

Лекции по курсу

# МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ РЕАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ И СОСТАВА МАТЕРИАЛОВ

Д.ф.-м.н., проф. Э.В.Суворов

## ЛЕКЦИЯ 1

### ВВЕДЕНИЕ В ФИЗИКУ ДИФРАКЦИИ ВВЕДЕНИЕ

Большинство известных в настоящее время экспериментальных методов исследования структуры материалов основано на их взаимодействии с излучениями разной природы и последующим анализом картин рассеяния [1-5]. Условием для получения необходимых сведений о структуре вещества является достаточная величина разрешающей способности метода, которая, как известно, определяется длиной волны применяемого излучения. Поскольку межатомные расстояния в кристаллической решетке составляют величины порядка  $1\text{Å}$ , становится ясно, что необходимые длины волн должны быть меньше этой величины.

Как показывает практика, наиболее подходящими излучениями для целей исследования структуры вещества являются рентгеновское излучение, электроны и нейтроны.

Рентгеновское излучение с длиной волны  $\sim 0.1\div 10\text{Å}$  достаточно легко генерируется и регистрируется обычными способами (фотометод, нульмерные, одномерные или двухмерные детекторы), имеет слабое поглощение. Рассеяние рентгеновских квантов происходит на электронах вещества. Причем следует отметить, что их взаимодействие с электронным газом очень слабое.

Пучки электронов, ускоренные до энергии  $E$ , имеют длину волны

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{12,5}{\sqrt{U}}, \quad (1.1)$$

где  $U$  - ускоряющее напряжение в *вольтах*. Таким образом ускоряющим напряжениям в несколько сотен эв соответствует длина волны де-Бройля порядка  $1\text{Å}$ . Электроны с такими энергиями сильно поглощаются веществом, поэтому для экспериментов приходится использовать либо очень тонкие  $\sim 0.1\text{мкм}$  образцы, либо изучать тонкие приповерхностные слои. Рассеяние электронов происходит на электрических потенциалах, распределенных в пространстве между атомами, и энергия взаимодействия их существенно выше, чем для рентгеновских квантов. Для получения большей проникающей способности применяют ускоряющие напряжения  $\sim 1\text{мэв}$  и выше, что серьезно усложняет экспериментальную технику. Для тяжелых частиц, таких как нейтроны, соответствующие длины волн получаются при значительно меньших энергиях.

Так нейтроны с длиной волны  $\sim 1\text{Å}$  имеют энергию  $\sim 0.08\text{эВ}$ , что соответствует температуре нейтронов около  $600\text{K}$ .

Взаимодействие нейтронов с атомами вещества существенно отличается по своей природе от взаимодействия с фотонами или заряженными частицами. Поэтому при облучении нейтронами дополнительно выявляются особенности атомного строения (положения легких атомов в решетке, магнитная структура и др.). Следует отметить, что поглощение нейтронов в веществе очень мало, и это позволяет изучать массивные образцы.

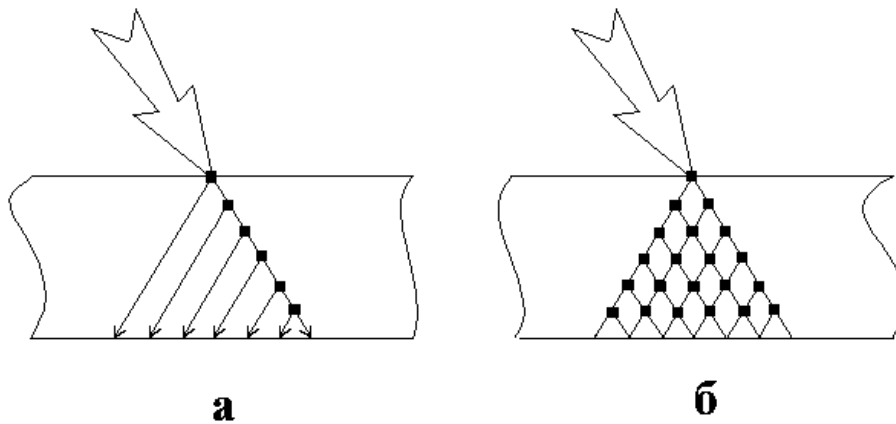
Рассеянное веществом излучение необходимо тем или иным способом проанализировать и извлечь из параметров рассеяния структурные характеристики. В принципе возможно два пути: во-первых, можно сфокусировать, если это возможно, рассеянное излучение, получить "оптическое" изображение объекта и изучать по нему структуру; во-вторых, получить дифракционную картину и, применяя Фурье-анализ, извлечь всю возможную информацию о структуре исследуемого кристалла (симметрия дифракционной картины позволяет определить симметрию кристалла - его точечную и пространственную группу симметрии; измерения интенсивностей рефлексов дает возможность в конечном счете получить распределение электронной плотности; и, наконец, тонкая структура дифракционных пятен содержит информацию о реальной структуре кристалла, то есть о дефектах кристаллической решетки, их типе и количестве). Следует отметить, что и первый и второй пути не всегда могут дать однозначную информацию о структуре и связано это в первую очередь с тем, что двумерное микроскопическое изображение или двумерная дифракционная картина не позволяют восстановить без потерь все характеристики трехмерного объекта.

