjon, tar han hensyn til at refleksjonskoeffisienten ikke er identisk for refleksjon og transmisjon.



Figur 4.1: Den innkommende strålen “treffer” en krystalloverflate som er parallell med xy -planet, mens den reflekterte bølgen treffer motsatt krystalloverflate. Planene parallelle med xy -planet er fiktive plan og koordinatsystemet er lagt etter disse. De fiktive planene danner vinkelen α med planene som sprer, Bragg planene. Sprednerne eksisterer på linjer der de to planene skjærer hverandre. Strålekilden er plassert i K og observasjonspunktet i P , begge i xz -planet. En vilkårlig spredner, Q , har koordinatene $(\xi, \eta, 0)$ i det tredimensjonale koordinatsystemet.

Fra figur 4.1 ser en at:

$$\theta_1 = \alpha - \theta_T \quad (4.1a)$$

$$\theta_2 = \alpha + \theta_S \quad (4.1b)$$

θ_T og θ_S er Bragg vinkelen, θ_B , med tilhørende korreksjonsledd for geometrisk avvik og refraksjon. Når $\alpha = 180^\circ$, tilsvarer Bragg planene den symmetriske Bragg geometrien i kapittel 2. Dersom $\alpha = 90^\circ$, oppstår den symmetriske Laue geometrien representert i kapittel 3. Authier (2001) uttrykker skråstillingen til planene ved en vinkel mellom Bragg planene og en vektor normalt på krystaloverflaten, ψ_n , slik at $\alpha = \frac{\pi}{2} - \psi_n$ (Authier, 2001, s. 84-85). For at strålen skal komme inn og ut av krystallen og representere Laue geometri, må $\theta_1 > 0^\circ$ og $\theta_2 < 180^\circ$. Dersom en ser bort fra korreksjonsledd, finnes grensebetingelsene for α til å være lik:

$$\theta_B < \alpha < 180^\circ - \theta_B \quad (4.2)$$

Uttrykkene for $R_{\xi\eta}$ og $r_{\xi\eta}$, som brukes til å finne et uttrykk for refleksjonskoeffisienten, utledes på tilsvarende måte som i avsnitt 2.1:

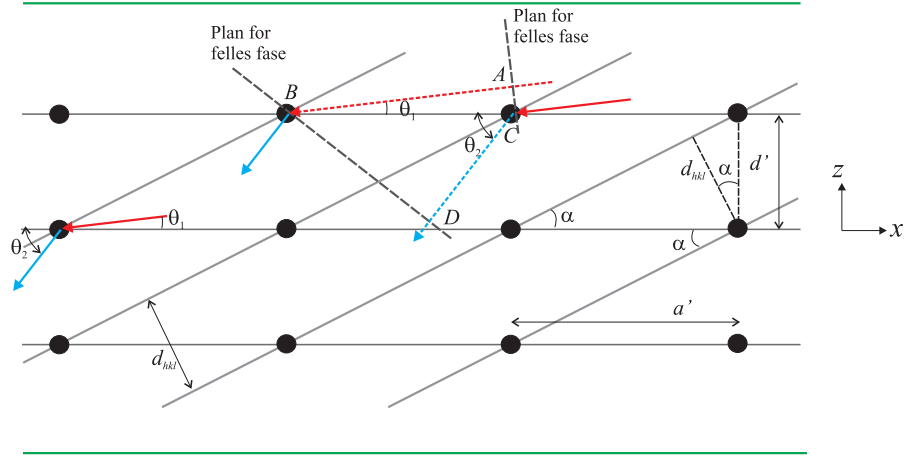
$$\begin{aligned} |\overrightarrow{KQ}| &= R_{\xi\eta} = R - \xi \cos \theta_1 + \frac{\xi^2 \sin^2 \theta_1 + \eta^2}{2R} \\ |\overrightarrow{QP}| &= r_{\xi\eta} = r + \xi \cos \theta_2 + \frac{\xi^2 \sin^2 \theta_2 + \eta^2}{2r} \end{aligned}$$

Siden α kan være en stor vinkel må $\theta_1 \neq \theta_2$, slik som i avsnitt 3.2. Med $R \gg r$ og $R + r = \rho$ kan summen av veilengdene skrives:

$$|\overrightarrow{KQ}| + |\overrightarrow{QP}| = R_{\xi\eta} + r_{\xi\eta} \approx \rho - \xi(\cos \theta_1 - \cos \theta_2) + \frac{\xi^2 \sin^2 \theta_2 + \eta^2}{2r} \quad (4.3)$$

Ved å sette $\alpha = 180^\circ$ fås samme uttrykk som for Bragg geometri i avsnitt 2.1. En ser også at ved å sette $\alpha = 90^\circ$ blir ligning (4.3) nøyaktig lik ligning (3.2) i avsnitt 3.2.

Fra figur 4.2 ser en at ekstra veilengde kan uttrykkes ved lengdestykkene $AB - CD$, denne veilengden må være et helt antall bølgelengder, $n\lambda$. Det gir:



Figur 4.2: Tversnitt av en kystall. De bestrålte krystalloverflatene er merket grønn og er parallell med de fiktive planene. De asymmetriske planene representerer Bragg plan som sprer strålingen. Avstanden mellom Bragg planene kan uttrykkes $d' \cos \alpha = a' \sin \alpha = d_{hkl}$. Figuren viser også en sammenheng mellom θ_1 og θ_2 . Geometrien er valgt slik at spredene, illustrert som svarte kuler, ligger langs en linje normalt på overflaten.

$$a'(\cos \theta_1 - \cos \theta_2) = n \lambda \quad (4.4)$$

Dersom avviket, $\Delta\theta$, neglisjeres, kan en se at ligningen over gir Braggs lov (avsnitt 1.3 s. 23):

$$\cos \theta_1 - \cos \theta_2 \approx 2 \sin \alpha \sin \theta_B = \frac{n \lambda \sin \alpha}{d_{hkl}}$$

I det fiktive planet finnes bare spredene i posisjoner der $\xi = ma'$, hvor m er et vilkårlig heltall. Dette brukes til å vise at $\xi(\cos \theta_1 - \cos \theta_2) = mn\lambda$ i ligning(4.3). N er antall atomer per volumenhet og d' avstanden mellom de fiktive planene. Ved samme fremgangsmåte som i avsnitt 3.2 finnes den reflekterte bølgen fra et uendelig stort plan til å være:

$$A_r = f(\theta_2 - \theta_1, k) \frac{N d'}{k \sin \theta_2} \exp(-i\frac{\pi}{2}) \tilde{A}_0 \frac{\exp[2\pi i(\nu t - k\rho)]}{\rho} \quad (4.5)$$

Fra figur 4.2 har en at avstanden $d' = \frac{d_{hkl}}{\cos \alpha}$. Det gir refleksjonskoeffisienten for spredning i retning av θ_2 .

$$-ig_2 = f(\theta_2 - \theta_1, k) \frac{N d'}{k \sin \theta_2} \exp(-i\frac{\pi}{2}) = f(\theta_2 - \theta_1, k) \frac{N d_{hkl}}{k \sin \theta_2 \cos \alpha} \exp(-i\frac{\pi}{2})$$

Ved å nytte sammenhengen $N f(2\theta, k) \rightarrow -\frac{r_e C F_h}{V_c}$ fra oversettelseskjemaet i avsnitt 2.1.2 (s. 41), kan refleksjonskoeffisienten uttrykkes:

$$-g_2 = \frac{\lambda d_{hkl} r_e C}{V_c \sin \theta_2 \cos \alpha} F_h \quad (4.6)$$

Fra betingelsen i ligning (4.4) må en bølge som “treffer” planene med vinkelen θ_1 , medføre en transmitterte bølge i samme retning og en reflektert bølge med retning θ_2 . Har bølgen inngangsvinkel θ_2 , vil det gi en reflektert bølge med retning θ_1 . Siden $\theta_1 \neq \theta_2$, kan en ikke bruke de samme refleksjonskoeffisientene for disse ulike tilfellene. Det er dette Kuznetsov og Fofanov (1970) mener Borie (1967) ikke har tatt hensyn til. Refleksjonskoeffisienten for den sistnevnte situasjonen blir da:

$$-ig_1 = f(\theta_2 - \theta_1, k) \frac{N d'}{k \sin \theta_1} \exp(-i\frac{\pi}{2}) = f(\theta_2 - \theta_1, k) \frac{N d_{hkl}}{k \sin \theta_1 \cos \alpha} \exp(-i\frac{\pi}{2})$$

og

$$-g_1 = \frac{\lambda d_{hkl} r_e C}{V_c \sin \theta_1 \cos \alpha} F_h \quad (4.7)$$

I kapittel 3 har en at $\theta_T = \theta_B + \Delta\theta$ og $\theta_S = \theta_B - \Delta\theta$ (ligning (3.1a) og (3.1b)). For asymmetrisk Laue geometri kan en ikke lenger bruke at avviket fra Bragg vinkelen er like stort på hver side av denne vinkelen.

Med utgangspunkt i ligning (4.4), med θ_1 og θ_2 gitt ved henholdsvis (4.1a) og (4.1b), kan en definere funksjonen:

$$z = f(\theta_T, \theta_S) = \cos(\alpha - \theta_T) - \cos(\alpha + \theta_S) = \text{konstant}$$

Det følger at differensialet til z er lik (Kaplan, 1959):

$$dz = \sin(\alpha - \theta_T)\Delta\theta_T + \sin(\alpha + \theta_S)\Delta\theta_S = 0$$

$\Delta\theta_T$ og $\Delta\theta_S$ betegner nå avvikene fra Bragg vinkelen til henholdsvis transmittert og reflektert bølge. Ved å nytte addisjonsteoremet for sinus og rekkeutvikling til laveste orden, finnes et uttrykk for sammenhengen mellom θ_T og θ_S :

$$\Delta\theta_S = -\frac{\sin(\alpha - \theta_B)\Delta\theta_T}{\sin(\alpha + \theta_B)} \quad (4.8)$$

$\Delta\theta_T$ kalles nå for $\Delta\theta$. Det gir uttrykkene for θ_1 og θ_2 til å være:

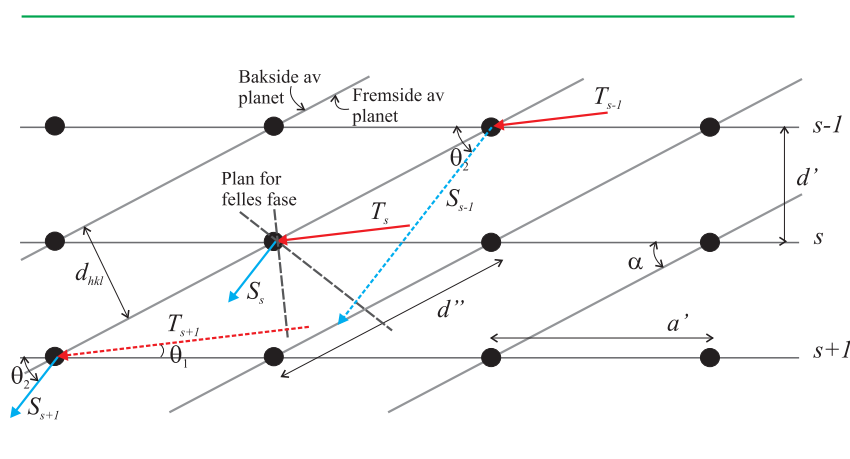
$$\theta_1 = \alpha - \theta_B - \Delta\theta \quad (4.9a)$$

$$\theta_2 = \alpha + \theta_B - \frac{\sin(\alpha - \theta_B)\Delta\theta}{\sin(\alpha + \theta_B)} \quad (4.9b)$$

4.2 Nye rekursjonsligninger

Rekursjonsligningene fra avsnitt 3.3 må nå modifiseres. Det må tas hensyn til at bølgene blir transmittert og reflektert med retninger gitt av både θ_1 og θ_2 . Det gir transmisjons- og refleksjonskoeffisienter lik henholdsvis g_{01} , g_{02} , g_1 og g_2 .

Bragg planet defineres til å ha en “fremside” og en “bakside”. “Fremtiden” angis som flaten de transmitterte bølgene “treffer”, se figur 4.1. Strukturfaktoren har generelt ulik verdi for hvilken side av Bragg planet røntgenbølgene blir reflektert fra. $F_{\mathbf{h}}$ angir verdien for “fremtiden” av planet og $F_{\bar{\mathbf{h}}}$ verdien for “baksiden”. For en bølge som blir reflektert fra baksiden av et plan, merkes derfor refleksjonskoeffisienten \bar{g}_1 eller \bar{g}_2 , etter hvilken retning den reflekterte bølgen får. I høysymmetriske krystaller har strukturfaktoren lik verdi for “fremtiden” og “baksiden” av planene. Dette gjelder eksempelvis for silisium, som ble nyttet i avsnitt 3.4.



