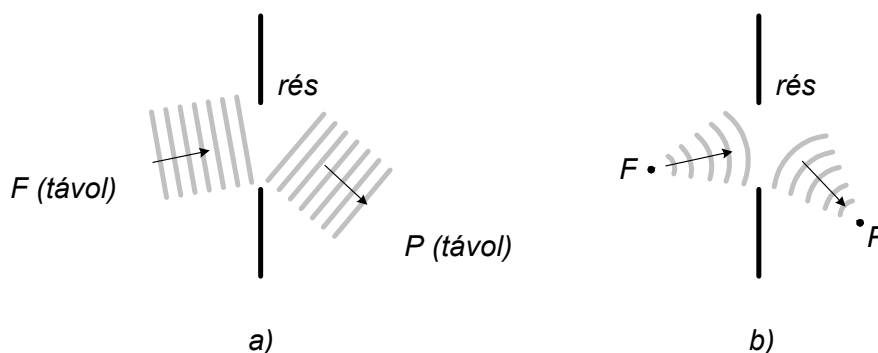


Fényelhajlás (diffrakció)

Mint minden hullámnál, a fény esetében is megfigyelhető az a jelenség, hogy a hullámhosszal összemérhető akadályok és rések vagy élek mentén haladva a hullámterjedés nem egyenes vonalú, a hullám behatol az egyenes vonalú terjedésnek megfelelő árnyéktérbe. A fény esetén az elhajlás nagyon fontos szerepet játszik, meghatározza vagy alapvetően befolyásolja számos optikai eszköz működését, és emellett látványos optikai jelenségeket produkál. Itt csupán néhány alapvető jelenséggel foglalkozunk, és megismerkedünk néhány módszerrel, amely alkalmas a fényelhajlás tárgyalására.

A fényelhajlásnak két szélső esetét szokás megkülönböztetni.

- Az egyik esetben az akadályhoz vagy réshez érkező- és az onnan távozó, elhajlást szenvedett hullám gyakorlatilag síkhullám (*a* ábra). A fényelhajlásnak ezt az esetét *Fraunhofer-elhajlásnak*¹ vagy *Fraunhofer-diffrakciónak* nevezik. Közelítőleg ilyennek tekinthető a fényelhajlás, ha a hullám nagyon távoli forrásból (*F*) érkezik a réshez vagy akadályhoz, és a megfigyelési pont (*P*) is nagyon távol van tőle.
- A másik esetben vagy a fényforrás (*F*) vagy a megfigyelési hely (*P*) olyan közel van a réshez vagy akadályhoz, hogy a beérkező- vagy a megfigyelő irányába távozó fényhullám nem tekinthető síkhullámnak (*b* ábra). Az ilyen fényelhajlást *Fresnel-elhajlásnak* vagy *Fresnel-diffrakciónak* nevezik.

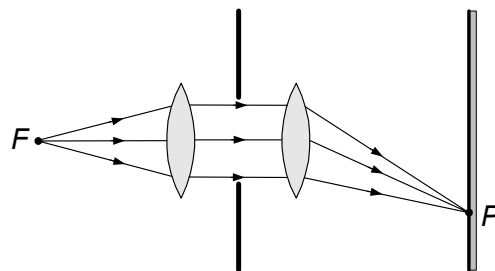


A valóságban az elhajlásjelenségek nem mindig sorolhatók egyszerűen valamelyik csoportba, és a pontossági igények döntenek el, hogy használhatók-e az egyszerűbb Fraunhofer-diffrakcióra vonatkozó összefüggések, vagy a jelenséget Fresnel-diffrakciónak kell tárgyalni.

Itt részletesebben csak a Fraunhofer-diffrakció néhány fontosabb esetét tárgyaljuk, a Fresnel-diffrakció problémakörével csak nagyon röviden foglalkozunk.

Fraunhofer-diffrakció

A gyakorlatban az elhajlásnak ez az esete úgy valósítható meg, hogy egy pontszerű fényforrásból (*F*) érkező fényt gyűjtőlencsével párhuzamos nyalábbá (síkhullámmá) alakítunk, majd az elhajlás után a párhuzamos nyalábokat egy másik lencsével összegyűjtjük (ábra). Így biztosítható, hogy az elhajlásban síkhullámok vegyenek részt.



¹ Joseph FRAUNHOFER (1787-1826) német fizikus.

Fraunhofer-diffrakció hosszú, keskeny résen

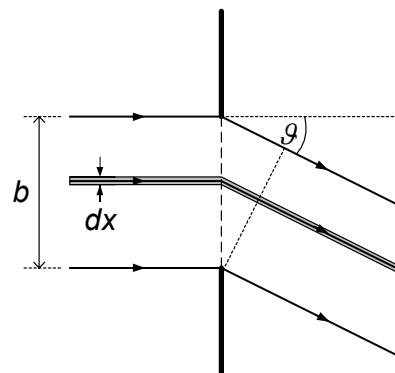
Első példaként egy keskeny résen áthaladó hullám elhajlását vizsgáljuk meg a Huygens–Fresnel-elv alkalmazásával. A réshez érkező hullámfront minden pontját elemi gömbhullámok forrásaként fogjuk fel, és az elhajlási képet ezeknek a hullámoknak az interferenciájából számítjuk ki. Feltételezzük, hogy a résre síkhullám esik, és az interferencia eredményét a résről nagyon távoli pontokban szemléljük (vagy a diffraktált sugarakat lencsével összegyűjtjük). Mivel a rés hosszú, a résre merőlegesen minden síkban ugyanaz történik, tehát elég a hullámfrontnak egy résre merőleges metszetét (ami egy egyenes) vizsgálni.

A számítást az nehezíti, hogy a réshez érkező hullámfront minden pontja hullámforrás, így az elhajlás számításához végtelen sok koherens pontforrás interferenciáját kell figyelembe venni. Ezt a problémát úgy oldhatjuk meg, hogy a résen áthaladó fénynyalábot nagyon keskeny sávokra osztjuk, az egyes sávokat tekintjük pontforrásnak, és ezek hatását összegezzük. Így a problémát visszavezethetjük a pontforrás-sorból jövő hullámok interferenciájára.

Az ábrán a résre merőleges síkmetszetet látunk, ahol feltüntettünk egy ilyen elemi, dx szélességű sávot is.

