

CARMELO GIACOVAZZO

## CENNI DI TEORIA DINAMICA DELLA DIFFRAZIONE IN UN CRISTALLO PERFETTO

RIASSUNTO. — Sono descritti brevemente i principi della teoria dinamica della diffrazione seguendo essenzialmente la trattazione proposta da M. von Laue: sono discussi i casi di un cristallo infinito e di un cristallo finito specificatamente nel caso in cui il fascio R.X. entra da una superficie per lasciare il cristallo dalla superficie opposta. E' anche definita la superficie di dispersione come luogo di possibili punti d'onda nello spazio reciproco.

E' inoltre brevemente descritta la teoria della diffrazione per onde sferiche di Kato, con particolare riguardo alle frange di tipo Pendellösung.

SUMMARY. — The general principles of the dynamical theory of X-Rays diffraction are briefly described: the treatment used is essentially that due to M. von Laue. An infinite and a bounded crystal are considered in the case in which wave trains enter the crystal at one surface and leave it at another (Laue-case). The dispersion surface is defined as the loci of tips of permitted wave vectors in reciprocal space.

An approach to the spherical-wave theory is considered with some discussion of Pendellösung fringes.

### Introduzione.

Dalla scoperta dei R-X nel 1895 la teoria della diffrazione ha percorso sostanzialmente tre stadi: la *teoria geometrica*, che si interessa soprattutto alla direzione dei raggi diffratti ed è volta alla determinazione della forma e grandezza della cella. Lo strumento principale di questa teoria è il concetto di reticolo reciproco, il suo uso consiste nella indicizzazione delle figure di diffrazione.

La *teoria cinematica* fissa la sua attenzione alla distribuzione delle intensità di diffrazione: suo strumento sono le trasformate di Fourier e il suo uso è rivolto alla determinazione delle strutture cristalline o ad informazioni intorno alla imperfetta periodicità dei cristalli. La teoria cinematica tratta la diffusione da ogni elemento di volume del

campione come indipendente dalla diffusione da altri elementi, eccezion fatta per la perdita incoerente di potenza avvenuta nel raggiungere e lasciare quel dato elemento di volume: ogni atomo diffonde sotto lo stimolo dell'onda incidente.

La *teoria dinamica* considera l'intero campo d'onda all'interno del cristallo: il fascio incidente e il fascio diffratto sono in realtà coerentemente accoppiati e l'energia è continuamente scambiata fra di essi, cosicché il campo è in realtà unitario. Le condizioni sotto cui l'accoppiamento può essere ignorato possono essere derivate quantitativamente: in linea generale e intuitivamente se la regione che diffrange è sufficientemente piccola e la intensità di diffrazione abbastanza bassa, i risultati derivabili dalle formule dinamiche sono sostanzialmente eguali a quelli deducibili cinematicamente.

Fu Darwin (1914) a dare avvio a questa branca della fisica teorica: Ewald (1916, 1917) ne diede la definitiva sistemazione. Egli considerò il cristallo come costituito di identici dipoli elettrici situati ai punti di un reticolo spaziale perfetto e in stato di oscillazione: la diffrazione non è che l'interazione fra i R-X e i dipoli. M. von Laue (1931, 1949, 1952, 1960) estese la teoria di Ewald e considerò il cristallo come un tridimensionale continuamente distribuito.

Kato (1960) ha esteso la teoria a onde incidenti qualsiasi: dettagli sperimentali e articoli di sintesi della teoria dinamica sono stati preparati da Borrmann (1959), Authier (1961), James (1963), Batterman e Cole (1964).

Pur essendo molto importante, ai fini teorici e applicativi, la valutazione degli effetti di assorbimento, per semplicità li trascureremo nella nostra trattazione: allo stesso modo considereremo soltanto il caso della trasmissione (caso di Laue) dei R-X.

### Propagazione di un'onda piana.

In un continuo tridimensionale, nell'ipotesi che la carica e la densità di corrente siano in media nulle, le equazioni di Maxwell possono essere scritte

$$(1) \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = - \frac{\delta \mathbf{B}}{\delta t} \qquad (2) \quad \operatorname{rot} \mathbf{H} = - \frac{\delta \mathbf{D}}{\delta t}$$

$$(3) \quad \operatorname{div} \mathbf{B} = 0 \qquad (4) \quad \operatorname{div} \mathbf{D} = 0$$

Eliminando da queste il campo elettrico e le grandezze magnetiche, con un po' di calcoli, si ottiene la

$$(5) \quad A\mathbf{D} + \text{rot rot } \Phi\mathbf{D} = \frac{1}{c^2} \frac{\delta^2 \mathbf{D}}{\delta t^2}$$

che indicheremo come *equazione di propagazione*:  $\mathbf{D}$  è, naturalmente, l'induzione elettrica,  $\Phi$  la suscettività elettrica definita dalla equazione

$$\mathbf{P} = \frac{d\mathbf{P}}{dv} = \varepsilon_0 \Phi \mathbf{E}$$

dove  $\varepsilon_0$  è la costante dielettrica del vuoto,  $\mathbf{P}$  è il momento elettrico per unità di volume.

La (5) è un'equazione alle derivate parziali lineare e omogenea: pertanto se conosciamo delle soluzioni particolari  $\mathbf{D}_j$ , ogni combinazione lineare

$$\mathbf{D} = \sum_j A_j \mathbf{D}_j$$

è una soluzione della (5): la scelta delle soluzioni particolari e quindi dei valori dei coefficienti  $A_j$  è determinata dalle condizioni al contorno. Poiché ricerchiamo una soluzione della (5) valida all'interno del cristallo, è naturale considerare come soluzione tipica un'onda piana  $\mathbf{D}$  con vettore d'onda  $\mathbf{K}_0$  da definire, ma la cui ampiezza è una funzione periodica delle coordinate spaziali con la medesima periodicità del reticolo.