Figur 4.3: Tversnitt av en krystall. De skråtilte planene nummereres $\dots, s-1, s, s+1, s+2, \dots$. Figuren viser ekstra veilengde for en transmittert og en reflektert stråle (stiplet linje) mellom to fiktive plan. Avstanden $d'' = \frac{d_{hkl}}{\cos \alpha \sin \alpha}$. Det er ikke tegnet inn at de reflekterte bølgene vekselvirker flere ganger med planene.

Fra figur 4.3 kan argumentene som angir faseforskyvningen uttrykkes:

$$\phi_T = 2\pi k d'' \cos(\alpha - \theta_1), \quad \phi_S = 2\pi k d'' \cos(\theta_2 - \alpha) \quad (4.10)$$

Med faseledd lik $\exp(-i\phi_T)$ og $\exp(-i\phi_S)$.

Rekursjonsligningen for den reflekterte bølgen finnes på tilsvarende måte som på side 62:

$$S_s = (-ig_2)T_s + (1 - ig_{02}) \exp(-i\phi_S)S_{s-1} \quad (4.11)$$

Rekursjonsligningen for den transmitterte bølgen blir:

$$\begin{aligned} \exp(i\phi_T)T_{s+1} &= (1 - ig_{01})T_s + (-i\bar{g}_1) \exp(-i\phi_S)S_{s-1} \\ \Rightarrow T_{s+1} &= (1 - ig_{01}) \exp(-i\phi_T)T_s + (-i\bar{g}_1) \exp[-i(\phi_T + \phi_S)]S_{s-1} \end{aligned} \quad (4.12)$$

Dette samsvarer med det Borie (1967) har gjort, med unntak av at det er tatt hensyn til ulike refleksjonskoeffisienter og at det skilles mellom “for” og “bak” side av Bragg planene. For å løse rekursjonsligningene benyttes tilsvarende fremgangsmåte som den Borie (1967) anvendte i artikkelen sin. Den samsvarer med fremgangsmåten i avsnitt 3.3.

Ved å omforme ligning (4.12) og skifte indeksene slik at $s \rightarrow s + 1$ fås:

$$S_{s-1} = \frac{T_{s+1} - (1 - ig_{01}) \exp(-i\phi_T)T_s}{(-i\bar{g}_1) \exp[-i(\phi_T + \phi_S)]}, \quad S_s = \frac{T_{s+2} - (1 - ig_{01}) \exp(-i\phi_T)T_{s+1}}{(-i\bar{g}_1) \exp[-i(\phi_T + \phi_S)]}$$

Uttrykkene for S_{s-1} og S_s settes inn i ligning (4.11). Da fremkommer en ligning som bare involverer transmitterte bølger:

$$\begin{aligned} T_{s+2} + [\bar{g}_1 g_2 + (1 - ig_{01})(1 - ig_{02})] \exp[-i(\phi_T + \phi_S)]T_s \\ = [(1 - ig_{01}) \exp(-i\phi_T) + (1 - ig_{02}) \exp(-i\phi_S)]T_{s+1} \end{aligned} \quad (4.13)$$

For å løse rekursjonsligningen brukes samme generelle løsning som i ligning (3.13):

$$T_s = Bx^s$$

Som en følge av avviket fra Bragg vinkelen i asymmetrisk geometri, blir sammenhengen mellom ϕ_T og ϕ_S modifisert fra ligning (3.14) (s. 64). En kan ikke lenger bruke at $\Delta\phi$ er lik, med motsatt fortegn, for ϕ_T og ϕ_S . Sammenhengen settes nå til:

$$\phi_T = \phi + \Delta\phi_T, \quad \phi_S = \phi + \Delta\phi_S, \quad (4.14)$$

$$\phi_T + \phi_S = 2\phi + \Delta\phi_T + \Delta\phi_S, \quad \phi_T - \phi_S = \Delta\phi_T - \Delta\phi_S \quad (4.15)$$

Matematiske detaljer:

Ved å bruke rekkeutvikling av sinus og cosinus til første ordens ledd, kan faseleddene i ligning (4.10), ϕ_T og ϕ_S , uttrykkes:

$$\phi_T = 2\pi k d'' \cos(\alpha - \theta_1) = 2\pi k d'' \cos(\theta_B + \Delta\theta_T)$$

$$\approx 2\pi k d'' [\cos\theta_B - \sin\theta_B \Delta\theta_T]$$

$$\phi_S = 2\pi k d'' \cos(\theta_2 - \alpha) = 2\pi k d'' \cos(\theta_B + \Delta\theta_S)$$

$$\approx 2\pi k d'' [\cos\theta_B - \sin\theta_B \Delta\theta_S]$$

Av dette kan en se at uttrykkene har en fellesfaktor, ϕ , lik

$$\phi = 2\pi k d'' \cos\theta_B \quad (4.16)$$

og avviket fra ϕ_T og ϕ_S kan uttrykkes:

$$\Delta\phi_T = -2\pi k d'' \sin\theta_B \Delta\theta_T \quad (4.17a)$$

$$\Delta\phi_S = -2\pi k d'' \sin\theta_B \Delta\theta_S \quad (4.17b)$$

Med tilsvarende sammenheng mellom $\Delta\phi_T$ og $\Delta\phi_S$ som mellom $\Delta\theta_T$ og $\Delta\theta_S$ i ligning (4.8):

$$\Delta\phi_S = -\frac{\sin(\alpha - \theta_B)\Delta\phi_T}{\sin(\alpha + \theta_B)}$$

Den generelle løsningen gir annengradsligningen

$$x^2 - [(1 - ig_{01}) \exp(-i\phi_T) + (1 - ig_{02}) \exp(-i\phi_S)]x + [\overline{g_1} g_2 + (1 - ig_{01})(1 - ig_{02})] \exp[-i(\phi_T + \phi_S)] = 0$$

med røttene x_1 og x_2 . Disse løsningene tilsvarer ligningene (3.15a) og (3.15b) i symmetrisk Laue geometri (s. 65):

$$x_1 = \exp(-i\phi)[G + iu] \quad (4.18a)$$

$$x_2 = \exp(-i\phi)[G - iu] \quad (4.18b)$$

For å forenkle skrivemåten i uttrykkene settes

$$u = \sqrt{\overline{g_1} g_2 \exp[-i(\Delta\phi_T + \Delta\phi_S)] - (\Delta G)^2} \quad (4.19)$$

$$G = \frac{1}{2} [(1 - ig_{01}) \exp(-i\Delta\phi_T) + (1 - ig_{02}) \exp(-i\Delta\phi_S)] \quad (4.20)$$

$$\Delta G = \frac{1}{2} [(1 - ig_{01}) \exp(-i\Delta\phi_T) - (1 - ig_{02}) \exp(-i\Delta\phi_S)] \quad (4.21)$$

Matematiske detaljer:

Annengradsligningen løses ved abc-formelen:

$$x_{1,2} = -\frac{b}{2a} \pm \frac{\sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

I dette tilfellet er

$$a = 1$$

$$b = -\exp(-i\phi) [(1 - ig_{01}) \exp(-i\Delta\phi_T) + (1 - ig_{02}) \exp(-i\Delta\phi_S)]$$

$$c = [\overline{g_1} g_2 + (1 - ig_{01})(1 - ig_{02})] \exp(-i2\phi) \exp[-i(\Delta\phi_T + \Delta\phi_S)]$$

$$\begin{aligned}
x_{1,2} &= \frac{1}{2} \exp(-i\phi) \left(\left[(1 - ig_{01}) \exp(-i\Delta\phi_T) + (1 - ig_{02}) \exp(-i\Delta\phi_S) \right] \right. \\
&\quad \pm \sqrt{\left[(1 - ig_{01}) \exp(-i\Delta\phi_T) + (1 - ig_{02}) \exp(-i\Delta\phi_S) \right]^2} \\
&\quad \left. - 4 \left\{ \overline{g_1} g_2 + (1 - ig_{01})(1 - ig_{02}) \right\} \exp[-i(\Delta\phi_T + \Delta\phi_S)] \right) \\
&= \frac{1}{2} \exp(-i\phi) \left\{ \left[(1 - ig_{01}) \exp(-i\Delta\phi_T) + (1 - ig_{02}) \exp(-i\Delta\phi_S) \right] \right. \\
&\quad \pm \sqrt{(1 - ig_{01})^2 \exp(-2i\Delta\phi_T) + (1 - ig_{02})^2 \exp(-2i\Delta\phi_S)} \\
&\quad \left. - 2(1 - ig_{01})(1 - ig_{02}) \exp[-i(\Delta\phi_T + \Delta\phi_S)] - 4\overline{g_1} g_2 \exp[-i(\Delta\phi_T + \Delta\phi_S)] \right\} \\
&= \frac{1}{2} \exp(-i\phi) \left\{ \left[(1 - ig_{01}) \exp(-i\Delta\phi_T) + (1 - ig_{02}) \exp(-i\Delta\phi_S) \right] \right. \\
&\quad \pm \sqrt{\left[(1 - ig_{01}) \exp(-i\Delta\phi_T) - (1 - ig_{02}) \exp(-i\Delta\phi_S) \right]^2} \\
&\quad \left. - 4\overline{g_1} g_2 \exp[-i(\Delta\phi_T + \Delta\phi_S)] \right\} \\
&= \exp(-i\phi) \left(G \pm \frac{1}{2} \sqrt{-\{4\overline{g_1} g_2 \exp[-i(\Delta\phi_T + \Delta\phi_S)] - (2\Delta G)^2\}} \right) \\
&= \exp(-i\phi) [G \pm iu]
\end{aligned}$$

Testløsningen kan nå skrives som en lineærkombinasjon av de to røttene, tilsvarende ligning (3.17) (s. 66):

$$T_s = B_1 x_1^s + B_2 x_2^s \quad (4.22)$$

Randbetingelsene for $s = 0$ gir

$$B_1 + B_2 = T_0 \quad (4.23)$$

og for $s = 1$ får en:

$$B_1 x_1 + B_2 x_2 = T_1 \quad (4.24)$$

I ligning (4.12) gir randbetingelsen $s = 0$ at:

$$T_1 = (1 - ig_{01}) \exp(-i\phi_T) T_0 = (1 - ig_{01}) \exp(-i\phi) \exp(-i\Delta\phi) T_0$$

Dette fører til to ligninger med to ukjente:

$$B_1 x_1 + B_2 x_2 = (1 - ig_{01}) \exp(-i\phi) \exp(-i\Delta\phi) T_0 \quad (4.25)$$

$$B_2 = T_0 - B_1 \quad (4.26)$$

Konstantene B_1 og B_2 blir da lik:

$$2B_1 = T_0 \left[1 + \frac{\Delta G}{iu} \right] \quad (4.27a)$$

$$2B_2 = T_0 \left[1 - \frac{\Delta G}{iu} \right] \quad (4.27b)$$

Matematiske detaljer:

En kan finne konstantene B_1 og B_2 på tilsvarende måte som på side 67.