Рассмотрим взаимодействие плоской когерентной волны с атомами кристаллической решетки. Атомы решетки, а точнее электроны в атомах, попадая в поле действия падающей волны сами становятся источниками вторичных волн. Суммарное рассеянное излучение является результатом интерференции всех вторичных волн и существенным образом зависит от природы взаимодействия первичной волны с атомами объекта, а также от их расположения в пространстве. Методы описания процессов дифракции и многие дифракционные характеристики зависят от соотношения энергии рассеянного излучения и энергии падающего пучка. Если взаимодействие падающих квантов с веществом слабое, то энергия дифрагированного излучения мала по сравнению с энергией падающего излучения, в этом случае волновое поле после дифракции является, по существу, суперпозицией исходной и рассеянных волн. В квантовой механике такой случай получил название приближения однократного рассеяния или борновского приближения, а в теории дифракции - кинематического рассеяния. Большинство структурных задач достаточно хорошо описывается кинематическим приближением, так как объекты, с которыми приходится иметь дело, достаточно несовершенны и процессами многократного рассеяния можно пренебречь, однако в некоторых случаях (совершенный и достаточно протяженный кристалл, случай рассеяния электронов и др.) вероятность того, что вторичные волны продифрагируют на соседних атомах еще один и более раз становится заметной. В этом случае интенсивность дифрагированной волны становится соизмерима с волной падающей, и кинематическое приближение перестает работать - возникает необходимость учитывать эффекты многократного рассеяния.

Сказанное выше можно проиллюстрировать на следующих схемах. Падающая волна, проходя через кристалл, возбуждает атомы, лежащие на различной глубине, и вызывает появление дифрагированных волн, которые, в силу недостаточного совершенства кристалла (условие Брэгга для более глубоких слоев выполняется для этих волн недостаточно хорошо), проходят оставшуюся часть кристалла без взаимодействия (см.рис.1.1а). В случае высоко совершенного кристалла вторичные волны будут

дифрагировать снова, так как соседняя область кристалла также ориентирована под правильным углом для брегговского отражения.

Рис.1.1 Схема, иллюстрирующая процесс формирования однократного -а), и многократного рассеяния -б).



В результате в кристалле за счет интерференции вторичных многократно дифрагированных волн формируется самосогласованное волновое поле (см.рис.1.1б). Структура и свойства этого поля коренным образом отличаются от дифрагированной волны в кинематическом случае. Для рентгеновских лучей коэффициент преломления отличается от единицы на величину порядка  $10^{-6}$ . Поэтому на первый взгляд кажется, что учет многократного рассеяния будет столь же мал. Однако это не так. На совершенных кристаллах наблюдаются многочисленные тонкие но весьма заметные динамические эффекты такие, как "маятниковый" эффект, эффект "аномального прохождения", эффект "углового усиления" и др. Эти эффекты лежат в основе разнообразных методов исследования структурных характеристик кристаллов.

Для рассеяния электронов их взаимодействие с веществом значительно сильнее и поэтому при расчетах картин рассеяния электронов, электронно-микроскопических изображений и в целом ряде других случаев необходимо пользоваться динамическим приближением теории рассеяния.

# ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ КИНЕМАТИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

## 1.2.1. ИНТЕРФЕРЕНЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ ЛАУЭ

Когерентное рассеяние электромагнитных волн на электронах и других зарядах вещества с точки зрения классической электродинамики может быть описано как двойной процесс: под действием переменного электромагнитного поля падающей волны электроны приходят в колебательное движение; последнее в свою очередь вызывает вторичные электромагнитные волны, распространяющиеся во всех направлениях вокруг колеблющегося заряда. Можно строго доказать, что амплитуда волны, рассеянная одним электроном и наблюдаемая на расстоянии  $R$ , определяется выражением

$$E^e = \left( \frac{e^2}{mc^2} \right) \cdot \frac{E_0}{R} \quad (1.2)$$

здесь и далее  $e$  - заряд электрона;  $m$  - масса электрона;  $c$  - скорость света в вакууме;  $E_0$  - тангенциальная составляющая напряженности поля первичной волны.

Распределение электронной плотности в атоме имеет сложный характер и описывается законами квантовой механики. Поэтому при переходе от отдельного электрона к атому необходимо учитывать зависимость рассеяния от угла. Строгое решение этой задачи достаточно сложно. На практике обычно пользуются таблицами  $f(\sin\theta/\lambda)$  функции атомного рассеяния. Эта величина показывает во сколько раз амплитуда, рассеянная атомом в данном направлении и при данной длине волны, больше, чем амплитуда рассеяния электроном в том же направлении, и носит название атомной амплитуды.

Рассмотрим рассеяние рентгеновских лучей на пространственной решетке, состоящей из отдельных атомов. Для упрощения задачи будем считать, что падающая волна в кристалле распространяется со скоростью света в вакууме, т.е. показатель преломления мы полагаем равным единице [1-11]. Это означает, что можно пренебречь взаимодействием между рассеянной и падающей волнами. Амплитуды волн, рассеянных всеми эквивалентными атомами в заданном направлении, считаем одинаковыми, т.е. пренебрегаем эффектами поглощения и многократного рассеяния. Наконец, рассматривается только дифракция Фраунгофера: на кристалл падает плоская волна, а точка наблюдения практически бесконечно удалена от кристалла. Каждый узел решетки, попадая в поле падающей волны, становится источником вторичной сферической волны. Задача таким образом сводится к поиску результирующей волны в любой точке пространства, находящейся на расстоянии, много большем размеров кристалла [1-9].

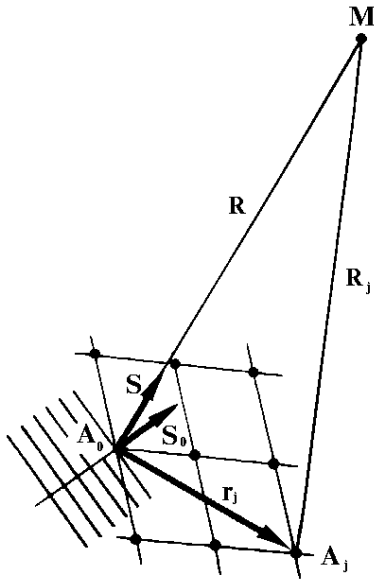


Рис.1.2.Схема, иллюстрирующая процесс рассеяния на кристаллической решетке.  $A_0, A_j$  - узлы решетки;  $s_0, s$  - единичные вектора, определяющие направление падающей волны;  $R, R_j$  - расстояния от точки наблюдения  $M$  до соответствующих узлов;  $r_j$  - вектор решетки, соединяющий нулевой узел решетки с узлом  $j$ .

Пусть на кристалл с элементарной ячейкой, определяемой трансляционными векторами  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$  и содержащей  $N^3$  одинаковых атомов (кристалл имеет форму параллелепипеда с ребрами, параллельными векторам  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ , и содержат по  $N$  атомов вдоль каждого ребра), падает плоская волна с волновым вектором  $\mathbf{k}$  ( $|\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ ) в направлении, определяемом единичным вектором  $\mathbf{s}_0$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cdot e^{i(\omega t - \varphi)} \quad (1.3)$$