La soluzione dovrà essere pertanto del tipo

$$(6) \quad \mathbf{D} = \sum_n \mathbf{D}_n \exp(-2\pi i \mathbf{r}_n^* \cdot \mathbf{r}) \{ \exp 2\pi i (vt - \mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{r}) \} = \\ = \sum_n \mathbf{D}_n \exp \{ 2\pi i (vt - \mathbf{K}_n \cdot \mathbf{r}) \}$$

dove

$$(7) \quad \mathbf{K}_n = \mathbf{K}_0 + \mathbf{r}_n^*.$$

La soluzione è pertanto equivalente formalmente ad un set infinito di onde piane aventi i vettori d'onda dati dalla (7): ad ogni nodo del reticolo reciproco viene così associata una corrispondente onda piana.

In un cristallo perfetto la suscettività elettrica è una funzione triplamente periodica: il calcolo classico dà infatti:

$$(8) \quad \Phi(\mathbf{r}) = - \frac{e^2 \lambda^2}{4\pi^2 \varepsilon_0 m c^2} \varrho(\mathbf{r})$$

dove  $\varrho(\mathbf{r})$  è la densità elettronica:  $\Phi$  può pertanto essere sviluppata in serie di Fourier

$$(9) \quad \Phi = \sum_q \Phi_q \exp(-2\pi i \mathbf{r}^*_q \cdot \mathbf{r})$$

dove, per la (8), viene ad essere

$$(10) \quad \Phi_q = - \frac{e^2 \lambda^2}{4 \pi^2 \varepsilon_0 m c^2 V} F_q :$$

$F_q$  è il fattore di struttura  $q$ -esimo.

Sostituendo le (6) e (9) nell'equazione di propagazione (5), attraverso un calcolo un po' laborioso si giunge alla serie di equazioni:

$$(11) \quad (K_m^2 - K^2) \mathbf{D}_m = K_m^2 \sum_n \Phi_{m-n} \mathbf{D}_{n(m)} \quad m = 1, 2, \dots$$

dove  $\mathbf{D}_{n(m)}$  rappresenta la componente di  $\mathbf{D}_n$  sul piano perpendicolare a  $\mathbf{K}_m$ , e  $|K| = \frac{v}{c} = \frac{1}{\lambda}$  è il vettore d'onda nel vuoto.

Le (11) ci dimostrano che nessuno dei treni d'onda costituenti il campo può avere una velocità di fase uguale a  $c$ : in tal caso sarebbe infatti  $K_m = K$  e l'ampiezza del treno d'onda  $m$ -esimo risulterebbe infinita. In termini di sfera di riflessione, si ottiene il risultato, a prima vista sorprendente, che nessun nodo del reticolo reciproco può mai giacere su di essa.

Seguendo Ewald, definiamo la quantità  $\varepsilon_m$ , detta *errore di risonanza*, con la

$$K_m = K(1 + \varepsilon_m) :$$

$1 + \varepsilon_m$  rappresenta, come si vedrà, l'indice di rifrazione per il treno d'onda  $m$ -esimo quando il campo risulta composto solo da esso.

Poiché  $\varepsilon_m$  è solitamente molto piccolo si può scrivere

$$\frac{K_m^2 - K^2}{K_m^2} \sim 2 \varepsilon_m$$

e le (11) si semplificano nelle

$$(11') \quad \mathbf{D}_m = \frac{1}{2 \varepsilon_m} \sum_n \Phi_{m-n} \mathbf{D}_{n(m)} \quad m = 1, 2, \dots$$

Nei casi pratici solo per pochissimi valori di  $m$   $\varepsilon_m$  è molto piccolo e quindi  $D_m$  apprezzabile: se a rigori cioè la soluzione completa della (5) è costituita dalla sovrapposizione (11') di un numero infinito di treni d'onda, nei casi pratici le ampiezze di tutte le onde risultano trascurabili ad eccezione di quelle per cui  $\varepsilon_m$  è molto piccolo, nel qual caso  $|K_m|$  è molto vicino a  $|K|$  (i nodi corrispondenti giacciono ora in prossimità della sfera di riflessione).

### La superficie di dispersione.

Nella grande maggioranza dei casi pratici il numero di nodi del reticolo reciproco che giacciono in prossimità della sfera di Ewald non è superiore a 2. Limitando la nostra attenzione a questa situazione semplificata, supponiamo che solo l'origine del reticolo reciproco giaccia in prossimità della sfera: nessuna onda diffratta viene eccitata e le (11') si riducono alla

$$(12) \quad 2 \varepsilon_0 D_0 = \Phi_0 D_0$$

da cui  $\varepsilon_0 = 1/2 \Phi_0$ :  $\mathbf{K}_0$  viene così inequivocabilmente definito.

Se, oltre il nodo 0, anche il nodo reciproco  $h$  giace in prossimità della sfera, le (11') si riducono alle

$$(13) \quad \begin{cases} 2 \varepsilon_0 \mathbf{D}_0 = \Phi_0 \mathbf{D}_{0(0)} + \Phi_{-h} \mathbf{D}_{h(0)} \\ 2 \varepsilon_h \mathbf{D}_h = \Phi_h \mathbf{D}_{0(h)} + \Phi_0 \mathbf{D}_{h(0)} \end{cases}$$

Se distinguiamo fra due diversi stati di polarizzazione (vedi fig. 1):

stato  $a$ ):  $\mathbf{D}_0$  e  $\mathbf{D}_h$  sono perpendicolari al piano di scattering e sono paralleli fra loro;

stato  $b$ ):  $\mathbf{D}_0$  e  $\mathbf{D}_h$  giacciono nel piano di scattering.

le (13) possono scriversi anche

$$(14) \quad \begin{cases} (\Phi_0 - 2 \varepsilon_0) D_0 + C \Phi_{-h} D_h = 0 \\ C \Phi_h D_0 + (\Phi_0 - 2 \varepsilon_h) D_h = 0 \end{cases}$$

dove  $C = 1$  per lo stato  $a$ ) e  $C = \cos 2\theta_0$  per lo stato  $b$ ).