$B_2 = T_0 - B_1$ settes inn i ligning (4.25) og sammen med differansen $x_1 - x_2 = 2iu \exp(-i\phi)$ gir dette:

$$\begin{aligned} B_1 &= T_0 \left[\frac{(1 - ig_{01}) \exp(-i\phi) \exp(-i\Delta\phi_T) - x_2}{2iu \exp(-i\phi)} \right] \\ &= T_0 \left[\frac{(1 - ig_{01}) \exp(-i\phi) \exp(-i\Delta\phi_T)}{2iu \exp(-i\phi)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\exp(-i\phi) \left[\frac{1}{2}(1 - ig_{01}) \exp(-i\Delta\phi_T) + \frac{1}{2}(1 - ig_{02}) \exp(-i\Delta\phi_S) - iu \right]}{2iu \exp(-i\phi)} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{T_0}{2} \left\{ 1 + \frac{1}{iu} \left[\frac{1}{2} (1 - ig_{01}) \exp(-i\Delta\phi_T) - \frac{1}{2} (1 - ig_{02}) \exp(-i\Delta\phi_S) \right] \right\} \\
&= \frac{T_0}{2} \left[1 + \frac{\Delta G}{iu} \right] = \frac{T_0}{2} \left[1 - i \frac{\Delta G}{u} \right]
\end{aligned}$$

Setter dette inn i $B_2 = T_0 - B_1$ og finner:

$$B_2 = T_0 \left[1 - \frac{1}{2} + i \frac{\Delta G}{2u} \right] = \frac{T_0}{2} \left[1 + i \frac{\Delta G}{u} \right]$$

Konstantene settes inn i ligning (4.22), som gir et generelt uttrykk for den transmitterte bølgen:

$$T_s = \frac{T_0}{2} \left[\left(1 - i \frac{\Delta G}{u} \right) x_1^s + \left(1 + i \frac{\Delta G}{u} \right) x_2^s \right] \quad (4.28)$$

Ved å sette dette inn i ligning (4.12) finnes uttrykket for den reflekterte bølgen til å være lik:

$$\exp(-i\phi) S_{s-1} = \frac{-g_2 T_0}{2u} (x_1^s - x_2^s) \quad (4.29)$$

Ved å uttrykke ligning (4.18a) og (4.18b) med hensyn på u og summere disse, finnes sammenhengen:

$$2u = -i \exp(i\phi) (x_1 - x_2)$$

Dette medfører at ligning (4.29) kan skrives:

$$S_{s-1} = -ig_2 T_0 \frac{(x_1^s - x_2^s)}{x_1 - x_2}$$

Matematiske detaljer:

For å utlede uttrykket for den reflekterte bølgen, nyttes samme fremgangsmåte som for symmetrisk Laue geometri (s. 69). Fra ligning (4.12) har en:

$$-i\bar{g}_1 \exp(-i2\phi) \exp[-i(\Delta\phi_T + \Delta\phi_S)] S_{s-1} = T_{s+1} - (1 - ig_{01}) \exp(-i\phi_T) T_s$$

Uttrykkene for T_s og T_{s+1} finnes fra ligning (4.28) og det settes inn for x_1 og x_2 (ligning (4.18a) og (4.18b)).

$$\begin{aligned} & -i\bar{g}_1 \exp(-i2\phi) \exp[-i(\Delta\phi_T + \Delta\phi_S)] S_{s-1} \\ = & \frac{T_0}{2} \left[\left(1 - i\frac{\Delta G}{u}\right) x_1^{s+1} + \left(1 + i\frac{\Delta G}{u}\right) x_2^{s+1} - (1 - ig_{01}) \exp(-i\phi_T) \left(1 - i\frac{\Delta G}{u}\right) x_1^s \right. \\ & \left. - (1 - ig_{01}) \exp(-i\phi_T) \left(1 + i\frac{\Delta G}{u}\right) x_2^s \right] \\ = & \frac{T_0}{2} \left\{ \left(1 - i\frac{\Delta G}{u}\right) \left[x_1 - (1 - ig_{01}) \exp(-i\phi_T) \right] x_1^s \right. \\ & \left. + \left(1 + i\frac{\Delta G}{u}\right) \left[x_2 - (1 - ig_{01}) \exp(-i\phi_T) \right] x_2^s \right\} \\ = & \frac{T_0}{2} \left\{ \left(1 - i\frac{\Delta G}{u}\right) \left[-\exp(-i\phi) (\Delta G - iu) \right] x_1^s \right. \\ & \left. + \left(1 + i\frac{\Delta G}{u}\right) \left[-\exp(-i\phi) (\Delta G + iu) \right] x_2^s \right\} \\ = & -\frac{T_0 \exp(-i\phi)}{2iu} \left[(iu + \Delta G) (\Delta G - iu) x_1^s + (iu - \Delta G) (\Delta G + iu) x_2^s \right] \\ = & -\frac{T_0 \exp(-i\phi)}{2iu} \left\{ [(\Delta G)^2 + u^2] (x_1^s - x_2^s) \right\} \\ = & -\frac{T_0 \exp(-i\phi)}{2iu} \bar{g}_1 g_2 \exp(-i\Delta\phi_T) \exp(-i\Delta\phi_S) (x_1^s - x_2^s) \\ \Rightarrow & \exp(-i\phi) S_{s-1} = \frac{-g_2 T_0}{2u} (x_1^s - x_2^s) \end{aligned}$$

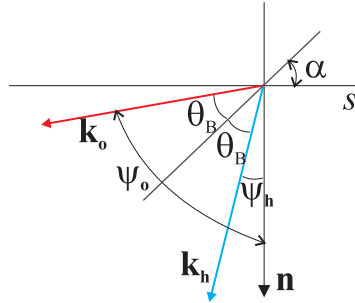
4.3 Intensitet

I asymmetriske tilfeller må et geometrisk ledd multipliseres med intensiteten til den reflekterte strålingen. Da får en overført uttrykkene til effektnivå, med korrekt håndtering av stråletverrsnittet (Authier, 2001, s. 84, 96, 211). Dette leddet kalles i litteraturen for det asymmetriske forholdet. Intensiteten til den transmitterte og reflekterte bølgen kan nå finnes ved uttrykkene:

$$I_T = T_s \times T_s^*$$

$$I_S = \left| \frac{\gamma_h}{\gamma_o} \right| S_{s-1} \times S_{s-1}^* \approx \left| \frac{\gamma_h}{\gamma_o} \right| S_s \times S_s^*$$

T_s^* er den komplekskonjugerte av T_s , ligning (4.28), og S_s^* den komplekskonjugerte av S_s , ligning (4.29). Det asymmetriske forholdet er gitt som cosinus til vinklene som innkommende og reflektert stråle danner med overflatenormalen \mathbf{n} . Authier (2001) definerer disse vinklene som henholdsvis ψ_o og ψ_h , se figur 4.4. Slik at $\gamma_o = \cos[\frac{\pi}{2} - (\alpha - \theta_B)] = \sin(\alpha - \theta_B)$ og $\gamma_h = \cos[\frac{\pi}{2} - (\alpha + \theta_B)] = \sin(\alpha + \theta_B)$. I Laue geometri er det asymmetriske forholdet en positiv størrelse (Authier, 2001, s. 84). En observerer at i et symmetrisk tilfelle blir forholdet lik 1, derfor tas ikke leddet med i behandlingen i kapittel 3.



Figur 4.4: Av figuren kan en se at $\psi_o = \frac{\pi}{2} - (\alpha - \theta_B)$ og $\psi_h = \frac{\pi}{2} - (\alpha + \theta_B)$. Normalen til krystalloverflaten er merket \mathbf{n} .

I kapittel 3 ble det antatt at avstanden mellom de fiktive planene var irrelevant. For asymmetrisk geometri er det også mulig å gjennomføre en matematisk analyse av slutt uttrykkene, som viser at avstanden mellom de fiktive planene, $\frac{d_{hkl}}{\cos \alpha}$, ikke har innvirkning på intensiteten. Tykkelsen av krystallen står da igjen som avgjørende størrelse. Det hadde vært en spennende videreføring av denne oppgaven å vist dette. Matematisk kan en da si at avstanden

mellom de fiktive planene kan velges fritt, men det gjenstår å finne en fysisk tolkning av dette argumentet.

Fra uttrykkene for refleksjonskoeffisientene og fasefaktorene kan en se at de er proporsjonale med $\frac{1}{\cos \alpha}$. Det medfører at i symmetriske tilfeller, der $\alpha = 90^\circ$, kan ikke ligningene i avsnitt 4.2 brukes til også å gjelde for symmetrisk Laue geometri. Dette kan løses ved å velge en annen avstand mellom de fiktive planene. En kan da eksempelvis sette $\frac{d_{hkl}}{\cos \alpha} \rightarrow 1$. Det er da avgjørende å merke seg at for avstanden mellom to naboatom i et Bragg plan, $d'' = \frac{d_{hkl}}{\cos \alpha \sin \alpha}$, står det igjen $\frac{1}{\sin \alpha}$. Dersom dette programmeres i Mathematica 8.0, viser det seg at programmet kan brukes både for symmetrisk- og asymmetrisk Laue geometri. Det samsvarer med at ligning (4.28) og (4.29), med å sette avstanden mellom de fiktive planene lik d_{hkl} og $\alpha = \frac{\pi}{2}$, gir tilsvarende resultat som for symmetrisk Laue geometri.

Siden avviket fra Bragg vinkelen ikke er like stort på begge sider, slik det var for symmetrisk Laue geometri, kan en finne midtpunktet i refleksområdet ved å sette $\Delta\theta = 0$. Ved å nytte rekkeutvikling til laveste orden, finnes da et uttrykk for avviket fra Bragg vinkelen. Uttrykket svarer til ligning (4.26) i Authier (2001):

$$\Delta\theta = \frac{\lambda^2 r_e F_0}{2\pi V_c \sin 2\theta_B} \left(1 - \frac{\gamma_h}{\gamma_o} \right) \quad (4.30)$$

Matematiske detaljer:

Fra ligning (4.21) er ΔG uttrykt som:

$$\Delta G = \frac{1}{2} [(1 - ig_{01}) \exp(-i\Delta\phi_T) - (1 - ig_{02}) \exp(-i\Delta\phi_S)]$$

Ved å rekkeutvikle eksponentialfunksjonen til første orden og anta at produktet av to små størrelser kan neglisjeres, kan ΔG uttrykkes:

$$\begin{aligned}
\Delta G &\approx \frac{1}{2} [(1 - ig_{01})(1 - i\Delta\phi_T) - (1 - ig_{02})(1 - i\Delta\phi_S)] \\
&\approx \frac{1}{2} [(1 - ig_{01} - i\Delta\phi_T) - (1 - ig_{02} - i\Delta\phi_S)] \\
&= -\frac{i}{2} [(g_{01} - g_{02}) + (\Delta\phi_T - \Delta\phi_S)] \\
&= -\frac{i}{2} \left\{ (g_{01} - g_{02}) + \Delta\phi_T \left[1 + \frac{\sin(\alpha - \theta_B)}{\sin(\alpha + \theta_B)} \right] \right\} \\
&= -\frac{i}{2} \left\{ (g_{01} - g_{02}) + \Delta\phi_T \left[\frac{2 \sin \alpha \cos \theta_B}{\sin(\alpha + \theta_B)} \right] \right\} = 0 \\
&\Rightarrow \left\{ (g_{01} - g_{02}) + \Delta\phi_T \left[\frac{2 \sin \alpha \cos \theta_B}{\sin(\alpha + \theta_B)} \right] \right\} = 0
\end{aligned}$$

Transmisjonskoeffisientene, g_{01} og g_{02} , er små størrelser. Derfor kan $\Delta\theta$ i $\sin \theta_1$ og $\sin \theta_2$ neglisjeres. Det gir:

$$\begin{aligned}
-g_{01} &= \frac{\lambda d_{hkl} r_e F_0}{V_c \sin \theta_1 \cos \alpha} \approx \frac{\lambda d_{hkl} r_e F_0}{V_c \sin(\alpha - \theta_B) \cos \alpha} \\
-g_{02} &= \frac{\lambda d_{hkl} r_e F_0}{V_c \sin \theta_2 \cos \alpha} \approx \frac{\lambda d_{hkl} r_e F_0}{V_c \sin(\alpha + \theta_B) \cos \alpha}
\end{aligned}$$

Et uttrykk for $\Delta G = 0$ kan nå finnes ved å sette inn for g_{01} , g_{02} og $\Delta\phi_T$:

$$\begin{aligned}
-\left\{ \frac{\lambda d_{hkl} r_e F_0}{V_c \cos \alpha} \left(\frac{1}{\sin(\alpha - \theta_B)} - \frac{1}{\sin(\alpha + \theta_B)} \right) = \frac{2\pi d_{hkl} \sin \theta_B \Delta\theta}{\lambda \cos \alpha \sin \alpha} \left[\frac{2 \sin \alpha \cos \theta_B}{\sin(\alpha + \theta_B)} \right] \right\} \\
\Rightarrow \Delta\theta = -\frac{\lambda^2 r_e F_0 \sin(\alpha + \theta_B)}{4\pi V_c \sin \theta_B \cos \theta_B} \left[\frac{1}{\sin(\alpha - \theta_B)} - \frac{1}{\sin(\alpha + \theta_B)} \right] \\
= \frac{\lambda^2 r_e F_0}{2\pi V_c \sin 2\theta_B} \left[1 - \frac{\sin(\alpha + \theta_B)}{\sin(\alpha - \theta_B)} \right]
\end{aligned}$$