Выберем начало координат в одном из узлов решетки, например  $A_0$ . Легко показать, что плоская волна, распространяющаяся в кристалле, в узле  $A_j$  находящемся на расстоянии  $|\mathbf{r}_j|$  от начала координат, будет иметь фазу  $\varphi = k(\mathbf{s}_0, \mathbf{r}_j)$  и, следовательно, возмущение, создаваемое этой волной в точке  $A_j$ , можно записать в виде

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cdot e^{i[\omega t - k(\mathbf{s}_0, \mathbf{r}_j)]}, \quad (1.4)$$

здесь и далее  $k = |\mathbf{k}|$ . Вектор  $\mathbf{r}_j$  можно выразить через параметры элементарной ячейки

$$\mathbf{r}_j = \mathbf{a}m + \mathbf{b}n + \mathbf{c}p, \quad (1.5)$$

где  $m, n, p$  - целые числа. Если точка наблюдения  $M$  (см.рис.1.2) находится на достаточно большом расстоянии  $R$  от начала координат, так что  $R \gg r_j$  ( $R$  много больше размеров кристалла), в направлении, определяемом единичным вектором  $\mathbf{s}$ , вторичная сферическая волна, излучаемая атомом, находящимся в узле  $A_j$ , будет в точке  $M$  иметь вид

$$\mathbf{E}_j = \frac{\mathbf{E}_0}{R_j} \cdot e^{i[\omega t - k(\mathbf{s}_0, \mathbf{r}_j) - kR_j]} \quad (1.6)$$

Здесь  $R_j$  - расстояние от точки наблюдения до узла  $A_j$ . Полагая в знаменателе амплитуды  $|R_j| \approx |R|$ , следует в то же время более точно учесть фазовый член  $kR_j$  в экспоненте. С точностью до величин второго порядка малости, можно записать  $\mathbf{R}_j = \mathbf{R} - (\mathbf{s}, \mathbf{r}_j)$ .

Учитывая сказанное, выражение для вторичной сферической волны, примет вид

$$\mathbf{E}_j = \frac{\mathbf{E}_0}{R_j} \cdot e^{i[\omega t - k(\mathbf{s}_0, \mathbf{r}_j) - (kR_j) + k(\mathbf{s}, \mathbf{r}_j)]} = \frac{\mathbf{E}_0}{R} \cdot e^{i(\omega t - kR)} \cdot e^{ik(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0, \mathbf{r}_j)} \quad (1.7)$$

Чтобы вычислить результирующую волну возмущения в точке  $M$ , образующуюся в результате рассеяния первичной плоской волны всеми атомами кристалла, необходимо просуммировать выражение для  $E_j$  по всем узлам кристаллической решетки, т.е.

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{E}_0}{R} \cdot e^{i(\omega t - kR)} \cdot \sum_j e^{ik(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0, \mathbf{r}_j)} \quad (1.8)$$

Подставляя значение вектора  $\mathbf{r}_j = \mathbf{a}m + \mathbf{b}n + \mathbf{c}p$  и обозначая временной множитель  $\mathbf{E}(t) = \frac{\mathbf{E}_0}{R} \cdot e^{i(\omega t - kR)}$ , стоящий в начале формулы, получим

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}(t) \cdot \sum_{m=0}^N \sum_{n=0}^N \sum_{p=0}^N e^{ik[(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), (\mathbf{a}m + \mathbf{b}n + \mathbf{c}p)]} = E(t) \cdot \Phi(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \quad (1.9)$$

$$\Phi(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) = \prod_{a,b,c} \sum_{m=0}^N e^{ikm[(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{a}]} \quad (1.10)$$

Выражения, стоящие под знаком суммы, представляют собой геометрические прогрессии, первый член которых равен 1, а знаменатель имеет вид  $q = e^{-ik[(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{a}]}$ . Введем следующие обозначения

$$\Psi_a = \frac{k}{2} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{a}], \Psi_b = \frac{k}{2} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{b}], \Psi_c = \frac{k}{2} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{c}] \quad (1.11)$$

Тогда для первой суммы можно записать

$$\sum_{m=0}^N e^{ikm[(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{a}]} = \frac{1 - \exp(2iN\Psi_a)}{1 - \exp(2i\Psi_a)} \quad (1.12)$$