La condizione di risolubilità del sistema (14) è

$$(15) \quad (\Phi_0 - 2 \varepsilon_0) (\Phi_0 - 2 \varepsilon_h) = C^2 |\Phi_h|^2 :$$

la (15) rappresenta un'iperbole che, trascritta in opportuna forma canonica, diventa

$$(16) \quad \xi_o \xi_h = \frac{K^2}{4} C^2 |\Phi_h|^2$$

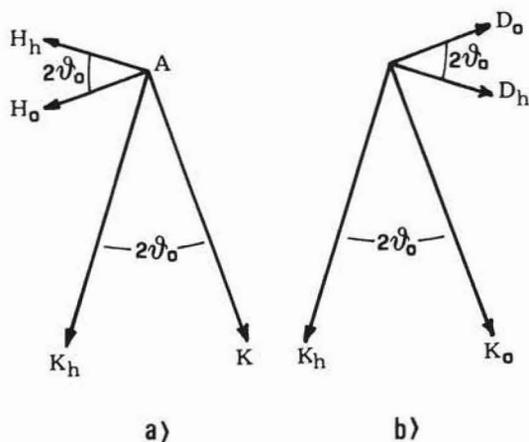


Fig. 1. — Stati di polarizzazione.

La fig. 2 esplicita il significato dei simboli utilizzati:  $L$  è il punto d'onda nel caso della teoria cinematica, distante  $K = \frac{1}{\lambda}$  da  $O$  e da  $H$  e coincide col centro della sfera di Ewald nella teoria cinematica: lo chiameremo punto di Laue.

$Q$  è il punto che dista  $K(1 + 1/2 \Phi_0)$  da entrambi i nodi  $O$  e  $H$ : sarebbe il punto d'onda dinamico nel caso di un solo treno d'onda (vedi equ. 12). La distanza  $LQ$  è fortemente esagerata nel disegno: in realtà  $K(1 + 1/2 \Phi_0)$  differisce da  $K$  solo per qualche parte su  $10^5$ .

Se immaginiamo di ruotare la fig. 2 intorno ad  $OH$ , cioè intorno al vettore  $\mathbf{r}_h^*$  del reticolo reciproco le relazioni analitiche fin qui dedotte restano perfettamente valide: si genera così un iperboloido di rivoluzione per ogni stato di polarizzazione.

Al complesso dei due iperboloidi si dà il nome di *superficie di dispersione*.

Il risultato fin qui acquisito può essere così espresso: se due soli nodi giacciono in prossimità della sfera di Ewald, ogni punto della

superficie di dispersione rappresenta un possibile punto d'onda, cioè ogni coppia di vettori  $K_0$  e  $K_h$  spiccati da questo punto verso  $O$  e  $H$  rappresenta una coppia di vettori d'onda compatibile con la equazione di propagazione.

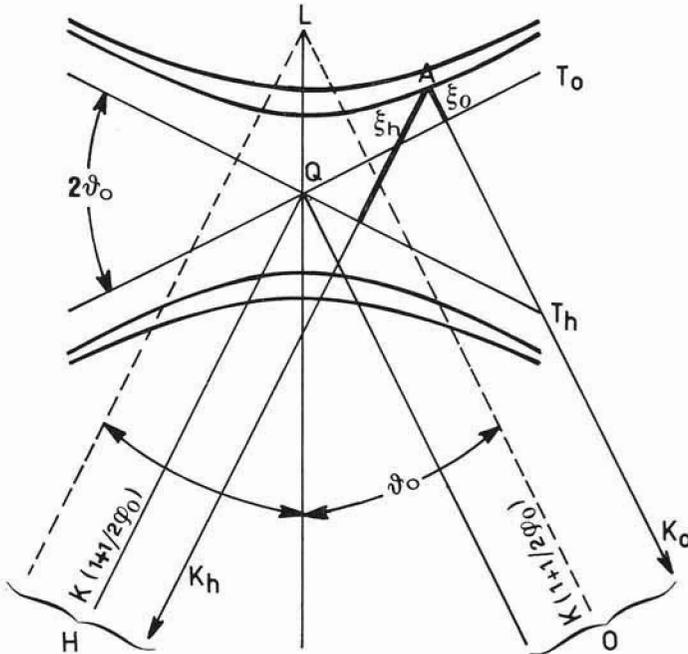


Fig. 2. — Superficie di dispersione.

Dalla (14) si ricavano le relazioni

$$(17) \quad \frac{D_h}{D_0} = \frac{2 \xi_0 \Phi_h}{KC |\Phi_h|^2} \quad \left| \frac{D_h}{D_0} \right| = \left[ \frac{\xi_0}{\xi_h} \right]^{1/2} ;$$

cioè la differenza di fase fra  $D_h$  e  $D_0$  è uguale costantemente alla fase di  $\Phi_h$  se  $\xi_0$  è positivo (ramo superiore dell'iperboloide) mentre differisce di  $\pi$  dalla fase di  $\Phi_h$  se  $\xi_0$  è negativo (ramo inferiore). Inoltre mano a mano che il punto d'onda generico si sposta sull'iperboloide in direzione degli asintoti,  $|D_h|$  diventa trascurabile rispetto a  $|D_0|$ .



rappresenta la traccia della superficie d'ingresso del cristallo:  $\mathbf{K}_0$  e  $\mathbf{K}_h$  sono i vettori d'onda generati all'interno del cristallo. Il piano che biseca ortogonalmente il segmento  $OH$  è parallelo ai piani reticolari di indici  $h$  dai quali si può pensare venga originato l'effetto di diffrazione: esso forma un angolo  $\chi$  con la superficie  $SS$ . Per il principio della continuità di fase  $\mathbf{K}_0$  e  $\mathbf{K}_0^i$  devono avere la medesima componente tangenziale: il punto d'onda  $A$  è determinato dal fatto che deve giacere sulla normale  $P_0^i N$  alla superficie del cristallo e sulla superficie di dispersione  $DD$ . Individuato  $A$  restano fissati i vettori  $K_0$  e  $K_h$ .