4.4 Detalj resultater

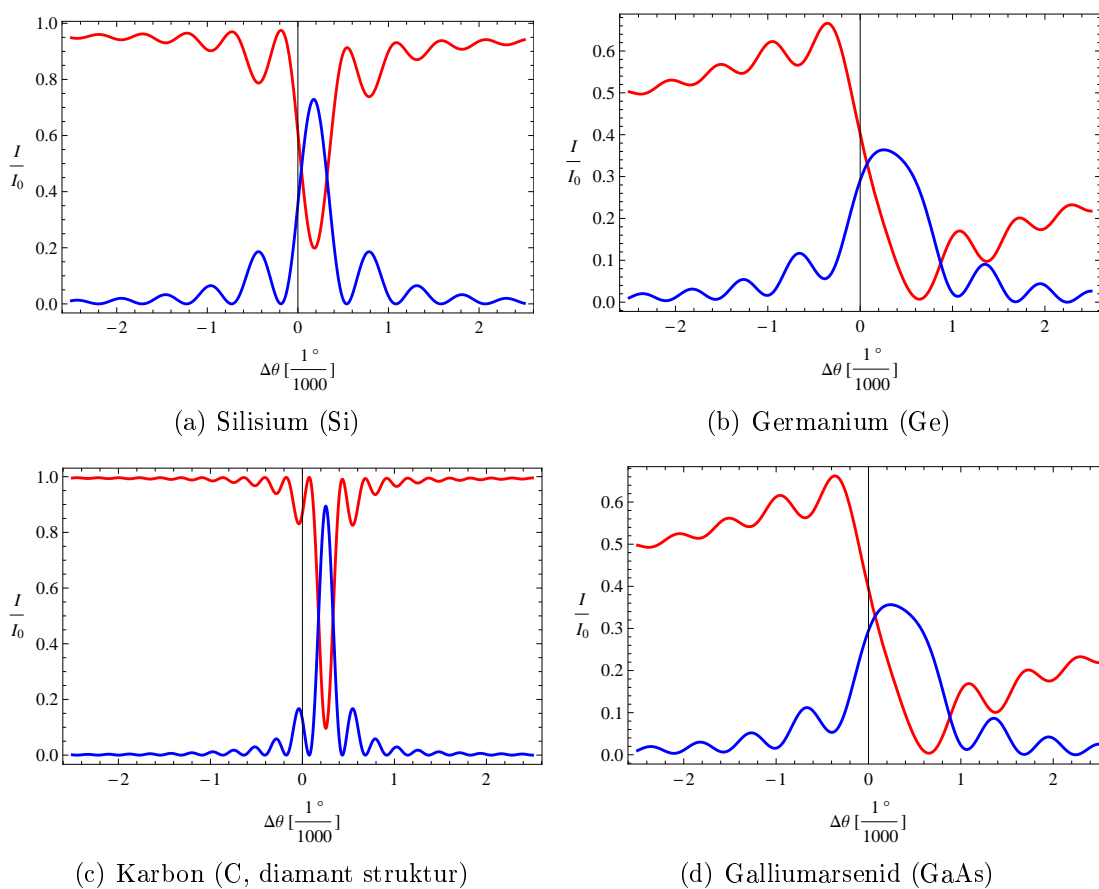
Ved å implementere ligningene fra avsnitt 4.2 i Mathematica 8.0, beregnes intensiteten for gitte bølgelengder og planskærer. I litteraturen er plott og tabellverdier for tilfeller i asymmetrisk Laue geometri mangelfulle. Derfor er resultater fra denne programvaren vist i dette avsnittet, slik at det er mulig for andre å gjenskape tilsvarende verdier og grafer. Bølgelengden er satt til $\lambda = 1.0 \text{ \AA}$ og det er refleksjon fra (220) planskæren. Krystallen er $10 \mu\text{m}$ tykk, polarisasjonsfaktoren er lik 1 og det regnes med absorpsjon i krystallen.

I tabell 4.1 vises intensitetsforholdet for transmitterte og reflekterte bølger for ulike orienteringer av Bragg planene med hensyn til overflaten. Avviket fra Bragg vinkelen, $\Delta\theta$, er lik uttrykket gitt i ligning (4.30). Det vil si at verdiene er hentet fra midtpunktet i refleksområdet.

Oversikt over intensitetsforhold med krystaller av ulike grunnstoff					
α	Transmittert/ Spredt	Silisium	Germanium	Karbon	Galliumarsenid
60°	$\frac{I(T)}{I_0} / \frac{I(S)}{I_0}$	0.010970	0.45810	0.10397	0.45991
		0.942332	0.093437	0.89166	0.088896
80°	$\frac{I(T)}{I_0} / \frac{I(S)}{I_0}$	0.082846	0.47534	0.23710	0.46214
		0.877148	0.10958	0.75899	0.11987
100°	$\frac{I(T)}{I_0} / \frac{I(S)}{I_0}$	0.083610	0.47117	0.23781	0.45762
		0.87599	0.11014	0.75765	0.12037
120°	$\frac{I(T)}{I_0} / \frac{I(S)}{I_0}$	0.01203	0.46414	0.10444	0.46449
		0.94174	0.09365	0.89081	0.08912
140°	$\frac{I(T)}{I_0} / \frac{I(S)}{I_0}$	0.19952	0.12845	0.096301	0.13443
		0.72891	0.35908	0.89397	0.35035

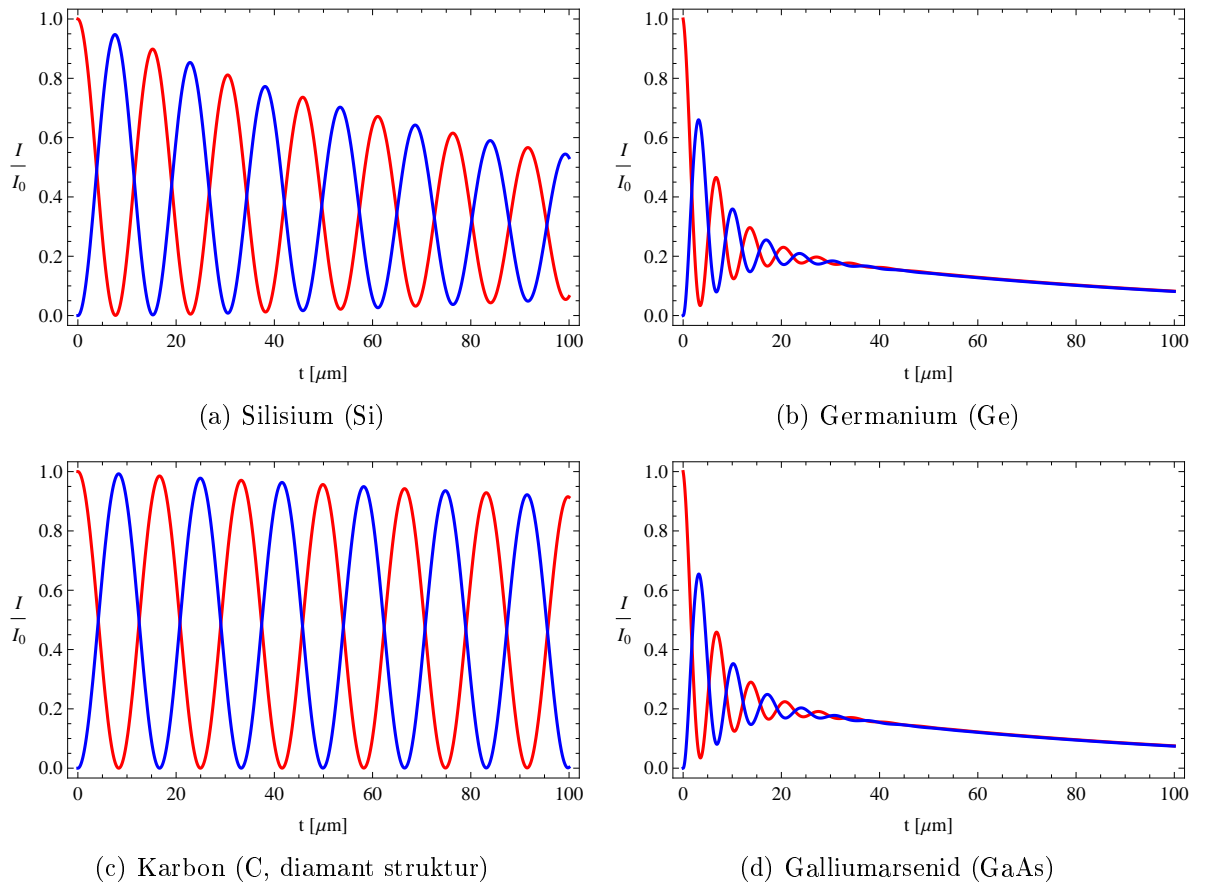
Tabell 4.1: Tabellen gir en oversikt over intensitetsforholdets numeriske verdi for Silisium (Si), Germanium (Ge), Karbon (C, diamant struktur) og Galliumarsenid (GaAs).

Intensitetsforholdet til røntgenbølger som vekselvirker med ulike krystallsystemer, er vist i figur 4.5. Da har planene en helling på $\alpha = 140^\circ$ i forhold til krystaloverflaten. De aktuelle krystallene er Silisium, Germanium, Karbon med diamant struktur og Galliumarsenid. De tre førstnevnet er enatomige og alle er de høysymmetriske. Av grafene kan en se at det ikke lenger er topp- og bunnpunkter når Bragg betingelsen er nøyaktig tilfredsstilt. Disse ekstremalpunktene er forskjøvet til høyre, men det er forskjellig fra krystall til krystall hvor stort vinkelavvik forskyvningen representerer. Når $\alpha < 90^\circ$ blir grafene forskjøvet mot venstre.



Figur 4.5: Grafene viser hvordan intensitetsforholdet varierer for ulike krystallsystem. Den røde grafen illustrerer intensitetsforholdet til transmittert bølge og den blå grafen viser tilsvarende forhold for reflektert bølge.

Grafene og de numeriske verdiene i dette programmet, samsvarer med to simuleringer basert på fundamentalteorien og Takagi-teorien (upublisert). Notatboken basert på Darwins teori i asymmetrisk Laue geometri er lagt ved i tillegg B.



Figur 4.6: Grafene viser hvordan intensitetsforholdet varierer for ulike tykkelser på krys-
tallsystemet. Den røde grafen illustrerer intensitetsforholdet til transmittert bølge og den
blå grafen viser tilsvarende forhold for reflektert bølge.

Fra verdiene i tabellen og av plottene, kan en se at Germanium og Galliumarsenid har nesten tilsvarende intensitetsforhold for den transmitterte og reflekterte strålingen. Fra det periodiske system finner en at Germanium har atomnummer $Z = 32$, Gallium $Z = 31$ og Arsen har atomnummer $Z = 33$. Med bakgrunn i dette virker det som om Galliumarsenid, med nabogrunnstoff på begge sider av Germanium i det periodiske system, har tilsvarende spredningsegenskaper som denne krystallen.

Oppsummering

Det er utfordrende, lærerikt og spennende å sette seg inn i et nytt fagfelt. Til tider har det vært vanskelig å ikke ha arbeidet mer med røntgendiffraksjon i forkant. Da hadde de grunnleggende kunnskapene og språket vært kjent. Men denne svakheten har også gitt mulighet til å “se” fagfeltet og problemstillingene med “nye og friske øyne”. Det har også vært utfordrende med tanke på at artikkelen til Darwin (1914a) er gammel og må forstås i lys av tiden den er skrevet i. Hvilke eksperimentelle erfaringer la han til grunn og hvilken kunnskap innenfor matematikk hadde de på den tiden? Hvordan de eksperimentelle observasjonene foregår i dag, er heller ikke så lett å forestille seg uten selv å ha sett det. Dette medfører en ekstra utfordring: Å forstå hvor liten krystallen er og hvordan geometrien er i praksis.

Det er også svært lærerikt og spennende å fordype seg i ett fagfelt. Da har en tid og mulighet til å lære “språket” og å sette seg inn i emnet på egenhånd. En kan stoppe opp ved det som er uklart og bruke tid på å finne en forklaring på utfordringen. Når en skal formidle noe til andre, må en først forstå innholdet selv. Dette har medført at stoffet er grundig gjennomarbeidet og forstått. Formidlende figurer er tegnet der det er nødvendig, for å fremheve innholdet i teksten.

Den første artikkelen til Darwin (1914a) utleder sentrale uttrykk som refleksjonskoeffisient og brytningsindeks. Oversettelsesskjemaet på side 41 definerer hvordan refleksjonskoeffisienten, slik den ble uttrykt av Darwin i 1914, kan skrives ved dagens krystallografiske notasjon. Dette gjør det enklere å plote uttrykkene for transmittert og reflektert bølge i Mathematica 8.0. I avsnitt 2.2 ble ett uttrykk for intensiteten til den reflekterte bølgen fra flere plan utledet. Det har også kommet frem at artikkelen ikke kan sies å være basert på en rent geometrisk teori. Det tas med i betraktningen at den transmitterte bølgen fra plan nummer s også blir transmittert videre gjennom planene i krystallen. Mens bidragene den reflekterte bølgen gir når den spres videre av planene i krystallen neglisjeres. Den andre artikkelen til Darwin

(1914b) tar fullt ut hensyn til at røntgenbølgene vekselvirker flere ganger med planene, og blir dermed omtalt som dynamisk teori.