Egymástól a távolságra lévő pontforrások esetén az eredő amplitúdóra azt kaptuk, hogy

$$A = A_0 \frac{\sin\left(N \frac{\delta}{2}\right)}{\sin \frac{\delta}{2}}, \quad \text{ahol } \delta = \frac{2\pi a}{\lambda} \sin \vartheta.$$



Ha csak kis szögeltéréseket vizsgálunk, akkor használhatjuk a $\sin \frac{\delta}{2} \approx \frac{\delta}{2}$ közelítést, amivel az amplitúdó így alakul

$$A = 2 A_0 \frac{\sin\left(N \frac{\delta}{2}\right)}{\delta} = 2 A_0 \frac{\sin\left(N \frac{\pi a}{\lambda} \sin \vartheta\right)}{\frac{\pi a}{\lambda} \sin \vartheta}.$$

A kis szögeltérés gyakorlatilag teljesül, mert a megfigyelési pont távol van, és közönséges fényforrásoknál a diffrakciós kép egyébként is csak keskeny szögtartományban figyelhető meg.

A résre alkalmazott modellben a pontforrásokat helyettesítő elemi sávok középpontjai egymástól dx távolságra vannak, vagyis az $a \Rightarrow dx$ helyettesítéssel élhetünk. Az elemi források számát a $\frac{b}{dx}$ hányados adja meg tehát N helyettesítésére írhatjuk, hogy

$N \Rightarrow \frac{b}{dx}$. Az elemi források amplitúdóját arányosnak tekinthetjük a szélességükkel, tehát a b szélességű résnél létrejött teljes A_t amplitúdóból a források amplitúdóját az $\frac{A_t}{b} dx$ összefüggéssel számíthatjuk ki. Így alkalmazhatjuk az $A_0 \Rightarrow \frac{A_t}{b} dx$ helyettesítést.

A fenti helyettesítésekkel az amplitúdóra azt kapjuk, hogy

$$A = \frac{A_t}{b} dx \frac{\sin\left(\frac{b}{dx} \frac{\pi dx}{\lambda} \sin \vartheta\right)}{\frac{\pi dx}{\lambda} \sin \vartheta} = A_t \frac{\sin\left(\frac{b\pi}{\lambda} \sin \vartheta\right)}{\frac{b\pi}{\lambda} \sin \vartheta}.$$

Az intenzitás ebből négyzetre emeléssel kapható:

$$I = A_t^2 \left[\frac{\sin\left(\frac{b\pi}{\lambda} \sin \vartheta\right)}{\left(\frac{b\pi}{\lambda} \sin \vartheta\right)} \right]^2 = A_t^2 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2,$$

ahol $u = \frac{b\pi}{\lambda} \sin \vartheta$.

Tudjuk, hogy a $\vartheta = 0$ szögnél a hullámok erősítik egymást (nincs útkülönbség), ezért ott maximális intenzitás (I_{max}) jön létre. Mivel a $\vartheta \rightarrow 0$ esetben $u \rightarrow 0$, az intenzitás kifejezéséből látszik, hogy

$$\lim_{\vartheta \rightarrow 0} I(\vartheta) = \lim_{u \rightarrow 0} A_t^2 \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2 = A_t^2 = I_{max}$$

Ezzel a jelöléssel az intenzitás:

$$I = I_{max} \frac{\sin^2\left(\frac{b\pi}{\lambda} \sin \vartheta\right)}{\left(\frac{b\pi}{\lambda} \sin \vartheta\right)^2}.$$

Az elhajlási kép jellegzetességeit az

$$I = I_{max} \frac{\sin^2 u}{u^2} = I_{max} \left(\frac{\sin u}{u} \right)^2$$

függvény vizsgálatából kaphatjuk meg (itt $u = \frac{b\pi}{\lambda} \sin \vartheta$).

Eszerint az intenzitás nulla az $u = n'\pi$ helyeken (n' egész szám), kivéve az $n'=0$ esetet, hiszen ekkor $\lim_{u \rightarrow 0} \frac{\sin u}{u} = 1$ miatt maximális az intenzitás. Ez azt jelenti, hogy az intenzitás azokban az irányokban nulla, amelyekre fennáll, hogy

$$u = \frac{b\pi}{\lambda} \sin \vartheta_{n'} = n'\pi,$$

azaz

$$b \sin \vartheta_{n'} = n' \lambda \quad (n'=1, 2, 3, \dots).$$

A maximumhelyek a minimumok között helyezkednek el, pontos helyüket a

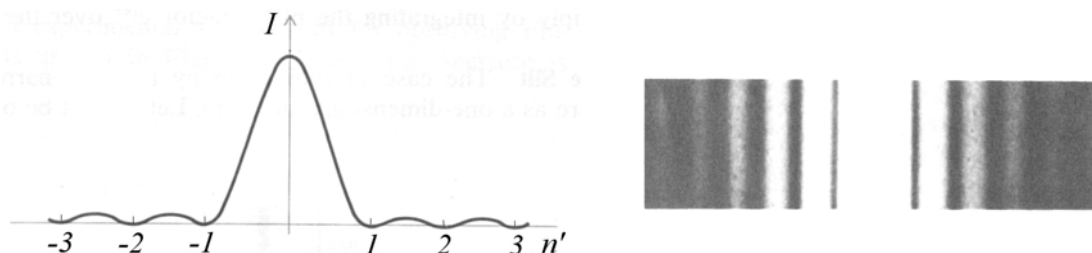
$$\frac{dI(u)}{du} = 0$$

egyenletből határozhatjuk meg, ami a

$$tgu = u$$

transzcendens egyenlethez vezet. Ennek megoldásával nem foglalkozunk, annyi azonban így is látszik, hogy a növekvő u (növekvő ϑ) értékekhez tartozó maximumok magassága egyre kisebb és kisebb, mert az intenzításra fennáll, hogy $I \sim \frac{1}{u}$. Ezeket

a csökkenő magasságú maximumokat szemlélteti a baloldali ábra az $n' = \frac{b \sin \vartheta_n'}{\lambda}$ függvényében. A tapasztalat igazolja ezt az eredményt: ha egy keskeny, hosszú résen

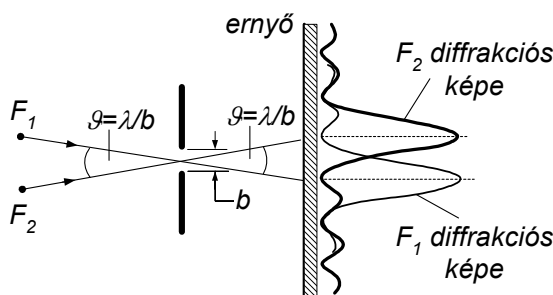


áthaladt fény diffrakciós képét ernyőre kivetítjük, akkor közepén erős világos csíkot, ennek két oldalán pedig egymástól sötét csíkkal elválasztott, egyre halványabb világos csíkokat látunk (jobboldali ábra).