La determinazione dei vettori d'onda emergenti dalla superficie inferiore del cristallo viene effettuata in maniera del tutto simile.

In conclusione la normale  $P_0^i N$  interseca la superficie di dispersione (costituita generalmente da due iperboloidi di rivoluzione) in quattro diversi punti d'onda. In generale quattro campi coesisteranno all'interno del cristallo e, poiché ogni campo d'onda è costituito da due onde, l'onda piana incidente produce un totale di otto onde all'interno del cristallo.

La continuità della induzione elettrica alla superficie del cristallo (non vi è onda riflessa) impone ancora le

$$(19) \quad \begin{cases} D_{01} + D_{02} = D_{0i} \\ D_{h1} + D_{h2} = 0 \end{cases}$$

Si nota subito che  $\mathbf{D}_{h1}$  e  $\mathbf{D}_{h2}$  sono eguali in modulo ma opposti in fase.

Con un po' di calcoli si può mostrare che risulta

$$(20) \quad \begin{cases} D_{01} = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{p}{(p^2 + 1)^{1/2}} \right\} D_{0i} \\ D_{02} = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{p}{(p^2 + 1)^{1/2}} \right\} D_{0i} \\ D_{h1} = \frac{-G}{2(p^2 + 1)^{1/2}} D_{0i} \\ D_{h2} = \frac{G}{2(p^2 + 1)^{1/2}} D_{0i} \end{cases}$$

Se si definisce «angolo di incidenza» l'angolo  $\delta\psi_q$  compreso fra  $P_0^i O$  e  $P_q O$  ( $P_q$  è il punto di incontro fra la normale alla superficie per il punto  $Q$  e il cerchio d'incidenza), il parametro  $p$  che compare nelle

(20) viene detto « parametro d'incidenza » e risulta proporzionale a  $\delta\psi_q$  attraverso la relazione

$$p = \sin 2\theta_0 \left( \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} \right)^{1/2} \frac{1}{|C| |\Phi_h|} \delta\psi_q$$

dove  $\psi_0 = \cos(\mathbf{K}_0, \mathbf{n}_s)$ ;  $\gamma_h = \cos(\mathbf{K}_h, \mathbf{n}_s)$

e  $\mathbf{n}_s$  è la normale alla superficie  $SS$ .

Inoltre è

$$G = (-1)^\tau \left( \frac{\gamma_0}{|\gamma_h|} \right)^{1/2} \frac{\Phi_h}{|\Phi_h|} :$$

$\tau = 0$  a meno che non si consideri lo stato b) di polarizzazione con  $2\theta_0 > \frac{\pi}{2}$ , nel qual caso  $\tau = 1$ .

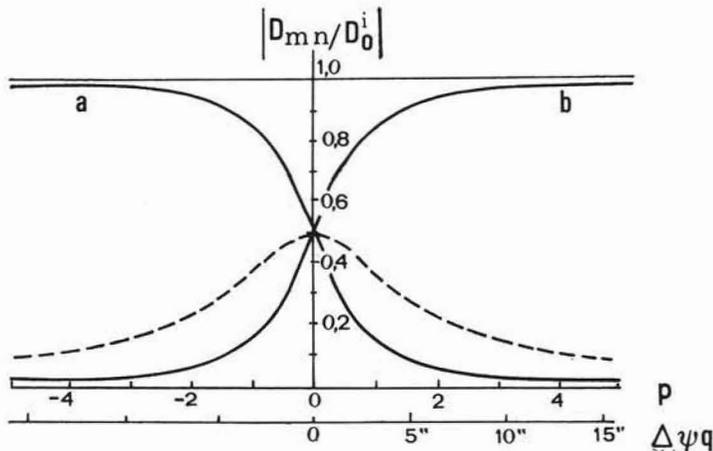


Fig. 4. — Valori di  $D_{mn}/D_0^i$  in funzione di  $p$  ( $|G|=1$ ). La curva *a* corrisponde a  $|D_{01}/D_0^i|$ , la curva *b* a  $|D_{02}/D_0^i|$ . La linea tratteggiata rappresenta l'andamento di  $|D_{h1}/D_0^i|$  o di  $|D_{h2}/D_0^i|$ .

Una rappresentazione tipica delle (20) è presentata in fig. 4: per valori grandi e positivi di  $p$   $A_2$  giace molto prossimo all'asintoto  $QT_0$ :  $D_{02}$  tende ad approssimare  $D_0^i$ , mentre  $D_{01}$ ,  $D_{h1}$ ,  $D_{h2}$  diventano trascurabili. Per valori grandi e negativi di  $p$  allo stesso modo l'unico treno d'onda effettivo è quello corrispondente a  $\mathbf{K}_{01}$ . In questi casi la situazione è del tutto banale: si è in presenza di un solo treno d'onda che rappresenta la trasmissione dell'onda incidente.

Se  $p$  diventa molto piccolo,  $A_1$  e  $A_2$  tendono a portarsi in  $B_1$  e  $B_2$ : (giacciono sulla normale alla superficie passante per  $Q$ ): per  $\delta\psi_q = 0$   $P^i_0$  coincide con  $P_q$  e si ha

$$D_{01} = D_{02} = \frac{1}{2} D_{0i} \quad D_{h1} = -\frac{1}{2} G D^i_0 \quad D_{h2} = \frac{1}{2} G D^i_0$$

Se in particolare i piani riflettenti sono ortogonali alla superficie ( $\chi = 0$ ,  $\gamma_0 = \gamma_h$ ), è  $|G| = 1$ , e i quattro campi hanno tutti la medesima ampiezza.

E' bene osservare che l'onda diffratta è eccitata entro un intervallo angolare finito ma molto stretto, dell'ordine dei 10-15 secondi d'arco.