и аналогично для других сомножителей. Интенсивность рассеянного излучения легко получить, умножив выражение для амплитуды на комплексно сопряженное, тогда используя формулы Эйлера и выполнив несложные тригонометрические преобразования можно записать

$$I = \left(\frac{\mathbf{E}}{R}\right)^2 \cdot \prod_{a,b,c} \frac{\sin^2(N\Psi_a)}{\sin^2(\Psi_a)} \quad (1.13)$$

Функция, стоящая под знаком произведения, называется интерференционной функцией Лауэ. Анализ этой функции показывает, что она имеет максимумы в точках  $\Psi_1 = \pi h, \Psi_2 = \pi k, \Psi_3 = \pi l$ , где  $h, k, l$  - целые числа. Эти максимумы носят название

главных максимумов и имеют значения  $I_{max} = \left(\frac{E}{R}\right)^2 \cdot (N^3)^2$ . Наряду с главными

максимумами, в точках  $\Psi_1 = h \pm \frac{3}{2N}, h \pm \frac{5}{2N}$ , и т.д. располагаются побочные максимумы, имеющие существенно меньшую амплитуду. Полуширина главных максимумов тем меньше, чем больше число атомов  $N$  в кристалле. На рис.1.3 приведен вид функции Лауэ, вычисленный для нескольких значений  $N$ . Запишем еще раз координаты главных максимумов

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= \frac{\pi}{\lambda} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{a}] = \pi h, \\ \Psi_2 &= \frac{\pi}{\lambda} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{b}] = \pi k, \\ \Psi_3 &= \frac{\pi}{\lambda} \cdot [(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0), \mathbf{c}] = \pi l \end{aligned} \quad (1.14)$$

Совершенно ясно, что это - условия дифракции на трехмерной решетке, носящие название уравнений Лауэ.

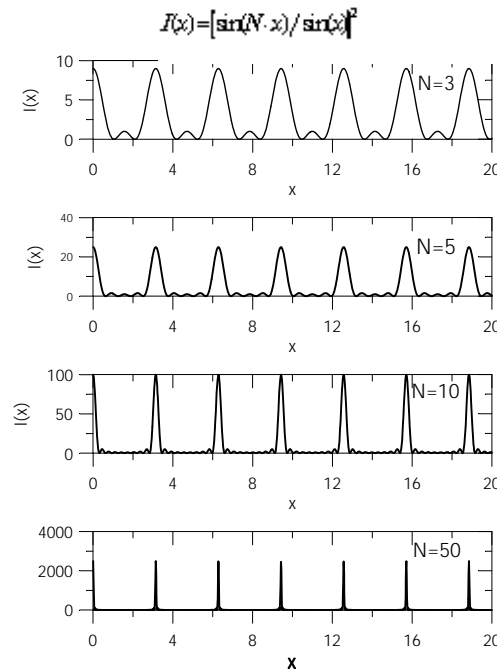


Рис.1.3. Вид интерференционной функции Лауэ, вычисленный для  $N=5; 10; 15; 20; 30; 50$ .

## ОБРАТНАЯ РЕШЕТКА. ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ УСЛОВИЙ ДИФРАКЦИИ

В дифракционных задачах физики твердого тела, оптики, структурного анализа, электронной микроскопии и др. чрезвычайно полезным является введение понятия обратной решетки и обратного пространства, сопряженных с прямой решеткой и прямым пространством. Если прямая решетка определяется векторами элементарной ячейки  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ , и любой узел решетки может быть задан при помощи вектора трансляции  $\mathbf{T} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$ , то вектора элементарной ячейки обратной решетки определяются соотношениями

$$\mathbf{a}^* = \frac{1}{V} [\mathbf{bc}], \mathbf{b}^* = \frac{1}{V} [\mathbf{ca}], \mathbf{c}^* = \frac{1}{V} [\mathbf{ab}], \quad (1.15)$$

где  $V$  - объем элементарной ячейки  $V = (\mathbf{a}[\mathbf{bc}]) = (\mathbf{b}[\mathbf{cd}]) = (\mathbf{c}[\mathbf{ab}])$ , причем

$$\begin{aligned} (\mathbf{a}\mathbf{a}^*) &= (\mathbf{b}\mathbf{b}^*) = (\mathbf{c}\mathbf{c}^*) = 1, \\ (\mathbf{a}\mathbf{b}^*) &= (\mathbf{a}\mathbf{c}^*) = (\mathbf{b}\mathbf{a}^*) = (\mathbf{b}\mathbf{c}^*) = (\mathbf{c}\mathbf{a}^*) = (\mathbf{c}\mathbf{b}^*) = 0, \end{aligned} \quad (1.16)$$