Lenge var det uklart hvilke plan som spredde røntgenbølgene i transmisjonsgeometri, del II. Det tok tid å forstå at litteraturen skiller mellom fiktive atomplan og reelle refleksjonsplan. Det var også vanskelig å forstå forskjellen på Bragg geometrien i kapittel 2 og Laue geometrien i del II. Nå er det klart at planene som sprer i de to tilfellene kan ha like verdier for (hkl) , men da har krystallene ulik overflatedefinisjon, som gir Bragg geometri eller Laue geometri. Det er også klart at planene litteraturen omtaler som “Bragg plan” er planene som sprer bølgene i henhold til Braggs lov. Hvordan figurene skal tegnes for å gi en helhetlig fremstilling er prøvd ut. Skal krystalloverflaten være tegnet parallelt med yz -planet eller parallelt med xy -planet? Valget ble krystalloverflater parallelle med xy -planet. En vesentlig forskjell på de to geometriene, er at i Laue geometri har krystallens tykkelse eksplisitt innflytelse.

Kapittel 3 er basert på arbeidene til Borie (1966, 1967) og Warren (1990), men går lenger med å lage plott basert på resultatene avhengig av tykkelse og av vinkelavvik fra Bragg vinkelen. Uttrykkene for den transmitterte og reflekterte bølgen i dette kapitlet gjelder for symmetrisk Laue geometri. Litteraturen bruker ulik notasjon på vinklene i tilknytning til de reflekterte bølgene. Dette gir åpning for å lage plott av situasjoner der Bragg vinkelen ikke er nøyaktig tilfredsstilt. Plottene av tilfellene hvor intensiteten avhenger av tykkelsen til krystallen og avviket fra Bragg vinkelen, samsvarer med andre publiserte arbeider.

Kapittel 4 videreutvikler prosedyren fra kapittel 3 til også å gjelde i asymmetriske situasjoner. Det kan virke som om Borie (1967) trodde resultatene i artikkelen hans kunne brukes også i asymmetri. Kuznetsov og Fofanov (1970) påpeker at Borie (1967) har gjort en feil, slik at resultatene bare gjelder for symmetrisk Laue geometri. Kuznetsov og Fofanov retter opp feilen og finner uttrykket for intensiteten ved å bruke differensialligninger. I denne oppgaven er det vist at Darwins rekursjonsligninger da også fører frem til riktige plott av asymmetriske tilfeller. Det er også tatt hensyn til at strukturfaktoren har ulik verdi om røntgenbølgene treffer “fremtiden” eller “baksiden” av planene. Det er ikke funnet publiserte plott for asymmetrisk Laue geometri, men to andre upubliserte programmer basert på Takagi teorien og fundamentalteorien gir tilsvarende plott som programmet basert på Darwins teori.

Det er ulike måter å tegne figurene på i asymmetrisk geometri. Spreaderne postuleres å eksistere i skjæringspunktene mellom Bragg plan og fiktive plan. En kan da tenke seg at spreaderne ligger på linjer normalt på overflaten

eller normalt på Bragg planet. I denne oppgaven er det første alternativet valgt (figur 4.2 og figur 4.3). En aktuell videreføring kan være å finne en fysisk tolkning på valg av geometri og sett hvordan ulike geometrier påvirker matematikken.

Fasefaktorene i avsnitt 4.2 er funnet ved å se på veiforskjellen til transmittert og reflektert bølge langs et Bragg plan. Et annet alternativ er å finne fasefaktorene langs en normal til overflaten. En videre fordypning i dette fagfeltet kan gi en begrunnelse, både fysisk og matematisk, på at dette valget vil være det samme.

Det har vært en utfordring å få en grundig forståelse av hvilken betydning avstanden mellom Bragg planene har. Ved å bruke programmene i Mathematica 8.0 for ulike planavstander mellom fiktive plan, finner en at avstanden er irrelevant for både symmetrisk- og asymmetrisk Laue geometri. Det er tykkelsen av krystallen som er den avgjørende parameteren. En videreføring av denne oppgaven kan være å vise matematisk at avstanden mellom de fiktive planene er ubetydelig og få en god fysisk tolkning på denne problemstillingen. Ved å bruke rekkeutvikling til laveste orden, bør det være mulig å uttrykke ligning (4.28) og (4.29) tilsvarende resultatene til Authier (2001) på side 167. Dette hadde vært spennende og arbeidet mer med.

Kuznetsov og Fofanov (1970) løser rekursjonsligningene som differensialligninger. Dette kan også være en interessant videreføring, der en prøver å finne en måte å transformere rekursjonsligningene til Takagi-teoriens differensialligninger. Det kan også være spennende å utforske hvordan programmene i Mathematica 8.0 takler at krystallene ikke er høysymmetriske og utvikle programvaren ytterligere.

Tillegg A

Detaljer i *Mathematica* 8.0 for symmetrisk Laue geometri

```
SetDirectory[
  "C:\\Users\\Jofrid & Gisle\\Documents\\Jofrid\\Masteroppgave\\Skrivearbeid latex"]
C:\\Users\\Jofrid & Gisle\\Documents\\Jofrid\\Masteroppgave\\Skrivearbeid latex
AppendTo[$Path, "C:\\M8p0\\X-ray-diffraction\\Packages"];
Get["sfcalc.m"];
data.m
sfcalc.m
compound
silicon
lambda = 1.0;      (* Bølgelengde *)
```

Transmittert bølge

Lager en modul som regner ut den transmitterte bølgen. $\delta\theta$ setter avviket fra Bragg vinkelen med enhet $\frac{1^\circ}{1000}$, $h1$ er en liste som sette (hkl) verdiene til planene som sprer, $thick$ gir tykkelsen til krystallen med enhet [μm] og de to siste parameterene er valgvariabler. Dersom $pflag$ gis verdien 1 settes polarisasjonsfaktoren til å være lik $\cos(2\theta)$, dersom $pflag$ settes lik 2 blir polarisasjonsfaktoren lik 1. En kan velge at det ikke er absorpsjon i krystallen ved å sette $absorpt$ lik 1, settes den lik 2 vil det bli regnet med absorpsjon.

```

Ts[deltaθ_, h1_List, thick_, wave_, pflag_, absorpt_] :=
Module[{λ, t, Δθ, θB, Cf, re, d, s, Fh, Fh0, Frh, Frh0, Fih, Fih0, v,
  g, g0, x1, x2, u, Δφ, φ, transmitted, transconjugate, intensity},
  lambda = wave;
  λ = lambda;
  t = thick;

  Δθ = deltaθ * 2 π  $\frac{1}{1000 * 360}$ ;
  θB = theta[h1, lambda];
  Cf = If[pflag == 1, Cos[2 * θB], 1];
  re = 2.8179 * 10-5;
  d = dhkl[h1];
  s = (t * 10 000) / d;
  Fh = sf[h1][[1]];
  Fh0 = sf[{0, 0, 0}][[1]];
  Frh = Re[sf[h1][[3]]];
  Frh0 = Re[sf[{0, 0, 0}][[3]]];
  Fih = Im[sf[h1][[3]]];
  Fih0 = Im[sf[{0, 0, 0}][[3]]];
  v =  $\sqrt{\text{Det}[gmatrix]}$ ;

  g = If[absorpt == 1, - $\frac{\lambda d re Cf}{v \text{Cos}[\theta B]} Fh$ , - $\left(\frac{\lambda d re Cf}{v \text{Cos}[\theta B]}\right) (Frh + i Fih)$ ];

  (* Ligning (3.7) og (3.32) *)
  g0 = If[absorpt == 1, - $\frac{\lambda d re}{v \text{Cos}[\theta B]} Fh0$ , - $\left(\frac{\lambda d re}{v \text{Cos}[\theta B]}\right) (Frh0 + i Fih0)$ ];

  x1[Δθ_] :=  $e^{-i \phi[\Delta\theta]} ((1 - i g0) \text{Cos}[\Delta\phi[\Delta\theta]] + i u[\Delta\theta])$ ; (* Ligning (3.15a) *)
  x2[Δθ_] :=  $e^{-i \phi[\Delta\theta]} ((1 - i g0) \text{Cos}[\Delta\phi[\Delta\theta]] - i u[\Delta\theta])$ ; (* Ligning (3.15b) *)
  u[Δθ_] :=  $\sqrt{g^2 + ((1 - i g0) \text{Sin}[\Delta\phi[\Delta\theta]])^2}$ ; (* Ligning (3.16) *)
  φ[Δθ_] :=  $2 \pi \frac{d}{\lambda} (\text{Cos}[\theta B] \text{Cos}[\Delta\theta])$ ;
  (* Ligning (3.31a) *)
  Δφ[Δθ_] :=  $-2 \pi \frac{d}{\lambda} (\text{Sin}[\theta B] \text{Sin}[\Delta\theta])$ ;
  (* Ligning (3.31b) *)
  transmitted[t_, Δθ_] :=
 $\frac{1}{2} \left( \left( 1 - \frac{(1 - i g0) \text{Sin}[\Delta\phi[\Delta\theta]]}{u[\Delta\theta]} \right) (x1[\Delta\theta])^s + \left( 1 + \frac{(1 - i g0) \text{Sin}[\Delta\phi[\Delta\theta]]}{u[\Delta\theta]} \right) (x2[\Delta\theta])^s \right)$ ;
  (* Ligning (3.21) *)
  transconjugate[t_, Δθ_] := Conjugate[transmitted[t, Δθ]];
  intensity[t_, Δθ_] := transmitted[t, Δθ] * transconjugate[t, Δθ];
  intensity[t, Δθ]

```

Reflektert bølge

Lager en modul som regner ut den reflekterte bølgen. De innkommende parameterne er like som for den transmitterte bølgen.

```

Ss[deltaθ_, h1_List, thick_, wave_, pflag_, absorpt_] :=
Module[{λ, t, Δθ, θB, Cf, re, d, s, Fh, Fh0, Frh, Frh0, Fih, Fih0,
v, g, g0, x1, x2, u, Δφ, φ, scattered, scattconjugate, intensity},
lambda = wave;
λ = lambda;
t = thick;

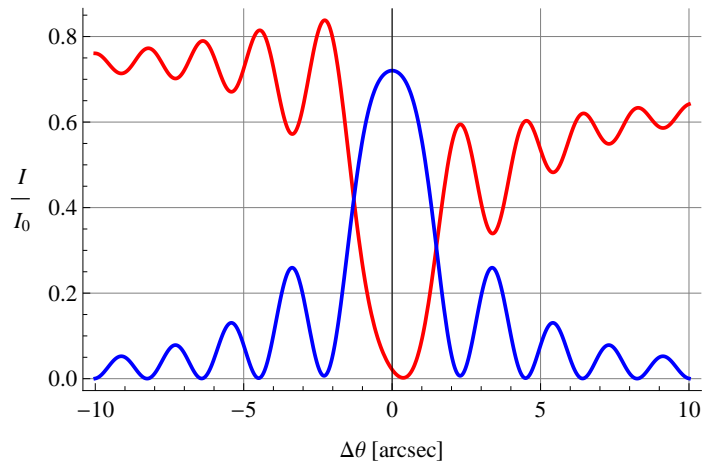
Δθ = deltaθ * 2 π  $\frac{1}{1000 * 360}$ ;
θB = theta[h1, lambda];
Cf = If[pflag == 1, Cos[2 * θB], 1];
re = 2.8179 * 10-5;
d = dhkl[h1];
s = (t * 10 000) / d;
Fh = sf[h1][[1]];
Fh0 = sf[{0, 0, 0}][[1]];
Frh = Re[sf[h1][[3]]];
Frh0 = Re[sf[{0, 0, 0}][[3]]];
Fih = Im[sf[h1][[3]]];
Fih0 = Im[sf[{0, 0, 0}][[3]]];
v =  $\sqrt{\text{Det}[\text{gmatrix}]}$ ;

g = If[absorpt == 1, - $\frac{\lambda d re Cf}{v \text{Cos}[\theta B]} Fh$ , - $\left(\frac{\lambda d re Cf}{v \text{Cos}[\theta B]}\right) (Frh + i Fih)$ ];
(* Ligning (3.7) og (3.32) *)
g0 = If[absorpt == 1, - $\frac{\lambda d re}{v \text{Cos}[\theta B]} Fh0$ , - $\left(\frac{\lambda d re}{v \text{Cos}[\theta B]}\right) (Frh0 + i Fih0)$ ];
x1[Δθ_] := e-i φ[Δθ] ((1 - i g0) Cos[Δφ[Δθ]] + i u[Δθ]);
(* Ligning (3.15a) *)
x2[Δθ_] := e-i φ[Δθ] ((1 - i g0) Cos[Δφ[Δθ]] - i u[Δθ]);
(* Ligning (3.15b) *)
u[Δθ_] :=  $\sqrt{g^2 + ((1 - i g0) \text{Sin}[\Delta\phi[\Delta\theta]])^2}$ ; (* Ligning (3.16) *)
Δφ[Δθ_] := -2 π  $\frac{d}{\lambda} (\text{Sin}[\theta B] \text{Sin}[\Delta\theta])$ ; (* Ligning (3.31a) *)
φ[Δθ_] := 2 π  $\frac{d}{\lambda} (\text{Cos}[\theta B] \text{Cos}[\Delta\theta])$ ; (* Ligning (3.31b) *)
scattered[t_, Δθ_] := - $\frac{g}{2 u[\Delta\theta]} ((x1[\Delta\theta])^s - (x2[\Delta\theta])^s) e^{i \phi[\Delta\theta]}$ ;
(* Ligning (3.22) *)
scattconjugate[t_, Δθ_] := Conjugate[scattered[t, Δθ]];
intensity[t_, Δθ_] := scattered[t, Δθ] * scattconjugate[t, Δθ];
intensity[t, Δθ]

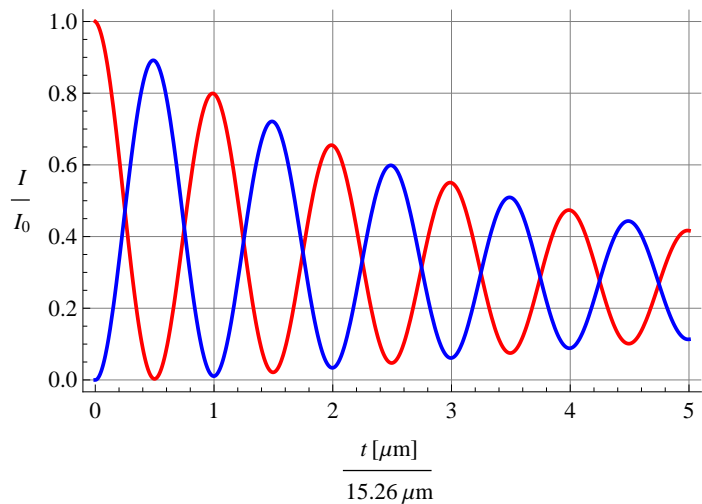
```