Se l'onda incidente non è polarizzata, gli stati  $a$ ) e  $b$ ) possono essere trattati indipendentemente e le intensità dei campi relativi sommate per ottenere il risultato totale.

### Soluzione pendolare (Pendellösung).

La coerenza del campo all'interno del cristallo produce fenomeni di « battimento » fra treni d'onda propagantisi lungo una stessa direzione:  $\mathbf{D}_{01}$  e  $\mathbf{D}_{02}$ , così come  $\mathbf{D}_{h1}$  e  $\mathbf{D}_{h2}$ , costituiscono treni d'onda propagantisi lungo una medesima direzione con lunghezze d'onda leggermente diverse. Limitandoci a considerare lo stato  $a$ ) di polarizzazione e una condizione d'incidenza definita da  $p = 0$  si ha

$$(21) \quad \begin{cases} \mathbf{P}_0 = \mathbf{D}_{01} + \mathbf{D}_{02} = \mathbf{D}^i_0 \cos\left(\frac{\pi z}{\Delta_0}\right) \cos[2\pi(\nu t - \bar{\mathbf{K}}_0 \cdot \mathbf{r})] \\ \mathbf{P}_h = \mathbf{D}_{h1} + \mathbf{D}_{h2} = G \mathbf{D}^i_0 \sin\left(\frac{\pi z}{\Delta_0}\right) \sin[2\pi(\nu t - \bar{\mathbf{K}}_h \cdot \mathbf{r})] \end{cases}$$

dove  $\Delta_0 = \frac{(\gamma_0 |\gamma_h|)^{1/2}}{K |\Phi_h|}$  è il periodo di battimento per  $p = 0$ ,  $z$  è la profondità misurata lungo la normale alla superficie;

$$\bar{\mathbf{K}}_0 = \frac{1}{2} (\mathbf{K}_{01} + \mathbf{K}_{02}) \quad \text{e} \quad \bar{\mathbf{K}}_h = \frac{1}{2} (\mathbf{K}_{h1} + \mathbf{K}_{h2})$$

sono i vettori che congiungono  $Q$  con i nodi  $O$  e  $H$  del reticolo reciproco.

Le (21) mostrano che le ampiezze dei treni d'onda  $P_0$  e  $P_h$  variano periodicamente con  $z$  con periodo  $\Delta_0$ : i piani ventrali di  $P_0$  si hanno per  $z = m\Delta_0$  e i piani nodali per  $z = (m + 1/2)\Delta_0$ . I piani nodali di  $P_h$  coincidono con i piani ventrali di  $P_0$  e viceversa. I calcoli ci mostrano che  $\Delta_0$  è in genere dell'ordine delle decine di microns. La fig. 5 rappresenta questo fenomeno nel caso semplice di una riflessione simmetrica, cioè con piani riflettenti normali alla superficie del cristallo.

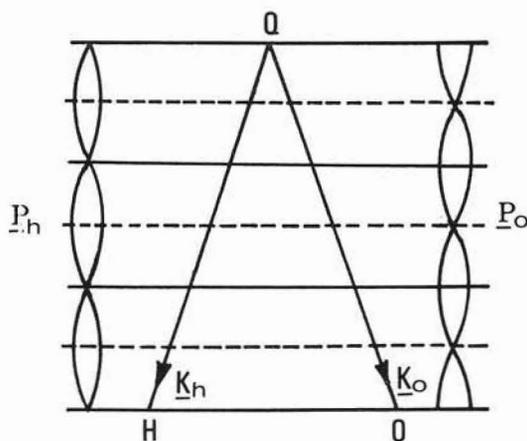


Fig. 5. — La soluzione pendolare per una riflessione simmetrica.

Le considerazioni precedenti ci portano a concludere che se immaginiamo di tagliare il cristallo sotto forma di una lamina di spessore  $m\Delta_0$ , dalla superficie inferiore emergerà il solo fascio  $P_0$  (fascio diretto) pur essendo nelle condizioni di massima interferenza ( $p = 0$ ). Il contrario avverrà se consideriamo una lamina di spessore  $(m + 1/2)\Delta_0$ .

La oscillazione periodica del fascio R.X. fu messa in rilievo per la prima volta da Ewald da cui prese il nome di « Pendellösung ».

### Propagazione dell'energia nel cristallo.

Se indichiamo con  $\mathbf{E}$  e con  $\mathbf{H}$  i campi elettrici e magnetici totali risultanti dalla sovrapposizione coerente dei campi  $\mathbf{K}_{01}$ ,  $\mathbf{K}_{02}$ ,  $\mathbf{K}_{h1}$ ,

$\mathbf{K}_{h2}$ , l'entità e la direzione del flusso d'energia elettromagnetica sono dati dal vettore di Poynting  $\mathbf{S}$ , definito da

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} \mathbf{E} \wedge \mathbf{H}.$$

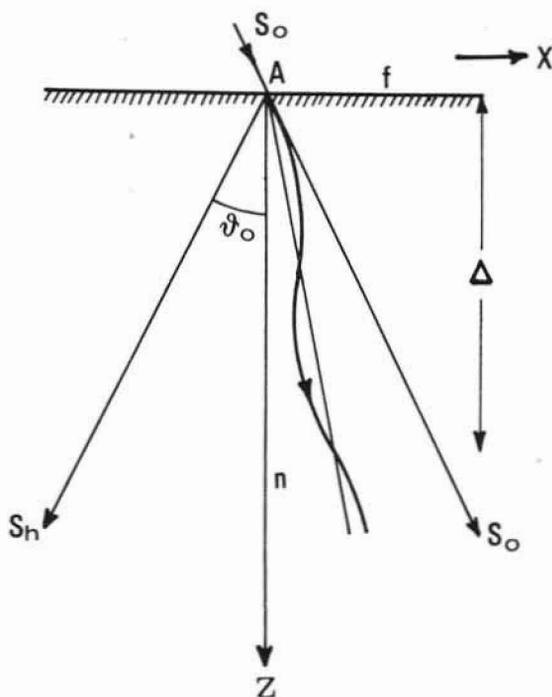


Fig. 6. — Linea di flusso per un generico valore del parametro d'incidenza  $p$ .