Érdeemes megvizsgálni azt az esetet, amikor $\lambda \ll b$. Ekkor a főmaximum két oldalán látható első minimumok irányára jó közelítéssel érvényes, hogy $\sin \vartheta_1 \approx \vartheta_1 = \pm \frac{\lambda}{b}$.

Ennek felhasználásával a résnek egy fontos optikai jellemzőjét lehet meghatározni.

Ha egy résen két távoli F_1 és F_2 forrásból (pl. egy távoli tárgy két pontjából) érkező fény halad át, akkor mindkettő elhajlási képet hoz létre (ábra). A két elhajlási kép általában egymásra rakódik, és a kérdés az, hogy milyen feltételek mellett tudjuk megkülönböztetni egymástól a két képet. A megkülönböztetés annál könnyebb, minél tovább vannak egymástól az elhajlási képek maximumai.



A megfigyelhetőséghez szükséges minimális távolságot adja meg a *Rayleigh-kritérium*¹: a két kép akkor különböztethető meg egymástól, ha a két maximum távolsága legalább annyi, hogy az egyik elhajlási kép maximuma a másiknak az első minimumával esik egybe (ábra). Mivel egy b szélességű résnél az első minimum iránya a fentiek szerint $\vartheta_1 \approx \frac{\lambda}{b}$, két távoli pont

képe akkor különböztethető meg egymástól, ha a résre érkező sugarak szöge nagyobb, mint

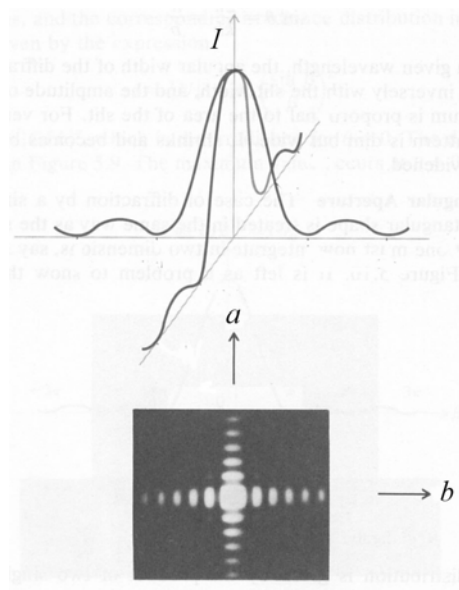
$$\vartheta \approx \frac{\lambda}{b}.$$

Ezt a mennyiséget a *rés felbontóképességének* nevezik.

A felbontóképességnek komoly szerepe van az – általában nyílásokat tartalmazó – optikai eszközöknél. Így pl. egy mikroszkópban a vizsgált tárgynak csak olyan pontjai különböztethetők meg, amelyekre teljesül a Rayleigh-kritérium. Vagyis a lencserendszer geometriai nagyítását egy bizonyos határon túl hiába növeljük, a rés felbontóképessége határt szab annak, hogy milyen részleteket tudunk megfigyelni (a nagyítás ezen a határon túl "üres nagyítás" lesz).

¹ Lord John William Strutt RAYLEIGH (1842-1919) Nobel-díjas (1904) angol fizikus.

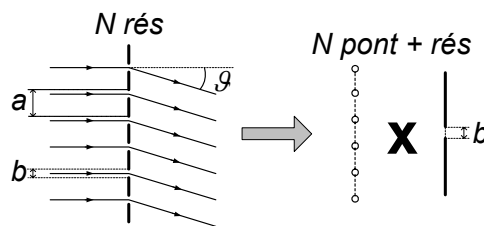
Ha hosszú, keskeny rés helyett egymással összemérhető a és b oldalhosszúságú, téglalap alakú nyílás elhajlási képét vizsgáljuk, akkor a számítások és a tapasztalat is azt mutatja, hogy két egymásra merőleges elhajlási kép keletkezik, amelyek mindegyike hasonlít a rés elhajlási képéhez. Az ábra felső része az intenzitáseloszlás jellegét mutatja, az alsó részen pedig egy ernyőre vetített elhajlási kép látható.



Fraunhofer-diffrakció több résen, a diffrakciós rács

Elvi és gyakorlati szempontból is érdekes, hogy mi történik, ha a hullám egy síkba eső, egymástól azonos távolságban lévő, párhuzamos részek sorozatán halad át. Az ilyen rés-sorozat általában *rácsnak* nevezik, fényhullámok esetén *optikai rács* elnevezés használatos.

Ha a részek hosszúak, akkor a réskekkel párhuzamosan haladva mindenütt ugyanazt az intenzitást találjuk, ezért elég az elrendezésnek a részekre merőleges síkmetszetét vizsgálni (ábra). A részek szélessége b , a részek azonos helyzetű pontjainak egymástól mért távolsága a , amit *rácsállandónak* neveznek.



Ha a részek vonalszerűek lennének, akkor ez a síkmetszet pontforrásoknak felelne meg, így az ennek megfelelő interferenciakép jönne létre. Mivel azonban a valódi részek mindig véges szélességűek, síkmetszetük nem tekinthető egyetlen pontforrásnak, hiszen a véges méretű részek minden pontja elemi hullámok forrásaként működik. Az eredő intenzitáseloszlást a részekből kiinduló elemi hullámok interferenciája adja meg.

Szerencsére az eddig tárgyalt esetek segítségével az intenzitáseloszlás egyszerűen meghatározható. Kimutatható ugyanis (a bizonyítással itt nem foglalkozunk), hogy több résen bekövetkező fényelhajlás a réskekkel azonos számú (az ábrán N) *pontszerű* forrásból jövő fény interferenciájából származó intenzitásnak (I_{Npont}) és *egyetlen résen* keletkező elhajlási kép intenzitásának ($I_{rés}$) ismeretében egyszerűen megkapható. A részletes számítások szerint a két résen áthaladt fény I intenzitására a fenti két intenzitásból egy

$$I \sim I_{Npont} \cdot I_{rés}$$

alakú kifejezést kapunk.

N darab egymástól a távolságban lévő pontforrásból jövő fény interferenciáját már vizsgáltuk, és megállapítottuk, hogy az intenzitáseloszlást az

$$I_{Npont} = I_{0p} \frac{\sin^2\left(\frac{N\pi a}{\lambda} \sin \vartheta\right)}{\sin^2\left(\frac{\pi a}{\lambda} \sin \vartheta\right)}$$

összefüggés adja meg.