а любой узел этой решетки задается вектором  $\mathbf{H} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$ , называемым вектором обратной решетки. Из определения следуют два важных свойства обратной решетки: во-первых вектор обратной решетки  $\mathbf{H}$  перпендикулярен плоскостям прямой решетки с индексами  $hkl$ ; во-вторых абсолютная величина вектора  $\mathbf{H}$  равна обратной величине межплоскостного расстояния  $d$  для плоскостей с индексами  $hkl$ . Учитывая сказанное выше, условия дифракции (1.14) можно записать в очень простой и компактной форме

$$\frac{\mathbf{s} - \mathbf{s}_0}{\lambda} = \mathbf{H}_{hkl}, \text{ или } \mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{H}_{hkl}, \quad (1.17)$$

представляющей закон Вульфа-Брегга, т.е.

$$2 \cdot \sin\theta = \mathbf{H}_{hkl} \cdot \lambda, \text{ или } 2 \cdot d_{hkl} \cdot \sin\theta = \lambda \quad (1.18)$$

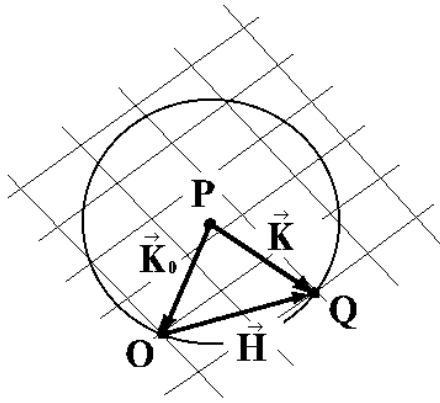


Рис.1.4.Схема геометрии Лауэ. Сфера отражения в обратном пространстве.

Введенное выше определение обратной решетки (1.15-1.16) позволяет использовать очень наглядное геометрическое представление условий дифракции, предложенное Эвальдом [4-9]. От нулевого узла обратной решетки  $O$  в направлении, обратном  $S$ , отложим отрезок, равный  $1/\lambda$ , и из полученной точки  $P$  опишем сферу радиусом  $R=1/\lambda$  (см.рис.1.4). Если какой-либо узел обратной решетки, например  $Q$  с координатами  $h,k,l$ , попадает на эту сферу, называемую сферой отражения (сферой распространения или сферой Эвальда), то, как видно из рисунка 1.4, для треугольника  $POQ$  удовлетворяется векторное уравнение

$$\frac{\mathbf{s}}{\lambda} = \mathbf{H}_{hkl} + \frac{\mathbf{s}_0}{\lambda}, \text{ или } \mathbf{k} = \mathbf{H}_{hkl} + \mathbf{k}_0 \quad (1.19)$$

Отрезок  $OQ$  здесь не что иное, как вектор обратной решетки  $\mathbf{H}$ . Таким образом при повороте обратной решетки вокруг нулевого узла на сферу отражения попадают те или иные узлы обратной решетки, при этом выполняется условие дифракции Лауэ, и в направлении этих узлов возникают дифрагированные пучки. Из геометрического построения Лауэ следует, что в дифракции могут участвовать только те узлы обратной решетки, которые попадают внутрь сферы радиуса  $2/\lambda$ , проведенной вокруг нулевого узла и называемой сферой ограничения.

## СТРУКТУРНАЯ АМПЛИТУДА

Проведенные выше рассуждения сделаны для случая примитивной кристаллической решетки, т.е. когда все рассеивающие центры одинаковы, причем рассеивающая способность узлов для простоты полагалась равной единице, поэтому для реального случая, когда в узлах располагаются атомы, полученное выражение для интенсивности необходимо умножить на атомный фактор рассеяния. В случае если решетка более сложная и имеет базис, состоящий из атомов разных сортов, приведенные выше рассуждения остаются справедливыми, следует только атомный фактор заменить на структурную амплитуду  $F(hkl)$ .