Poichè la conoscenza del vettore istantaneo  $\mathbf{S}$  è di poco significato, von Laue (1952) calcolò la quantità osservabile (sostituendo  $\mathbf{E}$  con  $\mathbf{D}$ )

$$(22) \quad \bar{\mathbf{S}} = \frac{c}{8\pi} R(\mathbf{D} \wedge \mathbf{H})$$

dove  $R$  denota la parte reale dell'espressione in parentesi: la (22) rappresenta la media temporale del flusso energetico su un tempo lungo rispetto al periodo delle onde e sulla cella elementare.

Trascurando i calcoli piuttosto laboriosi, metteremo in evidenza qualche risultato particolarmente interessante nel caso di riflessione simmetrica ( $\gamma_0 = \gamma_0 = \cos \theta_0$ ,  $|G|^2 = 1$ ).

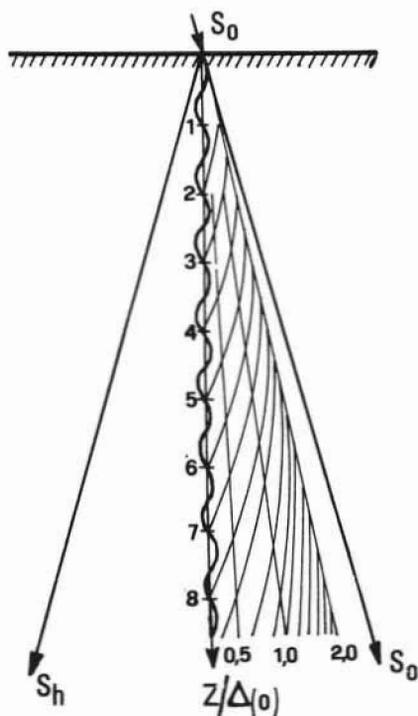


Fig. 7.

Adottando il sistema di coordinate rappresentato in figura, l'equazione di una linea di flusso è data, per un generico valore del parametro  $p$  (vedi fig. 6), da

$$(23) \quad X = Az + \frac{BA}{2\pi} \sin \frac{(2\pi z)}{A}$$

dove

$$A = \frac{1}{p^2 + 1} \operatorname{tg} \theta_0, \quad B = \frac{1}{p^2 + 1} \operatorname{tg} \theta_0.$$

La (23) rappresenta una linea sinusoidale che va da una parte all'altra della retta  $x = Az$  che possiamo chiamare *linea media di flusso*: questa, quando  $p = 0$  coincide con la normale alla superficie, ed è molto vicina a  $S_0$  per grandi valori di  $p$ , positivi o negativi.

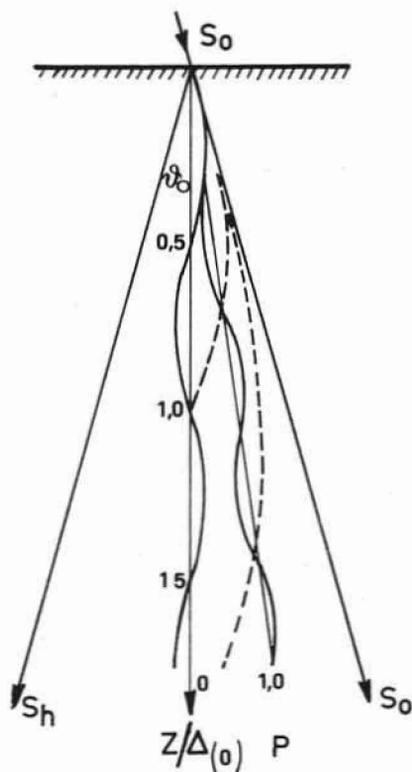


Fig. 8.

La linea di flusso incontra la linea media di flusso per  $z = m\Delta$  e  $z = (m + 1/2)\Delta$ : quando  $z = m\Delta$  la pendenza della curva è  $tg \theta_0$  e il flusso è parallelo a  $S_0$ ; quando  $z = (m + 1/2)\Delta$  la pendenza è  $\frac{p^2 - 1}{p^2 + 1} tg \theta_0$  (se  $p = 0$  la pendenza è  $-tg \theta_0$ ).

Ritroviamo così la soluzione pendolare di Ewald.

Il periodo di battimento, per un valore  $p$  del parametro d'incidenza è (vedi fig. 7)

$$\Delta(p) = \frac{\Delta_0}{(p^2 + 1)^{1/2}}$$

cioè decresce rapidamente al crescere di  $p$ . L'ampiezza dello swing dalla linea media di flusso in direzione parallela alla superficie è data da (vedi fig. 8)

$$a(p) = \frac{\Delta_0 \operatorname{tg} \Delta_0}{2\pi (p^2 + 1)^{3/2}}$$

In sostanza, come è da attendersi, il fenomeno oscillatorio decresce quando ci si allontana dal corretto angolo di Bragg.