Az egyedül álló rés diffrakciós képének intenzitáseloszlására azt kaptuk, hogy

$$I_{rés} = I_{max} \frac{\sin^2\left(\frac{b\pi}{\lambda} \sin \vartheta\right)}{\left(\frac{b\pi}{\lambda} \sin \vartheta\right)^2}.$$

Ennek megfelelően a rács mögött kialakuló intenzitáseloszlást az

$$I = I_0 \frac{\sin^2\left(\frac{b\pi}{\lambda} \sin \vartheta\right) \sin^2\left(\frac{N\pi a}{\lambda} \sin \vartheta\right)}{\left(\frac{b\pi}{\lambda} \sin \vartheta\right)^2 \sin^2\left(\frac{\pi a}{\lambda} \sin \vartheta\right)}$$

összefüggéssel adhatjuk meg.

Ez az összefüggés úgy fogható fel, hogy az N pontforrás interferenciájából adódó azonos magasságú maximumok sorozatát (a kifejezés második tényezője) *modulálja* a rés diffrakciójából származó – a szélek felé csökkenő magasságú maximumokat tartalmazó – eloszlás (az első tényező).

A főmaximumok irányát most is az N pontforrásra érvényes

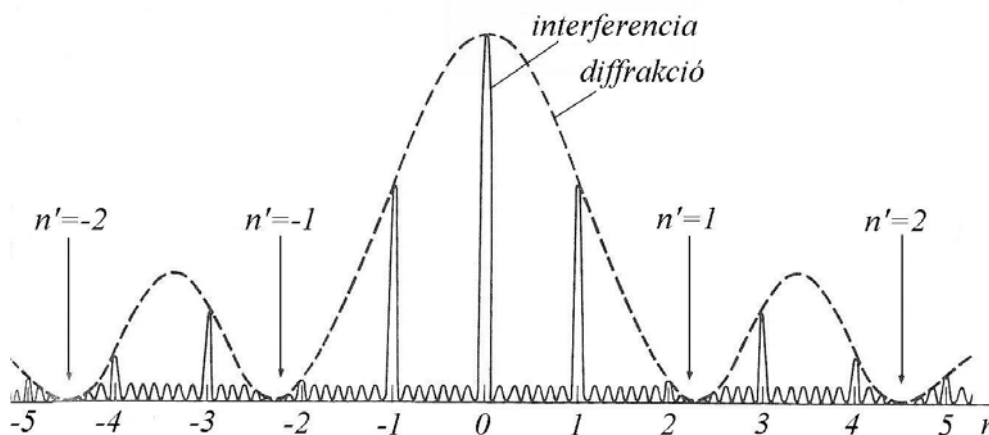
$$a \sin \vartheta_n = n\lambda \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3...)$$

egyenletből kaphatjuk meg, a moduláló rés-intenzitáseloszlásának nullhelyei pedig a

$$b \sin \vartheta_{n'} = n'\lambda \quad (n' = \pm 1, \pm 2, \pm 3...)$$

összefüggésnek megfelelő irányokban helyezkednek el.

Az ábra a rács diffrakciós képének megfelelő intenzitáseloszlást mutatja.

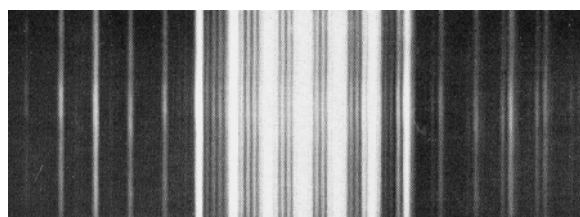


A pontforrások interferenciájának megfelelő maximumok a vízszintes tengelyen feltüntetett $n = \frac{a \sin \vartheta_n}{\lambda}$ számoknál láthatók, a rés diffrakciójából származó nulla

intenzitású helyeket pedig az $n' = \frac{b \sin \vartheta_{n'}}{\lambda}$ számok jelölik. Látható, hogy a

pontforrásoknál kapott azonos magasságú, egyenletesen elhelyezkedő főmaximumok helyett – a rés-diffrakció moduláló hatása miatt – csökkenő magasságú főmaximumok jelennek meg.

Ha a diffrakciós képet ernyőn



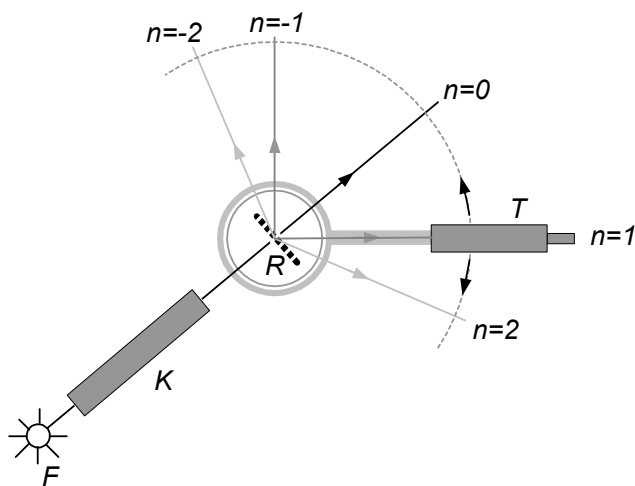
megjelenítjük, akkor a fenti összefüggésnek megfelelő világos és sötét csíkokat kapunk (ábra).

Eddig olyan rácsról beszéltünk, amelynek résein a fényhullám áthalad. Az ilyen rácsot *transzmissziós (áteresztő) rácsnak* nevezik. Lehet azonban olyan rácsot is készíteni, amely keskeny, párhuzamos tükröző sávokból és a közöttük elhelyezkedő nem tükröző részekből áll. Ilyenkor *reflexiós (tükröző) rácsot* kapunk, amelynél a tükröző sávokról visszaverődő hullámok hozzák létre a diffrakciós képet (a diffrakciós kép ilyenkor nem a rács mögött, hanem előtte keletkezik).

Az $a \sin \vartheta_n = n\lambda$ összefüggésből látható, hogy egy rács diffrakciós maximumainak iránya függ a hullámhossztól, vagyis ismert a rácsállandójú rács diffrakciós képéből meghatározva valamelyik főmaximum irányát ϑ_n -t, a hullámhossz meghatározható.

Ha a rácsra különböző hullámhosszakot (különböző színeket) tartalmazó fényt bocsátunk, akkor a különböző hullámhosszakhoz tartozó főmaximumok különböző irányokban – vagyis az ernyőn különböző helyeken – jelennek meg, így meghatározhatók az összetevő hullámok frekvenciái, vagyis az adott fény *spektruma*.