Plott for ulike situasjoner

```
Plot[ {Re[Ts[Δθ / 3.6, {2, 2, 0}, 15.26 * 1.5, 1.5418, 2, 2]],
  Re[Ss[Δθ / 3.6, {2, 2, 0}, 15.26 * 1.5, 1.5418, 2, 2]]}, {Δθ, -10, 10},
PlotStyle -> {{Red, Thickness[0.006]}, {Blue, Thickness[0.006]}},
Frame -> {{True, False}, {True, False}}, Axes -> True, AxesOrigin -> {0, 0},
GridLines -> {{-5, 0, 5, 10}, {0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0}},
BaseStyle -> FontSize -> 12, AxesStyle -> {10, 1}, PlotRange -> All,
FrameLabel -> {"Δθ [arcsec]", " $\frac{I}{I_0}$ "}, RotateLabel -> False]
```



```
Plot[ {Re[Ts[0, {2, 2, 0}, t * 15.26, 1.5418, 2, 2]],
  Re[Ss[0, {2, 2, 0}, t * 15.26, 1.5418, 2, 2]]}, {t, 0, 5},
PlotStyle -> {{Red, Thickness[0.006]}, {Blue, Thickness[0.006]}},
Frame -> {{True, False}, {True, False}}, Axes -> True,
GridLines -> {{1, 2, 3, 4, 5}, {0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1}},
BaseStyle -> FontSize -> 12, (*PlotLabel->"Transmittert Intensitet",*)
PlotRange -> All, FrameLabel -> {" $\frac{t [\mu\text{m}]}{15.26 \mu\text{m}}$ ", " $\frac{I}{I_0}$ "}, RotateLabel -> False]
```



Tillegg B

Detaljer i *Mathematica* 8.0 for asymmetrisk Laue geometri

```
SetDirectory[
  "C:\\Users\\Jofrid & Gisle\\Documents\\Jofrid\\Masteroppgave\\Skrivearbeid latex"]
C:\\Users\\Jofrid & Gisle\\Documents\\Jofrid\\Masteroppgave\\Skrivearbeid latex
AppendTo[$Path, "C:\\M8p0\\X-ray-diffraction\\Packages"];
Get["sfcalc.m"];
data.m
sfcalc.m
compound
silicon
lambda = 1.0;      (* Bølgelengde *)
```

Transmittert bølge

Lager en modul som regner ut den transmitterte bølgen.

- $\delta\theta$ setter avviket fra Bragg vinkelen med enhet $\left(\frac{1^\circ}{1000}\right)$
- α er vinkelen mellom planene som sprer og overflaten med enhet grader
- $h1$ er en liste som sette (hkl) verdiene til planene som sprer
- $thick$ gir tykkelsen til krystallen med enhet $[\mu\text{m}]$

De to siste parameterene er valgvariabler

- dersom *pflag* gis verdien 1 settes polarisasjonsfaktoren til å være lik $\cos(2\theta)$, dersom *pflag* settes lik 2 blir polarisasjonsfaktoren lik 1.

- en kan velge at det ikke er absorpsjon i krystallen ved å sette *absorpt* lik 1, settes den lik 2 vil det bli regnet med absorpsjon.

```
Ts[deltaθ_, alpha_, h1_List, thick_, wave_, pflag_, absorpt_] :=
Module[{λ, α, t, Δθ, θB, θ1, θ2, Cf, re, d, s, Fh, FhB, Fh0,
Frh, FrhB, Frh0, Fih, FihB, Fih0, v, g1, g2, g01, g02, G, ΔG, x1,
x2, u, Δφt, Δφs, φ, transmitted, transconjugate, intensity},
lambda = wave;
λ = lambda;
α =  $\frac{2\pi}{360}$  alpha;
t = thick;
Δθ = deltaθ * 2 π  $\frac{1}{1000 * 360}$ ;
θB = theta[h1, lambda];
Cf = If[pflag == 1, Cos[2 * θB], 1];
re = 2.8179 * 10-5;
d = dhkl[h1];
s = (t * 10 000 * Cos[α]) / d;
Fh = sf[h1][[1]];
FhB = sf[-h1][[1]];
Fh0 = sf[{0, 0, 0}][[1]];
Frh = Re[sf[h1][[3]]];
FrhB = Re[sf[-h1][[3]]];
Frh0 = Re[sf[{0, 0, 0}][[3]]];
Fih = Im[sf[h1][[3]]];
FihB = Im[sf[-h1][[3]]];
Fih0 = Im[sf[{0, 0, 0}][[3]]];
v =  $\sqrt{\text{Det}[gmatrix]}$ ;
θ1[Δθ_] := α - θB - Δθ; (* Ligning (4.9a) *)
θ2[Δθ_] := α + θB -  $\frac{\text{Sin}[\alpha - \theta B] \Delta \theta}{\text{Sin}[\alpha + \theta B]}$ ; (* Ligning (4.9b) *)
g1[Δθ_] := If[absorpt == 1, -  $\frac{\lambda d re Cf}{v \text{Sin}[\theta 1[\Delta \theta]] \text{Cos}[\alpha]}$  FhB,
-  $\left(\frac{\lambda d re Cf}{v \text{Sin}[\theta 1[\Delta \theta]] \text{Cos}[\alpha]}\right) (FrhB + i FihB)$ ]; (* Ligning (4.7) *)
g2[Δθ_] := If[absorpt == 1, -  $\frac{\lambda d re Cf}{v \text{Sin}[\theta 2[\Delta \theta]] \text{Cos}[\alpha]}$  Fh,
-  $\left(\frac{\lambda d re Cf}{v \text{Sin}[\theta 2[\Delta \theta]] \text{Cos}[\alpha]}\right) (Frh + i Fih)$ ]; (* Ligning (4.6) *)
g01[Δθ_] := If[absorpt == 1, -  $\frac{\lambda d re}{v \text{Sin}[\theta 1[\Delta \theta]] \text{Cos}[\alpha]}$  Fh0,
-  $\left(\frac{\lambda d re}{v \text{Sin}[\theta 1[\Delta \theta]] \text{Cos}[\alpha]}\right) (Frh0 + i Fih0)$ ];
g02[Δθ_] := If[absorpt == 1, -  $\frac{\lambda d re}{v \text{Sin}[\theta 2[\Delta \theta]] \text{Cos}[\alpha]}$  Fh0,
```

```

- ( (frac{lambda d re}{v Sin[theta[DeltaTheta]] Cos[alpha]}) (Frh0 + i Fih0) );
G[DeltaTheta_] := (frac{1}{2} ((1 - i g01[DeltaTheta]) e^{-i DeltaPhi t[DeltaTheta]} + (1 - i g02[DeltaTheta]) e^{-i DeltaPhi s[DeltaTheta]}));
(* Ligning (4.20) *)
DeltaG[DeltaTheta_] := (frac{1}{2} ((1 - i g01[DeltaTheta]) e^{-i DeltaPhi t[DeltaTheta]} - (1 - i g02[DeltaTheta]) e^{-i DeltaPhi s[DeltaTheta]}));
(* Ligning (4.21) *)
x1[DeltaTheta_] := e^{-i phi} (G[DeltaTheta] + i u[DeltaTheta]);
(* Ligning (4.18a) *)
x2[DeltaTheta_] := e^{-i phi} (G[DeltaTheta] - i u[DeltaTheta]);
(* Ligning (4.18b) *)
u[DeltaTheta_] := sqrt((g1[DeltaTheta] g2[DeltaTheta] e^{-i (DeltaPhi t[DeltaTheta] + DeltaPhi s[DeltaTheta])} - (DeltaG[DeltaTheta])^2);
(* Ligning (4.19) *)
DeltaPhi t[DeltaTheta_] := - 2 pi (frac{d Sin[thetaB] DeltaTheta}{lambda Cos[alpha] Sin[alpha]});
(* Ligning (4.17a) *)
DeltaPhi s[DeltaTheta_] := 2 pi (frac{d Sin[thetaB] Sin[alpha - thetaB] DeltaTheta}{lambda Cos[alpha] Sin[alpha] Sin[alpha + thetaB]});
(* Ligning (4.17b) *)
phi = 2 pi (frac{d Cos[thetaB]}{lambda Cos[alpha] Sin[alpha]});
(* Ligning (4.16) *)
transmitted[t_, DeltaTheta_] :=
frac{1}{2} ((1 - i (frac{DeltaG[DeltaTheta]}{u[DeltaTheta]})) (x1[DeltaTheta])^s + (1 + i (frac{DeltaG[DeltaTheta]}{u[DeltaTheta]})) (x2[DeltaTheta])^s);
(* Ligning (4.27) *)
transconjugate[t_, DeltaTheta_] := Conjugate[transmitted[t, DeltaTheta]];
intensity[t_, DeltaTheta_] := transmitted[t, DeltaTheta] * transconjugate[t, DeltaTheta];
intensity[t, DeltaTheta]

```

Reflektert bølge

Lager en modul som regner ut den reflekterte bølgen. De innkommende parameterne er like som for den transmitterte bølgen.

```

Ss[deltaTheta_, alpha_, h1_List, thick_, wave_, pflag_, absorpt_] :=
Module[{lambda, alpha, t, DeltaTheta, thetaB, theta1, theta2, Cf, re, d, s, Fh, FhB, Fh0,
Frh, FrhB, Frh0, Fih, FihB, Fih0, v, g1, g2, g01, g02, G, DeltaG, x1,
x2, u, DeltaPhi t, DeltaPhi s, phi, scattered, scattconjugate, intensity},
lambda = wave;
lambda = lambda;
alpha = (frac{2 pi}{360}) alpha;
t = thick;
DeltaTheta = deltaTheta * 2 pi (frac{1}{1000 * 360});
thetaB = theta[h1, lambda];
Cf = If[pflag == 1, Cos[2 * thetaB], 1];

