

**Matematické základy kinematické teorie
difrakce: Fourierova transformace mřížky**

Jiří Komrška

1 Úvod

Studium struktury látek založené na difrakci nějakého záření se většinou provádí tak, že na zkoumanou látku dopadá rovnoběžný svazek záření a ve vzdálenosti R – velké ve srovnání s rozměry objektu – se registruje difraktované záření. Z něho se pak usuzuje na strukturu zkoumané látky. Jestliže se přitom předpokládá, že difrakce je slabá v tom smyslu, že neovlivní („neoslábí“) primární záření a že difrakce nastává pouze jednorázově, tj. že difraktuje pouze primární záření, resp. že difrakce už jednou difraktovaného záření je zanedbatelná, mluvíme o kinematické teorii difrakce (též – a možná výstižněji – o geometrické teorii [18]). Bere-li se v úvahu ovlivnění primární vlny v důsledku difrakce a difrakce záření už difraktovaného, mluvíme o dynamické teorii difrakce.

Matematickým základem kinematické teorie difrakce je Fourierova transformace v E_N . Ať pracujeme v kterékoli fyzikální oblasti teorie difrakce – difrakce na jednorozměrných mřížkách (E_1), Fraunhoferova difrakce v optice (E_2), strukturní analýza pevných látek (E_3) včetně kvazikrystalů (E_N), difrakce vlnění nejrůznějšího druhu (zvuk, elektromagnetické vlnění, elektrony, neutrony, protony, atomy, ionty, molekuly) a nejrůznějších energií, resp. vlnových délek – vždy používáme aparátu a výsledků Fourierovy transformace. Je asi nemožné najít univerzální důvod, proč tomu tak je. Často se však setkáváme (Huygensův princip, Bornova formule) s asymptotickou aproximací jistého integrálu, která tento integrál převádí do tvaru blízkého Fourierovu integrálu. Úprava s tím spojená není korektní ani elegantní, je však tak rozšířená, že ji uvedeme i zde.

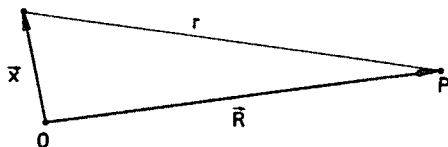
Předpokládejme, že objekt charakterizuje funkce $f(\mathbf{x})$ (funkce propustnosti v optice, elektronová hustota v rentgenové difraktografii, elektrostatický potenciál v elektronové difraktografii atd.), která představuje rozptylovou schopnost objektu. Na objekt dopadá kolimovaný svazek, rovinná vlna charakterizovaná výrazem $\exp(ik\mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{x})$, v němž \mathbf{n}_0 značí jednotkový vektor ve směru šíření a $k = 2\pi/\lambda$ je vlnové číslo. Každý bod objektu působí pružný rozptyl, jímž vzniká kulová vlna

$$f(\mathbf{x}) \exp(ik\mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{x}) \frac{\exp(ikr)}{kr},$$

jejíž amplituda je úměrná jednak rozptylové schopnosti $f(\mathbf{x})$ objektu, jednak – a to je výrazem kinematické teorie – dopadající vlně. r značí vzdálenost mezi

bodem \mathbf{x} a bodem pozorování \mathbf{R} , tj. $r = |\mathbf{R} - \mathbf{x}|$ (viz obr. 1.1). Difraktované vlnění v bodě pozorování je pak charakterizováno integrálem

$$\psi_d(\mathbf{R}) = \iiint_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{x}) \exp(i k \mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{x}) \frac{\exp(i k |\mathbf{R} - \mathbf{x}|)}{k |\mathbf{R} - \mathbf{x}|} d^3 \mathbf{x}. \quad (1.1)$$



Obr. 1.1 K aproximaci (1.2).

Nyní se využije toho, že bod pozorování je velmi vzdálený od objektu. Míni se tím, že funkce $f(\mathbf{x})$ nabývá fyzikálně významných hodnot jen pro $x \ll R$ a jinde je rovna nule. Všeobecně se má za to, že tento předpoklad dovoluje jednak nahradit výraz $k |\mathbf{R} - \mathbf{x}|$ ve jmenovateli výrazem kR a vytknout jej před integrál, jednak nahradit též výraz v exponenciální funkci aproximací prvními dvěma členy Taylorova rozvoje

$$k |\mathbf{R} - \mathbf{x}| \doteq kR - k \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}, \quad (1.2)$$

v níž $\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$. S označením

$$\mathbf{p} = \mathbf{n} - \mathbf{n}_0 \quad (1.3)$$

pro tzv. vektor rozptylu lze pak přepsat integrál (1.1) do tvaru

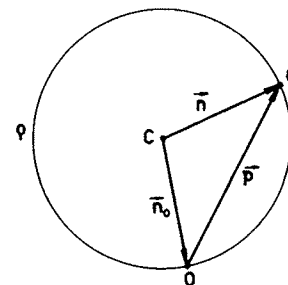
$$\psi_d = \frac{\exp(i k R)}{k R} \iiint_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{x}) \exp(-i k \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) d^3 \mathbf{x}. \quad (1.4)$$

Integrál v tomto výrazu má už formálně tvar Fourierova integrálu.