A rácsnak ezen a tulajdonságán alapul az optikában fontos szerepet játszó *rács-spektrométerek* működése. Egy transzmissziós rács-spektrométer elrendezésének vázlatát mutatja az ábra. A vizsgálandó fény az F fényforrásból egy kollimátorba jut, amely párhuzamos sugárnyalábot állít elő. Ez a fény esik az R rácsra, ahol létrejön a diffrakció. A rendszerre bocsátott fény rendszerint az ábra síkjára merőleges résen megy át, ezért a



maximumok az ábra síkjára merőleges vonalak, amelyeket egy körbeforgatható T távcsőben figyelnek meg. Az egyes n értékekhez tartozó maximumokat a diffrakció n -edik rendjének nevezik, a teljes hullámhossztartományban megfigyelhető vonalak összessége a *spektrum*.

A spektrométerekben használt optikai rácsok rácsállandójának nagyon kicsinek kell lennie, mert értékelhető diffrakciós képet csak akkor kapunk, ha a rácsállandó a hullámhosszal összemérhető. Látható fény esetén ez μm nagyságrendű rácsállandót jelent. Transzmissziós rács egy üveglemezen párhuzamos karcolásokkal hozható létre, ebben az esetben a karcolások között épen maradt, áteresztő sávok a rések. Reflexiós rács hasonló módon készíthető tükröző fémfelület karcolásával, a diffrakciót adó részek itt is a karcolások közötti tükröző sávok.

A maximumhelyek irányát megadó $\sin \vartheta_n = \frac{n\lambda}{a}$ összefüggésből látszik, hogy rács

esetén az eltérítés szöge annál nagyobb, minél nagyobb a hullámhossz. A rács tehát a látható fény vörös összetevőjét téríti el legjobban. A prizmás spektrométereknél, amelyek a törésmutató frekvenciafüggésén alapulnak, az eltérítés fordított, itt a vörös fény eltérítése a legkisebb.

Az optikai rács fontos jellemzője, hogy mennyire képes szétválasztani a különböző hullámhosszú hullámok diffrakciós képének főmaximumait. Ezt a $D = \frac{d\vartheta}{d\lambda}$ mennyiséggel jellemzik, amit a rács *diszperziójának* neveznek. Ezt a $\sin \vartheta = \frac{n\lambda}{a}$ összefüggés differenciálásával kaphatjuk meg:

$$\frac{d(\sin \vartheta)}{d\vartheta} = \cos \vartheta = \frac{n}{a} \frac{d\lambda}{d\vartheta}.$$

Eszerint a rács hullámhossz szétválasztó képességét jellemző diszperzió

$$D = \frac{d\vartheta}{d\lambda} = \frac{n}{a \cos \vartheta},$$

ami a diffrakció n rendjével növekszik.

Röntgensugarak elhajlása kristályban

A rácson bekövetkező hullámelhajlás speciális, az anyagok szerkezetének vizsgálatában alapvető szerepet játszó esete a röntgensugarak elhajlása kristályban.

A kristályos anyagokban az atomok szabályos rendben helyezkednek el, kristályrácsot alkotnak. Ha egy kristályra elektromágneses hullámot bocsátunk, akkor a hullám számára ez a struktúra térbeli rácsot jelent, amelyen diffrakció következik be. Ahhoz, hogy a diffrakciós kép értékelhető legyen, az szükséges, hogy a hullámhossz összemérhető legyen a rácsot alkotó atomok távolságával. Mivel a kristályokban az atomtávolságok jellemzően *0,1 nanométer* nagyságrendűek, ez a feltétel a röntgensugárzás tartományába eső elektromágneses hullámok esetén teljesül.

Tudjuk, hogy egy vonalszerű rács esetén a diffrakciós kép jellege (maximumok helyzete és intenzitása) függ a rácsállandótól, ezért várható, hogy a térbeli rácson bekövetkező elhajlási kép függ a kristálybeli atomok elhelyezkedésétől. Ennek alapján a kristályon áthaladó röntgensugárzás diffrakciós képének elemzésével lehetőség nyílik az atomok elhelyezkedésének, a kristály szerkezetének meghatározására.

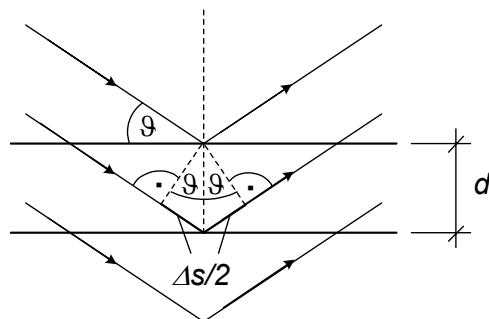
A röntgensugarak elhajlása eléggé bonyolult folyamat, amely részleteiben a röntgensugarak és az atomok kölcsönhatásának vizsgálata alapján érthető meg. Az elhajlás azonban értelmezhető egy egyszerű modell segítségével is.

A modell szerint, ha egy kristályra röntgensugárzást bocsátunk, akkor az a visszaverődés szabályai szerint visszaverődik az atomok által alkotott rácssíkokról. A szomszédos, párhuzamos rácssíkokról visszavert hullámok között útkülönbség jön létre (ábra), ezért az interferencia következtében bizonyos irányokban intenzitásmaximumokat észlelünk. A hullámok akkor erősítik egymást, ha Δs útkülönbségükre fennáll, hogy $\Delta s = n\lambda$ (n egész szám). Ha a hullámterjedés iránya és a rácssík közötti szöget ϑ -val jelöljük, akkor az ábra alapján az útkülönbség

$$\frac{\Delta s}{2} = d \sin \vartheta.$$

Erősítés tehát olyan irányokban jön létre, amelyekre

$$2d \sin \vartheta_n = n\lambda$$

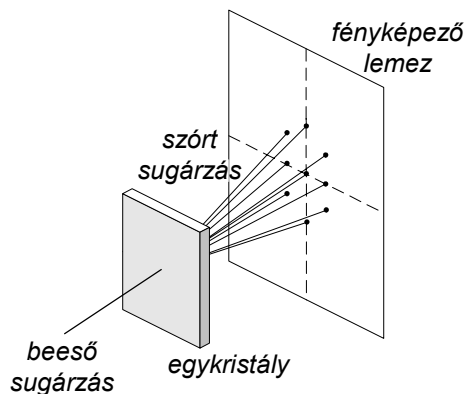


(d a párhuzamos rácssíkok távolsága, n egész szám). Ez a röntgendiffrakciós vizsgálatok egyik alapegyenlete, amit *Bragg-egyenletnek*¹ neveznek.