В рассмотренном выше случае рассеяния плоской монохроматической волны примитивной решеткой интерференционная картина состоит из ряда максимумов, интенсивность которых не зависит от индексов отражающей плоскости и пропорциональна числу рассеивающих центров. Расположение максимумов определяется только трансляционной группой симметрии, т.е. вектором  $\mathbf{r}_j = \mathbf{a}m + \mathbf{b}n + \mathbf{c}p$ .

В решетке с базисом внутри каждой элементарной ячейки находятся дополнительные атомы, положения которых определяются векторами  $\mathbf{r}_m = \mathbf{a}u_m + \mathbf{b}v_m + \mathbf{c}w_m$ , где  $m$  меняется от 1 до  $M$ ;  $u, v, w$  -правильные дроби, определяющие координаты атомов базиса, причем при  $j=1$   $r_m=0$ , что соответствует атомам примитивной решетки. Положение каждого атома в сложной решетке тогда можно



записать в виде  $\mathbf{r}_{mj} = \mathbf{r}_m + \mathbf{r}_j$ . Рассеивающая способность атомов каждого сорта задается атомной функцией рассеяния  $f_m(\sin\theta/\lambda)$ .

Таким образом любую сложную решетку можно представить, как состоящую из  $M$  одинаковых примитивных решеток, вставленных одна в другую и смещенных относительно исходной решетки на вектора  $\mathbf{r}_m$ . Каждая из этих решеток с точностью до постоянного множителя при рассеянии волны образует одну и ту же интерференционную функцию, и значит число и положение дифракционных максимумов будет одно и то же. Это означает, что в сложной решетке число максимумов не может быть больше, чем в примитивной. Наоборот, в ряде случаев число интерференционных максимумов в сложной решетке может уменьшаться, так как волны, рассеиваемые отдельными примитивными решетками в направлении главных максимумов, вообще говоря, не совпадают по фазе и поэтому могут частично или полностью ослаблять друг друга. Следовательно для определения суммарной амплитуды волны, рассеянной сложной решеткой, необходимо просуммировать амплитуды элементарных волн, рассеянных всеми атомами. Задачу можно упростить, если сначала суммирование провести по атомам, образующим отдельные примитивные решетки, а затем просуммировать все волны, рассеиваемые всеми примитивными решетками [4,7-9].

Суммирование по примитивным решеткам всякий раз приводит к одному и тому же результату: к одинаковой интерференционной функции, положение главных максимумов которой определяется уравнением  $\mathbf{s} - \mathbf{s}_0 = \lambda \cdot \mathbf{H}_{hkl}$ . Второе суммирование показывает, что в направлении главных максимумов распространяется  $M$  волн, разность хода которых определяется выражением  $(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0, \mathbf{r}_m)$ . Тогда второе суммирование даст

$$F(hkl) = \sum_{m=1}^M f_m \cdot e^{ik(\mathbf{s}-\mathbf{s}_0, \mathbf{r}_m)} = \sum_{m=1}^M f_m \cdot e^{2\pi i(\mathbf{H}, \mathbf{r}_m)} = \sum_{m=1}^M f_m \cdot e^{2\pi i(u_m h + v_m k + w_m l)} \quad (1.20)$$

В случае примитивной решетки ( $j=1, r_m=0$ )  $F=1$ . Написанное выражение носит название структурной амплитуды решетки. Интенсивность максимумов сложной решетки пропорциональна  $|F^2(hkl)|$  и называется структурным фактором решетки.

Таким образом в общем случае результирующая интенсивность, рассеянная сложной решеткой, будет иметь вид

$$I = \left( \frac{E_0}{R} \right)^2 \cdot \Phi^2(\mathbf{H}) \cdot F^2(\mathbf{H}, \mathbf{r}_m), \quad (1.21)$$

причем следует подчеркнуть, что положения интерференционных максимумов определяются интерференционной функцией Лауэ -  $\Phi(\mathbf{H})$ , а их амплитуда - структурным множителем -  $F(\mathbf{H}, \mathbf{r}_m)$ . Следовательно структурная амплитуда является своеобразным амплитудным фильтром, который накладываясь на интерференционную функцию Лауэ приводит к уменьшению или полному исчезновению интенсивности отдельных линий дифракционного спектра.