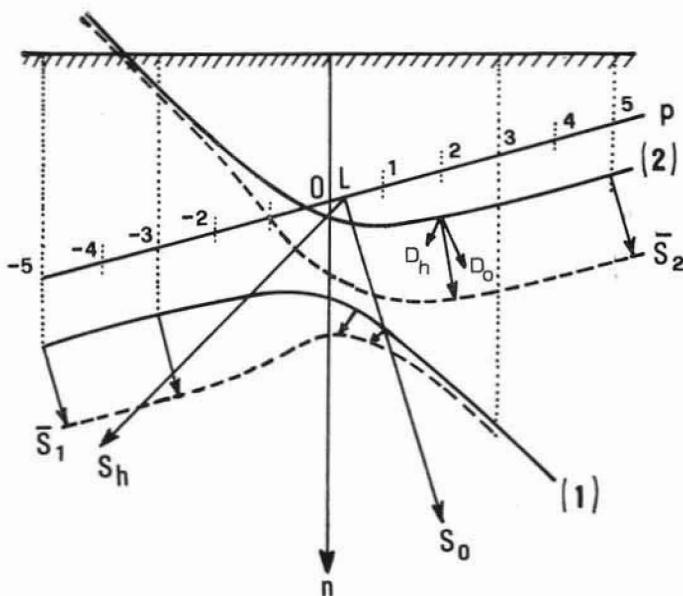


Fig. 9. — La direzione dei flussi di energia in relazione alla superficie di dispersione.

E' anche interessante considerare i flussi  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_2$  relativi ai punti d'onda  $A_1$  e  $A_2$  al variare di  $p$ . Kato (1961a, 1961b) ha mostrato che  $\mathbf{S}_1$  e  $\mathbf{S}_2$  sono normali all'iperbole nei corrispondenti punti d'onda. In fig. 9 è riportato a tratteggio il luogo delle estremità dei vettori  $\mathbf{S}_1$  e

**S<sub>2</sub>**: da questa figura sono facilmente ritrovabili molti dei risultati esposti precedentemente.

In molti casi sperimentali il fascio incidente ha una estensione laterale molto piccola rispetto alle dimensioni del cristallo. In questo caso (vedi fig. 10) i campi 1 e 2, benchè entrambi eccitati non si sovrappongono fisicamente, e quindi interferiscono solo nella zona di cristallo prossima alla superficie d'ingresso. Se  $p = 0$  i due campi si propagano lungo la stessa direzione e tutto procede come se l'esten-

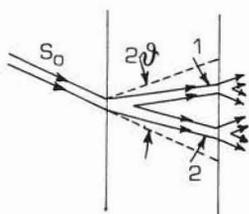


Fig. 10. — Separazione dei campi d'onda.

sione laterale del fascio incidente fosse infinita. Nel caso generale i due fasci attraversano il cristallo in direzioni definite e solo sulla faccia d'uscita prende posto la separazione in fascio trasmesso e diffratto: la direzione di  $\mathbf{S}_\alpha$ , per  $\alpha = 1, 2$ , dipende da  $\mathbf{D}_{0\alpha}$  e  $\mathbf{D}_{h\alpha}$  che, a loro volta, per le eq. (20), dipendono dalla deviazione dell'angolo di incidenza dall'esatto angolo di Bragg.

### Onda incidente sferica.

Il fascio di R-X emesso dall'anticatodo può in realtà essere considerato una sovrapposizione di onde sferiche incoerenti: lo studio della diffrazione deve pertanto essere riferito alla diffrazione di un'onda sferica più che a quello di un'onda piana (esperienze in onda piana sono state eseguite da Authier (1961), Lefeld-Sosnowska e Malgrange (1969), Sauvage e Malgrange (1970), ecc. tramite diffrattometro a doppio cristallo).

Seguendo Kato (1961a, b; 1968), si può rappresentare un'onda sferica propagantesi nella direzione dell'asse  $z$  tramite una sovrapposizione di onde piane del tipo

$$\frac{1}{4\pi} \frac{e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}}}{r} = \frac{i}{8\pi^2} \iint_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{K_z} \exp i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) dK_x dK_y$$

dove  $\mathbf{K}$  è il vettore d'onda nel vuoto,  $K_x$ ,  $K_y$  e  $K_z$  sono le componenti di  $\mathbf{K}$  in un opportuno sistema di riferimento e  $K_z = (K^2 - K_x^2 - K_y^2)^{1/2}$  è assunto positivo. Ogni onda piana polarizzata è diffratta indipen-

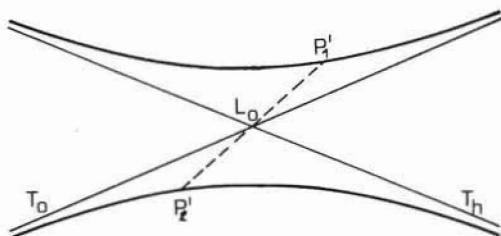


Fig. 11.

dentemente ed eccita all'interno del cristallo quattro treni d'onda  $D_{m,\alpha}$  per  $m=0, h$  e  $\alpha=1, 2$ :  
se poniamo

$$\mathbf{d}_0 = \sum_{1i}^2 D_{0i} \exp i[(\mathbf{K}_{0i} - \mathbf{K}) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)]$$

$$\mathbf{d}_h = \sum_{1i}^2 D_{hi} \exp i[(\mathbf{K}_{0i} - \mathbf{K}) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)]$$

dove  $\mathbf{r}$  è il vettore posizionale del punto d'osservazione e  $\mathbf{r}_0$  specifica un punto della superficie d'incidenza, il campo in un punto all'interno del cristallo si ottiene ponendo

$$(24) \quad \mathbf{D}_{0,h} = \frac{i}{8\pi^2} \iint_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{K_z} \mathbf{d}_{0,h}(\mathbf{K}, \mathbf{r}) \exp i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}) dK_x dK_y :$$

il fattore  $\mathbf{d}_{0,h}$  può essere interpretato come modulazione d'ampiezza del campo incidente.