Ha a kristályra ismert λ hullámhosszú monokromatikus röntgensugárzást bocsátunk, és a maximális intenzitás ϑ irányait meghatározzuk, akkor a Bragg-egyenletből a rácssíkok d távolsága kiszámítható.

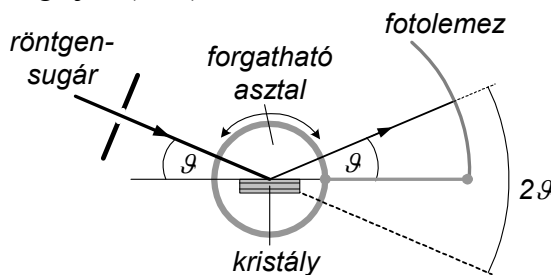
A szerkezetvizsgálat gyakorlati megvalósítására többféle eljárást dolgoztak ki.

Az első ilyen vizsgálatokat *Laue*² megfontolásait követve végezték el. A Laue-módszernél egykristályos mintára széles spektrumú röntgensugárzást bocsátottak, és a kristályon áthaladt sugárzás intenzitáseloszlását vizsgálták. A Bragg-féle feltétel így a különböző hullámhosszak és rácssík-távolságok bizonyos kombinációi esetén biztosan teljesül, és az áteresztett sugárzásban lesznek maximális intenzitású irányok. A fényképezőlemezen a maximális intenzitású irányokat szabályosan elhelyezkedő pöttyök jelzik. A kapott kép elemzéséből a kristály szerkezetére lehet következtetni. Az eljárás vázlatja a mellékelt ábrán látható.



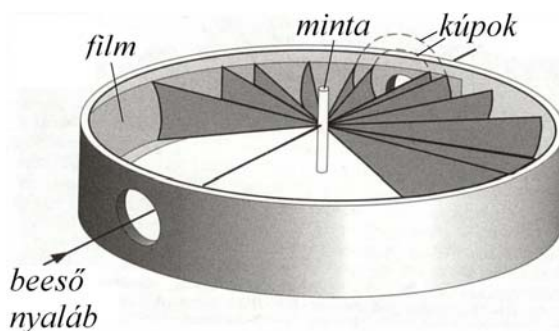
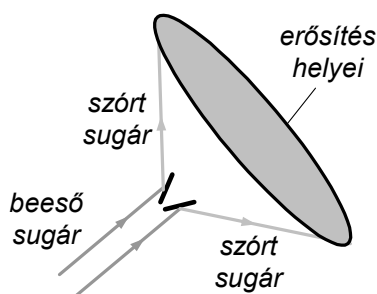
A Bragg-módszernél egykristályos mintára monokromatikus röntgensugárzást bocsátanak, és a visszaverődött sugárzást vizsgálják (ábra). A maximális intenzitásnak megfelelő szög megméréseivel a Bragg-egyenletből a megfelelő rácssík-távolság meghatározható.

Mivel a kristályban az atomokra sokféle sík fektethető, a kristály forgatásával különböző rácssík-seregek diffrakciós képeit és síktávolságait kaphatjuk meg. Különböző rácssík távolságok ismeretében a kristály szerkezete meghatározható.



Kidolgoztak olyan eljárást is, amelynél mintaként polikristályos anyag is használható.

Ez a Debye³-Scherrer¹-módszer. Ennél az eljárásnál a polikristályos mintán áthaladt monokromatikus röntgensugárzás intenzitáseloszlását vizsgálják. Mivel a mintában mindenféle orientációjú kristallitok megtalálhatók, adott síksereghez tartozó Bragg-feltételt különböző helyzetű kristallitok teljesítik (pl. a baloldali ábrán látható kettő).



¹ William Henry BRAGG (1862-1942) és fia William Lawrence BRAGG (1890-1971) angol fizikusok, mindketten Nobel-díjasok (1915).

² Max von LAUE (1879-1960) Nobel-díjas (1914) német fizikus.

³ Peter Joseph Willem DEBYE (1884-1966) Nobel-díjas (1936), holland származású, amerikai fizikokémikus.

Emiatt ugyanazon síksereghez tartozó maximális intenzitású sugarak egy kúpfelületen helyezkednek el, és egy nagyobb méretű fotólemezeken köröket alkotnak. Az egyszerűség kedvéért a nagyobb méretű fotólemez helyett gyakran csak egy köralakban meghajlított filmszalagot használnak (jobboldali ábra), amelyen a köröknek csak egy darabja látszik, vagyis körök helyett csíkokat látunk.

A Bragg- és a Debye–Scherrer-módszerhez elvileg monokromatikus (gyakorlatilag egy szűk hullámhossz-tartományba eső) röntgensugárzásra van szükség. Ennek előállítása szintén kristályon bekövetkező diffrakció segítségével történhet. Ha ismert rácsállandójú kristályra sokféle hullámhosszt tartalmazó röntgensugárzást bocsátunk, akkor a diffrakció következtében az egyes hullámhosszakhoz tartozó maximális intenzitások különböző irányban jelennek meg. Így az irány megválasztásával a számunkra szükséges hullámhossz kiválasztható. Az ilyen, közel monokromatikus sugárzás előállítására szolgáló eszközöket *monokromátoroknak* nevezik.

Ugyanezzel az eljárással oldható meg az a feladat is, amikor ismeretlen röntgensugárzás hullámhosszát kell meghatározni. Ilyenkor a sugárzást ismert rácssík-távolságú kristályra kell bocsátani, és meghatározni az intenzitásmaximumok irányát. Ismerve a siktávolságot és lemérve a maximális intenzitásokhoz tartozó szögeket, a sugárzás hullámhossza meghatározható. Így módunk van ismeretlen, nem monokromatikus röntgensugárzás spektrumának felvételére is. Ez a *röntgenspektrométerek* működésének alapelve.

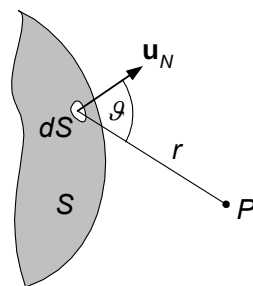
Fresnel-diffrakció

Fresnel-diffrakcióról akkor beszélünk, ha a hullámforrásból érkező vagy a megfigyelőhöz eljutott hullám nem síkhullám. Ilyenkor egy adott helyen létrejött zavar számítása a Huygens–Fresnel-elv segítségével történhet, amely szerint a hullámter egy adott pontjában kialakuló hullámot a hullámfront pontjaiból érkező elemi gömbhullámok interferenciája szabja meg.