```

```

re = 2.8179 * 10-5;
d = dhkl[h1];
s =  $\frac{(t * 10\,000 * \text{Cos}[\alpha])}{d}$ ;
Fh = sf[h1][[1]];
FhB = sf[-h1][[1]];
Fh0 = sf[{0, 0, 0}][[1]];
Frh = Re[sf[h1][[3]]];
FrhB = Re[sf[-h1][[3]]];
Frh0 = Re[sf[{0, 0, 0}][[3]]];
Fih = Im[sf[h1][[3]]];
FihB = Im[sf[-h1][[3]]];
Fih0 = Im[sf[{0, 0, 0}][[3]]];
v =  $\sqrt{\text{Det}[\text{gmatrix}]}$ ;
 $\theta1[\Delta\theta_] := \alpha - \theta B - \Delta\theta;$  (* Ligning (4.9a) *)
 $\theta2[\Delta\theta_] := \alpha + \theta B - \frac{\text{Sin}[\alpha - \theta B] \Delta\theta}{\text{Sin}[\alpha + \theta B]}$ ; (* Ligning (4.9b) *)

g1[\Delta\theta_] := If[absorpt == 1,  $-\frac{\lambda d \text{re Cf}}{v \text{Sin}[\theta1[\Delta\theta]] \text{Cos}[\alpha]} \text{FhB},$ 
-  $\left(\frac{\lambda d \text{re Cf}}{v \text{Sin}[\theta1[\Delta\theta]] \text{Cos}[\alpha]}\right) (\text{FrhB} + i \text{FihB})$ ]; (* Ligning (4.7) *)

g2[\Delta\theta_] := If[absorpt == 1,  $-\frac{\lambda d \text{re Cf}}{v \text{Sin}[\theta2[\Delta\theta]] \text{Cos}[\alpha]} \text{Fh},$ 
-  $\left(\frac{\lambda d \text{re Cf}}{v \text{Sin}[\theta2[\Delta\theta]] \text{Cos}[\alpha]}\right) (\text{Frh} + i \text{Fih})$ ]; (* Ligning (4.6) *)

g01[\Delta\theta_] := If[absorpt == 1,  $-\frac{\lambda d \text{re}}{v \text{Sin}[\theta1[\Delta\theta]] \text{Cos}[\alpha]} \text{Fh0},$ 
-  $\left(\frac{\lambda d \text{re}}{v \text{Sin}[\theta1[\Delta\theta]] \text{Cos}[\alpha]}\right) (\text{Frh0} + i \text{Fih0})$ ];

g02[\Delta\theta_] := If[absorpt == 1,  $-\frac{\lambda d \text{re}}{v \text{Sin}[\theta2[\Delta\theta]] \text{Cos}[\alpha]} \text{Fh0},$ 
-  $\left(\frac{\lambda d \text{re}}{v \text{Sin}[\theta2[\Delta\theta]] \text{Cos}[\alpha]}\right) (\text{Frh0} + i \text{Fih0})$ ];

G[\Delta\theta_] :=  $\frac{1}{2} ((1 - i g01[\Delta\theta]) e^{-i \Delta\phi t[\Delta\theta]} + (1 - i g02[\Delta\theta]) e^{-i \Delta\phi s[\Delta\theta]})$ ;
(* Ligning (4.20) *)

 $\Delta G[\Delta\theta_] := \frac{1}{2} ((1 - i g01[\Delta\theta]) e^{-i \Delta\phi t[\Delta\theta]} - (1 - i g02[\Delta\theta]) e^{-i \Delta\phi s[\Delta\theta]})$ ;
(* Ligning (4.21) *)

x1[\Delta\theta_] :=  $e^{-i \phi} (G[\Delta\theta] + i u[\Delta\theta])$ ;
(* Ligning (4.18a) *)

x2[\Delta\theta_] :=  $e^{-i \phi} (G[\Delta\theta] - i u[\Delta\theta])$ ;
(* Ligning (4.18b) *)

u[\Delta\theta_] :=  $\sqrt{(g1[\Delta\theta] g2[\Delta\theta] e^{-i (\Delta\phi t[\Delta\theta] + \Delta\phi s[\Delta\theta])} - (\Delta G[\Delta\theta])^2)}$ ;
(* Ligning (4.19) *)

 $\Delta\phi t[\Delta\theta_] := -2 \pi \frac{d \text{Sin}[\theta B] \Delta\theta}{\lambda \text{Cos}[\alpha] \text{Sin}[\alpha]}$ ;
(* Ligning (4.17a) *)

```


$$\Delta\phi_s[\Delta\theta_] := 2\pi \frac{d \sin[\theta B] \sin[\alpha - \theta B] \Delta\theta}{\lambda \cos[\alpha] \sin[\alpha] \sin[\alpha + \theta B]};$$

(* Ligning (4.17b) *)

$$\phi = 2\pi \frac{d \cos[\theta B]}{\lambda \cos[\alpha] \sin[\alpha]};$$

(* Ligning (4.16) *)

$$\text{scattered}[t_, \Delta\theta_] := -\frac{g2[\Delta\theta]}{2u[\Delta\theta]} ((x1[\Delta\theta])^s - (x2[\Delta\theta])^s) e^{i\phi};$$

(* Ligning (4.29) *)

$$\text{scattconjugate}[t_, \Delta\theta_] := \text{Conjugate}[\text{scattered}[t, \Delta\theta]]; \\ \text{intensity}[t_, \Delta\theta_] := \text{scattered}[t, \Delta\theta] * \text{scattconjugate}[t, \Delta\theta]; \\ \text{Abs}\left[\frac{\sin[\alpha + \theta B]}{\sin[\alpha - \theta B]}\right] * \text{intensity}[t, \Delta\theta]$$

Avvik fra Bragg vinkelen

Modul som beregner avviket fra Bragg vinkelen. Input verdiene er asymmetrivinkelen *alpha* med enhet grader, en liste av (*hkl*) verdier til Bragg planene og bølgelengden med enhet Å.

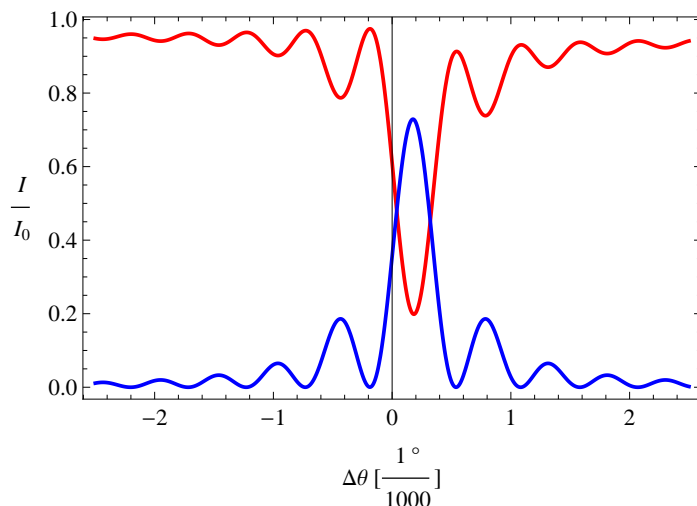
```

DeltaThetaS[alpha_, h1_List, wave_] := Module[{alpha, lambda, re, theta, v, Frh0, Fih0, gamma, avvik},
  lambda = wave;
  lambda = lambda;
  alpha = (2 pi / 360) alpha;
  theta = theta[h1, lambda];
  re = 2.8179 * 10^-5;
  Frh0 = Re[sf[{0, 0, 0}][[3]]];
  Fih0 = Im[sf[{0, 0, 0}][[3]]];
  v = Sqrt[Det[gmatrix]];
  gamma = (Sin[alpha + theta] / Sin[alpha - theta]);
  avvik = (re lambda^2 Frh0 (1 - gamma) / (2 pi v Sin[2 * theta])); (* Ligning (4.30) *)
  avvik * (360 * 1000 / (2 pi))]

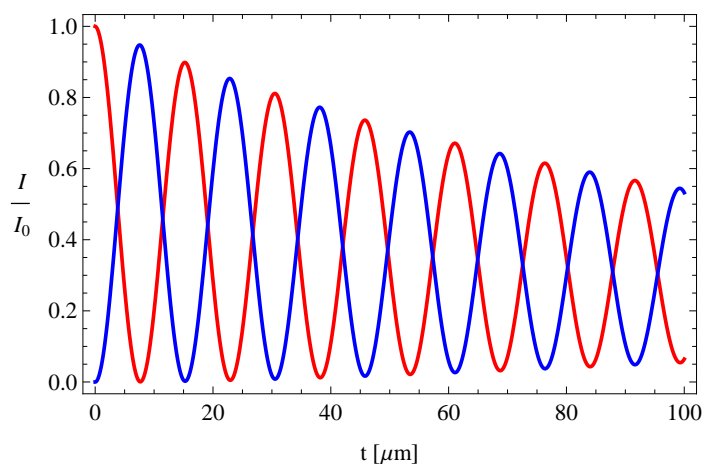
```

Plott for ulike situasjoner

```
Plot[{{Re[Ts[Δθ, 140, {2, 2, 0}, 10.0, lambda, 2, 2]]},
      {Re[Ss[Δθ, 140, {2, 2, 0}, 10.0, lambda, 2, 2]]}}, {Δθ, -2.5, 2.5},
PlotStyle → {{Red, Thickness[0.006]}, {Blue, Thickness[0.006]}},
Frame → True, Axes → True, BaseStyle → FontSize → 12, PlotRange → All,
FrameLabel → {"Δθ [ $\frac{1^\circ}{1000}$ ]", " $\frac{I}{I_0}$ "}, RotateLabel → False]
```



```
Plot[{{Re[Ts[Δθos[140, {2, 2, 0}, lambda], 140, {2, 2, 0}, t, lambda, 2, 2]]},
      {Re[Ss[Δθos[140, {2, 2, 0}, lambda], 140, {2, 2, 0}, t, lambda, 2, 2]]}},
{t, 0, 100}, PlotStyle → {{Red, Thickness[0.006]}, {Blue, Thickness[0.006]}},
Frame → True, Axes → True, BaseStyle → FontSize → 12,
PlotRange → All, FrameLabel → {"t [ $\mu\text{m}$ ]", " $\frac{I}{I_0}$ "}, RotateLabel → False]
```



Referanser

- Authier, A. (2001). *Dynamical theory of x-ray diffraction*. Oxford University Press.
- Authier, A. (2006). Volum B, Kapittel 5.1 Dynamical theory of X-ray diffraction, ss. 534–551. International Union of Chrystallography.
- Azáróff, L. V. (1968). *Elements of X-ray Crystallography*. USA: McGraw-Hill, Inc.
- Borie, B. (1966). *Acta Crystallographica* **21**, 470–472.
- Borie, B. (1967). *Acta Crystallographica* **23**, 210–216.
- 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 og 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.

- Grimaldi, R. P. (2004). *Discrete and Combinatorial Mathematics*. Pearson Education, Inc.
- Hammond, C. (2009). *The Basics of Crystallography and Diffraction*. New York: Oxford University Press.
- Hirsch, P. B., Howie, A., Nicholson, R. B., Pashley, D. W. & Wheland, M. J. (1965). Kapitel 8, s. 196. London: Butterworth and Co, Ltd.
- Howie, A. & Wheland, M. J. (1961). *Proceedings of the Royal Society of London* **263**, 217–237.
- James, R. W. (1962). *The Optical Principles of the Diffraction of X-rays*. London: G. Bell and Sons LTD.
- Jens Als-Nielsen, D. M. (2001). *Modern X-ray Physics*. John Wiley and Sons, Ltd.
- Kaplan, W. (1959). *Advanced Calculus*. Reading, Massachusetts, USA: Addison-Wesley Publishing Company, Inc, 5. utgave.
- Kato, N. (1963). *Acta Crystallographica* **16**, 276–281.
- Kuznetsov, A. V. & Fofanov, A. D. (1970). *Russian Physics Journal* **13**, 1269–1274. 10.1007/BF00816875.
- Laue von, M. (1912). *Sitzungsberichte der Kgl. Bayer. Akad.* **41**, 363–373.
- Laue von, M. (1931). *Ergebnisse der exacten Naturwissenschaften* **10**, 133–158.
- Takagi, S. (1962). *Acta Crystallographica* **15**, 1311–1312.
- Takagi, S. (1969). *The Physical Society of Japan* **26**, 1239–53.
- Tilley, R. (2007). ss. 122–124. 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 Perfect crystal theory, ss. 315–357. New York: Dover Publications, Inc.