Il problema di definire il campo all'interno del cristallo è pertanto un problema d'integrazione in uno spazio reciproco bidimensionale. Un'approssimazione asintotica può essere ottenuta tramite il metodo della fase stazionaria e porta a funzioni di Bessel complesse nel caso di un cristallo assorbente. Kato ha mostrato che l'ampiezza risul-

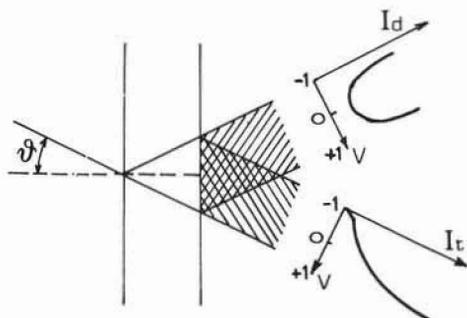


Fig. 12. — Distribuzione delle intensità trasmesse.

tante in un punto  $r$  può essere considerata la somma delle ampiezze di due onde aventi come punti d'onda i punti  $P_1$  e  $P'_2$  della superficie di dispersione (vedi fig. 11). La loro interferenza dà luogo a frange di tipo « pendellösung ». Tralasciando la laboriosa parte matematica, ci preme mettere in rilievo due interessanti risultati sperimentalmente convalidati.

1) Se indichiamo con  $\gamma$  l'angolo fra il flusso d'energia  $\mathbf{S}$  e il piano reticolare riflettente, il parametro  $v = \frac{\text{tg } \gamma}{\text{tg } \theta_n}$  considerato lungo la superficie d'uscita è tale che per  $v = \pm 1$  si va da una parte all'altra del triangolo di Borrmann ABC. La fig. 12 mostra la continuità della distribuzione delle intensità trasmesse  $I_t$  e diffatte  $I_d$ .

2) Le interferenze del tipo « pendellösung » danno luogo ad un set di iperboloidi i cui asintoti sono i lati del triangolo di Borrmann (vedi fig. 13). Il periodo  $\mathcal{A}$  del sistema di frange in una direzione  $\nu$

è specificato dai punti d'onda coniugati rispetto al centro dell'iperbole e risulta

$$\Delta = 2\pi / \{ \Delta \mathbf{K}(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{v} \}.$$

Queste frange sono sperimentalmente osservabili, ad esempio con la tecnica di Lang: se il cristallo è a cuneo si osserveranno sulla super-

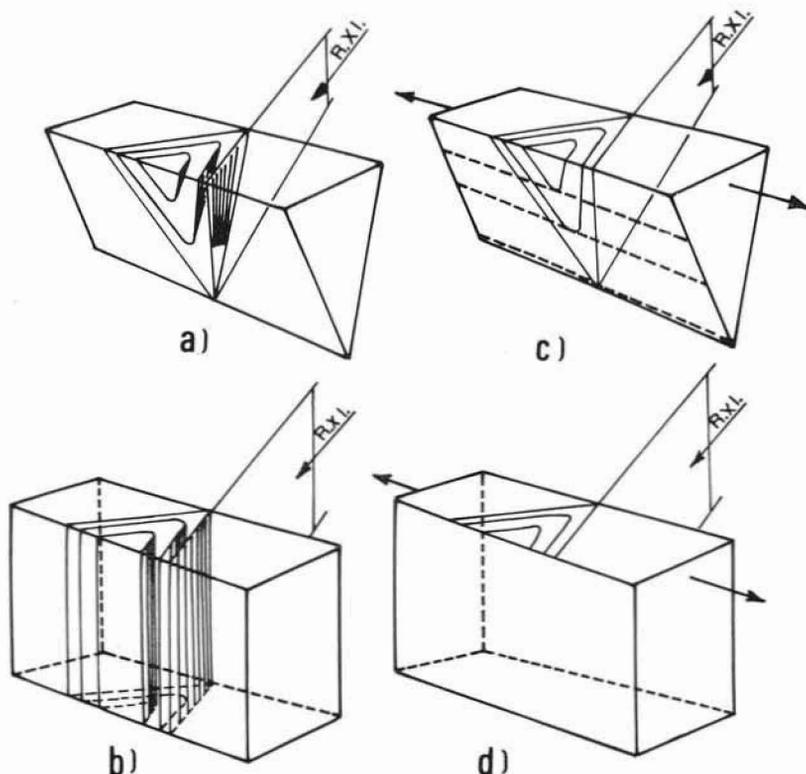


Fig. 13. — Frange pendellösung nella tecnica di Lang. a) e b) topografia di sezione c) e d) topografia di traslazione.

ficie d'uscita un set di iperboli, se è una lamina piatta delle rette parallele. L'animazione del cristallo di un moto di traslazione integra questi campi dando luogo alle figure di diffrazione disegnate in fig.13 c, d.

## BIBLIOGRAFIA

- AUTHIER A. (1961) - *Bull. Soc. Franc. Mineral. Crist.*, 84, 51.
- BATTERMANN B. W. e COLE H. (1964) - *Rev. Mod. Phys.*, 36, 681.
- BORRMANN G. (1959) - *Trends in Atomic Physics*, Interscience Publishers Inc., New York.
- DARWIN C. G. (1914) - *Phil. Mag.* [6], 27, 315, 675.
- EWALD P. P. (1916) - *Ann. Physik* [4], 49, 1, 117.
- EWALD P. P. (1917) - *Ann. Physik* [4], 54, 159.
- JAMES R. W. (1963) - *Solid State Physics*, 15, 53.
- KATO N. (1960) - *Acta Cryst.*, 13, 349.
- KATO N. (1961a) - *Acta Cryst.*, 14, 526.
- KATO N. (1961b) - *Acta Cryst.*, 14, 627.
- KATO N. (1968) - *Acta Geologica et Geographica Universitatis Comenianae*, Bratislava.
- VON LAUE M. (1931) - *Naturwissenschaften*, Dtsch., 10, 1933.
- VON LAUE M. (1949) - *Acta Cryst.*, 2, 106.
- VON LAUE M. (1952) - *Acta Cryst.*, 5, 619.
- VON LAUE M. (1960) - *Röntgenstrahl - Interferenzen*. Akad. Verlagsges. Leipzig.
- LEFELD-SOSNOWSKA M. e MALGRANGE C. (1969) - *Phys. stat. sol.*, 34, 635.
- SAUVAGE M. e MALGRANGE C. (1970) - *Phys. stat. sol.*, 37, 759.