Ezt az elvet *Kirchhoff*² fogalmazta meg matematikai formában, amelynek itt egy egyszerűsített változatát tárgyaljuk. Eszerint, az S hullámfront (ábra) egy elemi dS felülete által kibocsátott gömbhullám amplitúdója arányos a felületelem nagyságával, és a felületelemtől r távolságban lévő pontban ez az elemi gömbhullám a

$$d\psi = dS \frac{g(\vartheta)}{r} f\left(t - \frac{r}{v}\right)$$

zavart hozza létre. Az $f\left(t - \frac{r}{v}\right)$ függvényt ismertnek tételezzük fel. A



fenti kifejezésben az $\frac{1}{r}$ faktor azért jelenik meg, mert – mint tudjuk – a gömbhullám amplitúdója a távolsággal ilyen módon csökken. Az ugyancsak ismertnek tekintett $g(\vartheta)$ függvény azt veszi figyelembe, hogy a dS -ből kiinduló gömbhullám hatása attól is függ, hogy a vizsgált pont a felületelemhez képest hogyan helyezkedik el. A legnagyobb a hatás akkor, ha $\vartheta = 0$, vagyis a pont éppen „szemben” van a felületelemmel, ha pedig a ϑ szög nő, vagyis a pont „oldalra” (esetleg hátrafelé) esik a felületelemhez képest, akkor egyre kisebb. Kirchhoff szerint véges S hullámfelületről érkező elemi gömbhullámok eredő hatását az elemi felületek hatásainak szuperpozíciója adja meg, vagyis az eredő hullámfüggvényt a

¹ Paul SCHERRER (1890-1979) svájci fizikus.

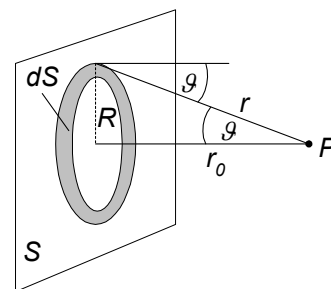
² Gustav Robert KIRCHHOFF (1824-1887) német fizikus.

$$\psi(P,t) = \int_S \frac{g(\vartheta)}{r} f\left(t - \frac{r}{v}\right) dS$$

integrál adja meg.

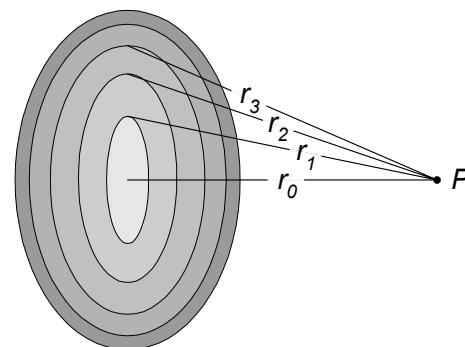
Annál az egyszerű esetenél, amit a továbbiakban tárgyalunk mindebből azt fogjuk felhasználni, hogy az elemi felületek hatása arányos a felületelem nagyságával, és a távolsággal csökken, továbbá az eredő hatás a felületelemekből érkező hatások összegeként számítható.

Példaként azzal az egyszerűsített esettel foglalkozunk, amikor a forrásból érkező hullám hullámfrontja síknak tekinthető (az ábrán S), és ezen a síkon ismerjük a hullámot. A feladat az, hogy meghatározzuk a hullám amplitúdóját egy a hullámfronttól nem túl távoli pontban (P). Ehhez a hullámfrontot elemi felületekre kell osztani, és az elrendezés hengerszimmetriája miatt elemi felületként gyűrűket célszerű választani. Egy ilyen gyűrű látható az ábrán, ahol R a gyűrű nagyobbik körének sugara, r_0 a P pont távolsága a sík hullámfronttól, r pedig a P pont távolsága a gyűrű nagyobbik körétől.



Tegyük fel, hogy $\lambda \ll r_0$, és osszuk fel a hullámfrontot olyan elemi gyűrűkre (ábra), amelyeknek r távolsága a P ponttól rendre

$$\begin{aligned} r_1 &= r_0 + \frac{1}{2}\lambda, \\ r_2 &= r_1 + \frac{1}{2}\lambda, \\ &\vdots \\ r_n &= r_{n-1} + \frac{1}{2}\lambda. \end{aligned}$$



Az ilyen módon kiválasztott elemi felületeket *Fresnel-zónáknak* nevezik.

Könnyen belátható, hogy a Fresnel-zónák

$$dS_n = (R_n^2 - R_{n-1}^2)\pi$$

felülete azonos. Ez abból következik, hogy nem túl nagy n esetén $\lambda \ll r_0$ miatt

$$R_n^2 = r_n^2 - r_0^2 = \left(r_0 + \frac{1}{2}n\lambda\right)^2 - r_0^2 = r_0n\lambda + \frac{1}{4}n^2\lambda^2 \approx r_0n\lambda,$$

így

$$dS_n = (R_n^2 - R_{n-1}^2)\pi \approx r_0\lambda\pi(n - (n-1)) = r_0\lambda\pi,$$

vagyis a zónák felülete valóban nem függ n -től.

Mivel az n -edik felületelemről r_n távolságban lévő pontban a fázis a megtett út miatt $\delta_n = kr_n = \frac{2\pi}{\lambda}r_n$ értékkel változik meg, a szomszédos gyűrűk azonos helyzetű pontjaiból

induló hullámok között a P pontban $\delta_{n+1} - \delta_n = \frac{2\pi}{\lambda}(r_{n+1} - r_n) = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{\lambda}{2} = \pi$ fáziskülönbség van.