Symboloversikt

a'	Avstand mellom naboatom i fiktive plan
a, b, c	Absoluttverdien av basisvektorene i det reelle rom
$\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$	Basisvektorer som definerer en enhetscelle i det reelle rom
$\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$	Basisvektorer i det resiproke rom
A_h	Det totale bidraget fra den reflekterte strålingen
A_i	Innkommende kulebølge
$A_r^{(s)}$	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
\tilde{A}_0	Amplitude med dimensjon lik den elektromagnetiske bølgen multiplisert med en lengdeenhet
b	Dempningsfaktor for absorpsjon i planene
B_1, B_2	Konstanter i generell løsning for rekursjonsligninger
\mathbf{B}	Magnetisk flukstetthet
c	Massehastighet i vakuum
C	Polarisasjonsfaktor lik 1 eller $\cos 2\theta_B$
d_{hkl}	Avstanden mellom to nabo Bragg plan
d'	Avstand mellom to fiktive naboplan
d''	Avstand mellom to naboatom i Bragg plan
\mathbf{D}	Forskyvningsfelt

e	Elektronladning
E_0	Absolutttverdien av feltretningen
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_h	Strukturfaktor
F'_h, F''_h	Real og imaginær del av strukturfaktoren
$F(\mathbf{K})$	Systemets spredningsamplitude
g	Refleksjonskoeffisient for Laue geometri
g_0	Transmisjonskoeffisient for Laue geometri
g', g''	Real og imaginær del av refleksjonskoeffisienten for Laue geometri
g'_0, g''_0	Real og imaginær del av transmisjonskoeffisienten for Laue geometri
g_j	Oscillatorstyrke
G	Variabel for å forenkle uttrykkene
ΔG	Variabel for å forenkle uttrykkene. $\Delta G = 0$ vil gi midtpunktet i refleksområdet
\mathbf{h}	Resiprok gittervektor
$h k l$	Gitterpunkt i det reelle rom. Aksene h, k og l ligger parallelt med basisvektorene i det resiproke rom
(hkl)	Planskare i det reelle rom
H	Resiprokt gitterpunkt
I_0	Intensitet til innkommende bølge, slik at $T_0^2 = I_0$
I_h	Intensitet til totalt spredt stråling
$I(\mathbf{K})$	Intensitet til spredt stråling
I_s	Tenkt strålekilde for den reflekterte bølgen fra plan nummer s
I_S	Total intensitet til reflektert bølge
I_T	Total intensitet til transmittert bølge
j	Totalt antall plan

$k = \mathbf{k} $	Bølgetallet i vakuum, $k = \frac{1}{\lambda}$
$\mathbf{k}, \mathbf{k}_h, \mathbf{k}_o$	Bølgevektor til bølgefelt, med indeks \mathbf{h} for reflektert og \mathbf{o} for innkommende bølge
K	Kildepunktet for stråling
K_0	Symmetripunktet til K om x -aksen
\mathbf{K}	Spredningsvektor
l_0	Veilengde gjennom krystallen
m	Vilkårlig heltall
m_e	Elektronets masse
n	Brytningsindeks
n	Vilkårlig heltall i Braggs lov
\hat{n}	Enhetsvektor langs feltretningen
n_1, n_2, n_3	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
$p(t)$	Elektrisk dipolmoment
\mathbf{p}	Atomets dipolmoment
P	Observasjonspunkt
P_0	Symmetripunktet til P om x -aksen
\mathbf{P}	Elektrisk polarisasjon
q	Refleksjonskoeffisient for Bragg geometri
q_0	Transmisjonskoeffisient for Bragg geometri
Q	Vilkårlig punkt i planet
\mathbf{r}	Posisjonsvektor i det reelle rom
\mathbf{r}_n	Atomets/elektronets posisjon i enhetscellen
r_e	Klassisk elektronradius
$r_{\xi\eta}$	Avstand fra et vilkårlig punkt i planet til et observasjonspunkt
R	Avstand
$R_{\xi\eta}$	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 bølgeene
S_s	Amplitude og fase like etter plan s

T_s	Amplitude og fase like før plan s
t	Tid
t	Total tykkelse av krystallen, produktet $aj = t$
T	Periode
\mathbf{T}	Translasjonsvektor i det reelle rom
u	Variabel for å forenkle uttrykkene
V_c	Volum i en enhetscelle
x_1, x_2	Røtter i andregradsligning
Z	Atomnummer
α	Vinkel mellom Bragg plan og krystaloverflaten
$\alpha_{\mathbf{o}}, \alpha_{\mathbf{h}}$	Vinkelen den innkommende (indeks \mathbf{o}) og reflekterte (indeks \mathbf{h}) bølgen danner med aksene n_1
$\beta_{\mathbf{o}}, \beta_{\mathbf{h}}$	Vinkelen den innkommende (indeks \mathbf{o}) og reflekterte (indeks \mathbf{h}) bølgen danner med aksene n_2
$\gamma_{\mathbf{o}}$	Sinus av vinkelen mellom den transmitterte bølgen og fiktivt plan
$\gamma_{\mathbf{h}}$	Sinus av vinkelen mellom den reflekterte bølgen og fiktivt plan
$\gamma_{\mathbf{o}}, \gamma_{\mathbf{h}}$	Vinkelen den innkommende (indeks \mathbf{o}) og reflekterte (indeks \mathbf{h}) bølgen danner med aksene n_2
γ_0	“Dempningskraft” er innkodet i denne parameteren
ϵ_0	Permittiviteten i vakuum
η	Vilkårlig y -koordinat
θ_B	Bragg vinkelen
θ_s	Vinkel mellom reflektert stråle fra plan nummer s og aktuelt plan
θ_S	Vinkel mellom reflektert bølge og Bragg plan
θ_T	Vinkel mellom transmittert bølge og Bragg plan
$\Delta\theta$	Avvik fra Bragg vinkelen
2θ	Spredningsvinkelen, vinkel mellom transmittert stråle og reflektert stråle
θ_0	Reell vinkel mellom innkommende bølge og Bragg planene
θ_1	Vinkel mellom transmittert bølge og fiktivt plan
θ_2	Vinkel mellom reflektert bølge og fiktivt plan

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
$\rho_n^{(a)}$	Elektrontettheten assosiert med atom nummer n
$\rho(\mathbf{r})$	Elektrontetthet
v	Spredningsvolum til en krystall
v	Lysets hastighet i mediet
ϕ	Hovedleddet i ϕ_T og ϕ_S
ϕ_T	Argument som angir faseforskyvning assosiert med veiforskjell til transmitterte bølger
ϕ_S	Argument som angir faseforskyvning assosiert med veiforskjell til reflekterte bølger
$\Delta\phi$	Avvik fra ϕ_T og ϕ_S
χ_e	Dielektrisk susceptibilitet
χ_0	Middlet dielektrisk susceptibilitet
ψ_h	Vinkel mellom reflektert bølge og normalvektor til krystalloverflaten slik Authier (2001) benytter
ψ_n	Vinkel mellom Bragg plan og normalvektor til krystalloverflaten slik Authier (2001) benytter
ψ_o	Vinkel mellom transmittert bølge og normalvektor til krystalloverflaten slik Authier (2001) benytter
Δ	Veilengde til reflektert bølge mellom to naboplan

Register

- Ångström, 17
- absorpsjon, 43, 44, 46–48, 71, 72, 74, 77, 78, 98, 115
koeffisient, 44, 119
- amplitude, 15, 30, 34, 37, 38, 44, 46, 47, 50, 53
- annengradsligning, 64, 66, 90
- Arsen, 100
- asymmetrisk forhold, 95
- atomformfaktor, 18, 19, 27, 41, 43
korreksjon, 19, 26
ordinær, 19
- atomgitter, 22
- atomplan, 55, 57
- bølge
fase, 20
felt, 34
forplantning, 24
front, 20, 62
lengde, 20, 22, 23, 73, 76
ligning, 28, 34
tall
vakuu, 20, 38
- bølgetall, 45
- bølgevektor, 20, 31, 34
reflektert bølge, 61
spredt bølge, 23
transmittert bølge, 23, 61
- basisvektor, 17
- Borrmann effekt, 77
- Bragg
geometri, 10, 53
lov, 24, 32, 47, 48, 54, 58, 84
plan, 39, 54, 57, 82
skjæring, 58
asymmetri, 84
symmetrisk geometri, 53, 54
teori, 37
vinkel, 23, 48–50, 54, 57, 65, 73, 74, 76, 78, 83, 89
avvik, 55, 57, 85
- brytningsindeks, 28, 45–47
- Darwin, 10, 15, 30, 33, 37, 38, 40, 41, 43, 45, 47, 53, 64, 76, 81, 101
- dempningsfaktor, 43
- dempningskraft, 25
- dielektrisk
medium, 27
susceptibilitet, 16, 27, 28, 34
- diffraksjon, 37
teori, 30
- dipol, 15, 25, 28, 30, 34, 38
moment, 25, 26, 28
- dispersjon, 37
flate, 34
- dynamisk teori, 33
- ekstingsjonslengde, 79
- elastisk spredning, 24
- elektrisk
dipolstråling, 28
felt, 20, 25–29
feltvektor, 41
Hertz vektor, 28
polarisasjon, 26, 27

- elektromagnetisk
 - bølge, 20, 28, 34
 - stråling, 21
- elektromagnetisk teori, 37
- elektron
 - masse, 25
 - radius, 26, 41
- elektrontetthet, 27, 31
 - atom, 18
 - Fourierrekke, 18
 - periodisk, 17
- energibevaring, 33
- enhetscelle, 17
 - elektrontetthet, 17
 - volum, 17, 41
- Ewald, 15, 16, 24, 33, 34
 - kulen, 15, 24
- Ewald - von Laue teori, 16
- fase, 53
 - faktor, 45
 - forskjell, 63
 - ledd, 61, 65, 87, 89
 - motfase, 40
 - skifte, 40
- felt
 - retning, 21
 - vektor, 21
- fiktive plan, 54
- fjærkraft, 25
- foroverspredning, 41
- forskyvningsfelt, 27, 28, 34
- frekvens, 20, 25, 38
- Fresnel integral, 40
- fundamentalteori, 34, 102
- Gallium, 100
- Galliumarsenid, 98, 100
- geometrisk teori, 15, 30
- Germanium, 98, 100
- gitterpunkt, 22
- intensitet, 31, 44, 50, 71–73
 - forhold, 73, 74, 76, 77
 - integrert, 33
 - maksimum, 50
- interferens, 37
 - destruktiv, 40, 55
 - konstruktiv, 22, 23, 37, 58
- karakteristisk
 - likning, 64
 - røtter, 64, 65, 90
- Karbon, 98
- karakteristisk
 - likning, 91
- kinematisk teori, 30, 33
- komplekskonjugert, 50, 71, 72, 74
- krystall
 - høysymmetrisk, 87, 98
 - overflate, 10
 - semiuendelig, 10, 15, 39
 - tykkelse, 54, 73, 74, 76
 - volum, 32
 - volumenhet, 38
- kulebølge, 20, 37, 38, 59
 - innkommende, 38, 41
 - matematiske, 20
 - reflektert, 38, 40, 41
- ladningsfordeling, 25
- lineærkombinasjon, 66, 91
- magnetfelt, 21
- magnetisk flukstetthet, 27
- Maxwells ligninger, 16, 27, 34
- multippel spredning, 33
- multippel spredning, 15, 47, 53
- optisk teori, 37
- oscillatorstyrke, 26
- oscillere, 25
- pendelløsningsavstand, 76

- periode, 20
- permeabilitet, 27
- permittivitet, 26
- plan
 - felles fase, 58, 61
 - skare, 17, 73, 76
- planbølge, 20, 30, 34, 57
 - matematisk, 20
 - reflektert, 46
- polarisasjon, 29
 - av bølge, 21
 - av mediet, 28
- polarisasjonsfaktor, 21, 29, 41, 73–75, 78
- posisjonsvektor, 17
- røntgenstråling, 19, 20, 34, 38, 41
- randbetingelse, 66, 91
- reelle gitterplan, 15, 23, 33
- reelle gitterpunkt, 17
- refleksjonskoeffisient
 - asymmetri, 82, 84
 - størrelsesorden, 42
 - symmetrisk Bragg geometri, 41, 46
 - symmetrisk Laue geometri, 59, 71, 74, 75, 78
- refleksjonsplan, 55
- refraksjonseffekt, 47
- rekkeutvikling, 39, 40, 49, 71
 - Taylorrekke, 48, 49
- rekursjonsligning, 33, 53, 55, 61, 62, 64, 81, 87, 88
 - løsning, 64, 66
 - asymmetri, 88
- resiprok
 - gitter, 15
 - gitterpunkt, 17, 24
 - gittervektor, 18, 24, 34, 41
 - rom, 17, 24
- resultantamplitude, 46
- Silisium, 73, 98
- spredere, 30, 82
 - per arealenhet, 38
 - per volumenhet, 38, 59, 84
- sprednings
 - evne, 19
 - per lengdeenhet, 42
 - geometri, 24
 - lengde, 38, 41, 59
 - plan, 21, 24, 39, 41
 - prosess, 30
 - vektor, 24, 31
 - vinkel, 24
- strukturfaktor, 18, 27, 31, 34, 41, 60, 75, 87
- superposisjonsprinsippet, 66
- Takagi teori, 35, 102
- testløsning, 91
- tostrålesituasjon, 24, 41
- totalrefleksjonsamplitude, 47, 48
- translasjonssymmetri, 17
- translasjonsvektor, 17, 18, 31
- transmisjonskoeffisient, 43
- veilengde, 23, 40, 44, 57, 58, 61, 83, 87
- vekselvirkning, 15, 25, 38, 41
- von Laue, 15, 30, 33
 - asymmetri, 81
 - geometri, 10, 53
 - interferensfunksjon, 31, 32
 - interferensligninger, 22, 57
 - ligninger, 37
 - symmetrisk geometri, 54