Ezek a hullámok tehát gyengítik egymást. Ha az n -edik zónából jövő hullám amplitúdója a P pontban A_n , akkor az eredő amplitúdó

$$A = A_1 - A_2 + A_3 - A_4 + A_5 \dots$$

Mivel az elemi felületek azonos nagyságúak, a P -be érkező hullámok amplitúdója pedig a távolsággal és a szöggel csökken, a fenti összegben az egyes tagok monoton csökkennek a sorszámmal. Emiatt érdemes a fenti összeget átrendezni:

$$A = \frac{1}{2}A_1 + \left(\frac{1}{2}A_1 - A_2 + \frac{1}{2}A_3\right) + \left(\frac{1}{2}A_3 - A_4 + \frac{1}{2}A_5\right) + \dots$$

Ebben a kifejezésben a zárójelben lévő tagok összege közelítőleg nulla, vagyis

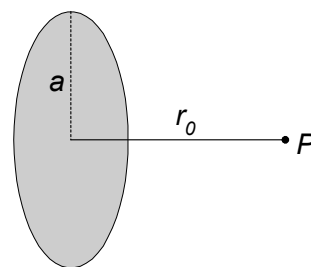
$$A \approx \frac{1}{2}A_1.$$

Ez azt jelenti, hogy a P pontban a hullámot lényegében a hullámfrontnak a ponttal szemben lévő része (a középső Fresnel-zóna) adja, de az $1/2$ szorzó jelzi, hogy a többi zónák csökkentő hatása is érvényesül.

Ezek után nézzük meg, hogy milyen hullámot kapunk egy speciális helyzetű P pontban (ábra), ha a hullám egy a sugarú, kör alakú nyíláson halad át vagy egy a sugarú, kör alakú akadály kerül az útjába.

A fenti megfontolások szerint a P -ben megjelenő hullám amplitúdója attól függ, hogy a rés hány zónából jövő hullámot enged át, illetve az akadály hány zónát takar le. Mivel egy zóna R_n sugara függ a P pontnak a hullámfronttól való r_0 távolságától

($R_n^2 \approx r_0 n \lambda$), adott a sugarú nyílás vagy akadály esetén az áteresztett illetve letakart zónák száma függ az r_0 -tól, adott r_0 esetén pedig a -tól. Ezért akár r_0 -t, akár a -t változtatjuk, a P pontban kapott kép változik.



Diffrakció kör alakú nyíláson

Először egy kör alakú, a sugarú nyílás esetét tárgyaljuk abban az esetben amikor a nyílás rendre egy-, két- vagy három zónát enged át.

- Ha $a^2 = r_0 \lambda$, akkor a nyílás területe $a^2 \pi = r_0 \lambda \pi$ vagyis a nyílás éppen az első Fresnel-zónáról jövő hullámot eresztí át. Ekkor

$$A \approx A_1.$$

Látható, hogy az amplitúdó nagyobb, mint nyílás nélkül, aminek az az oka, hogy most letakartuk az amplitúdót csökkentő zónákat.

- Ha $a^2 = 2r_0 \lambda$, akkor a nyílás területe $a^2 \pi = 2r_0 \lambda \pi$ vagyis a nyílás az első két Fresnel-zónáról jövő hullámot eresztí át. Ekkor

$$A \approx A_1 - A_2 \approx 0,$$

vagyis ilyenkor P -ben sötét foltot látunk.

- Ha $a^2 = 3r_0 \lambda$, akkor a nyílás területe $a^2 \pi = 3r_0 \lambda \pi$ vagyis a nyílás az első három Fresnel-zónáról jövő hullámot eresztí át. Ekkor

$$A \approx A_1 - A_2 + A_3 = \frac{1}{2}A_1 + \left(\frac{1}{2}A_1 - A_2 + \frac{1}{2}A_3\right) + \frac{1}{2}A_3 \approx \frac{1}{2}(A_1 + A_3),$$

vagyis ismét van hullám a P pontban.

Látható, hogy páratlan áteresztett zóna esetén a P pontban világos foltot, páros számú áteresztett zóna esetén pedig sötét foltot látunk.

Ennek a ténynek egy érdekes alkalmazása a *Fresnel-féle zónalemez*. Ez egy olyan kör alakú akadály, amely lefedi a páros sorszámú Fresnel-zónákat és átengedi a páratlan számúakból érkező hullámot. Ekkor a P pontban a lefedetlen zónákból származó amplitúdók összegződnek:

$$A = A_1 + A_3 + A_5 + \dots$$

A zónalemez tehát a megfelelő r_0 távolságban lévő P pontban összegyűjti a hullámokat: lencseként viselkedik.

Diffrakció kör alakú akadályon

Itt azt az esetet vizsgáljuk, amikor a körlap rendre egy-, két- vagy három zónát takar le.

- Ha $a^2 = r_0 \lambda$, akkor körlap éppen az első Fresnel-zónát takarja le. Ekkor

$$A \approx 0 + A_2 - A_3 + \dots \approx \frac{1}{2} A_2 + \left(\frac{1}{2} A_2 - A_3 + \frac{1}{2} A_4 \right) + \left(\frac{1}{2} A_4 - A_5 + \frac{1}{2} A_6 \right) + \dots$$

vagyis

$$A \approx \frac{1}{2} A_2$$

Látható, hogy az akadály ellenére a P pontban világos folt jön létre.

- Ha $a^2 = 2r_0 \lambda$, akkor a körlap az első két Fresnel-zónát fedi le. Ekkor

$$A \approx 0 + 0 + A_3 - A_4 + \dots \approx \frac{1}{2} A_3 + \left(\frac{1}{2} A_3 - A_4 + \frac{1}{2} A_5 \right) + \left(\frac{1}{2} A_5 - A_6 + \frac{1}{2} A_7 \right) + \dots,$$

vagyis

$$A \approx \frac{1}{2} A_3,$$

tehát P -ben ismét világos foltot látunk.

- Ha $a^2 = 3r_0 \lambda$, akkor a körlap az első három Fresnel-zónát fedi le. Ekkor

$$A \approx 0 + 0 + 0 + \frac{1}{2} A_4 + \left(\frac{1}{2} A_4 - A_5 + \frac{1}{2} A_6 \right) + \left(\frac{1}{2} A_6 - A_7 + \frac{1}{2} A_8 \right) + \dots,$$

vagyis most is világos folt van a P pontban.

Látható, hogy bármilyen méretű körlap esetén az első áteresztett zóna megjelenik a P pontban, vagyis mindig világos foltot látunk (a folt intenzitása természetesen a körlap méretének növelésével csökken).

Diffrakció résen

Hasonló módon kaphatjuk meg az eredő hullámamplitúdót egy résSEL szemben fekvő pontban, csak itt a Fresnel-zónák nem gyűrűk, hanem a résSEL párhuzamos csíkok.

Fényelhajlás (diffrakció)	14
Fraunhofer-diffrakció.....	14
<i>Fraunhofer-diffrakció hosszú, keskeny résen</i>	<i>15</i>
<i>Fraunhofer-diffrakció több résen, a diffrakciós rács</i>	<i>18</i>
<i>Röntgensugarak elhajlása kristályban</i>	<i>21</i>
Fresnel-diffrakció.....	23