Se skutečností, že proměnná \mathbf{p} nenabývá všech možných hodnot v E_3 – jak je tomu u Fourierovy transformace, ale že je omezena podmínkou (1.3), se teorie difrakce vyrovnává tzv. Ewaldovou konstrukcí. Využívá Fourierovy transformace, ale dodává, že fyzikální smysl mají pouze ty hodnoty proměnné \mathbf{p} , které splňují podmínku (1.3), tj. které jsou rozdílem dvou jednotkových vektorů.

Podstatou Ewaldovy konstrukce je tedy toto (viz obr. 1.2): V prostoru proměnné Fourierovy transformace sestrojíme kulovou plochu ρ o jednotkovém poloměru tak, že prochází počátkem O a její střed C leží ve směru opačném směru šíření primární vlny, tj. $CO = \mathbf{n}_0$ (Ewaldova, též reflexní, kulová plocha). Pak amplituda záření difraktovaného ve směru $CQ = \mathbf{n} = \mathbf{n}_0 + \mathbf{p}$ je úměrná Fourierově transformaci $F(\mathbf{p})$ (funkce $f(\mathbf{x})$ charakterizující preparát) v bodě Q Ewaldovy kulové plochy, jehož průvodič je roven vektoru rozptylu \mathbf{p} , tj. $\mathbf{p} = OQ$.

Po pravdě řečeno, ve snaze zdůvodnit, proč má Fourierova transformace základní význam pro teorii difrakce, jsme Ewaldovu myšlenku [21] zobecnili do té míry, že je to na hranici přípustnosti. Ewaldovy konstrukce se totiž vždy používá k diskusi difrakce na mřížkách. Protože Fourierova transformace mřížky je rovněž mřížka (viz odst. 2, 5, 7, 8), říká Ewaldova konstrukce, že hlavní difrakční maxima jsou ve směrech, pro něž je vektor rozptylu \mathbf{p} mřížkovým vektorem zmíněné mřížky ve Fourierově prostoru (viz odst. 9). Rovněž měřítko Ewaldovy konstrukce bývá jiné: Poloměr kulové plochy ρ nebývá jednotkový, nýbrž $1/\lambda$.



Obr. 1.2 Vektor rozptylu \mathbf{p} (viz (1.3)).

Ve fyzice povrchů se používá různých difrakčních technik (LEED, RHEED), při nichž dochází k difrakci na dvojrozměrných i trojrozměrných strukturách. Při modelování struktur povrchů a analýze elektronově mikroskopických snímků přichází ke slovu optická Fraunhoferova difrakce a při studiu kvazikrystalů mohou být užitečné i vícerozměrné mřížky. Proto se v následujících odstavcích budeme zabývat Fourierovou transformací N -rozměrných mřížek. Budeme postupovat poněkud nezvykle, totiž formálně matematicky a bez zřetele na způsob realizace difrakčních experimentů. Snad tím vynikne to, co je společné všem zmíněným difrakčním technikám, a ozřejmí se formálně matematický původ zaváděných pojmů. Teprve v závěru (odst. 9) pojednáme o difrakčních podmínkách. I k nim však budeme přistupovat spíše z geometrického než fyzikálního hlediska. Teorii a experimentální realizaci jednotlivých difrakčních metod jsou věnovány jiné kapitoly této publikace.

Tím, že se budeme zabývat Fourierovou transformací N -rozměrných mřížek, by neměl vzniknout dojem, že směřujeme k nějaké N -rozměrné difrakční teorii. Něco takového by sotva mohlo mít význam. Vektory \mathbf{n}_0 , \mathbf{n} , \mathbf{p} v rovnici (1.3) jsou téměř vždy trojrozměrné. Pouze objekt $f(\mathbf{x})$ může být trojrozměrný nebo dvojrozměrný (nebo dokonce i jednorozměrný). Aby integrál v (1.4) měl smysl, i když funkce $f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2)$ je funkcí dvou proměnných, můžeme ji přiřadit funkci tří proměnných pomocí funkce delta:

$$f(x_1, x_2, x_3) = f(x_1, x_2) \delta(x_3). \quad (1.5)$$

Fourierova transformace $F(\mathbf{p})$ funkce (1.5) nezávisí na třetí souřadnici,

$$F(p_1, p_2, p_3) = AF(p_1, p_2), \quad (1.6)$$

neboť Fourierova transformace funkce delta v (1.5) je konstanta, viz (2.10). Má tedy smysl pojednat o Fourierově transformaci mřížek bez ohledu na jejich dimenzi. Při diskusi difrakce na mřížkách v odst. 9 však probereme zvlášť difrakci na trojrozměrných a dvojrozměrných mřížkách.

Příspěvek má tedy tento obsah:

V odst. 2 následuje po definici Fourierovy transformace několik příkladů, které směřují ke krystalografickým aplikacím. Zejména je ukázáno, že Fourierova transformace N -rozměrné nekonečné „kartézské“ mřížky je ortogonální reciproká mřížka (srov. (2.17)). Výpočet je snadný, neboť N -násobnou řadu funkcí delta lze v tomto případě faktorizovat, tj. vyjádřit součinem jednoduchých řad. Pro difraktografické aplikace je mimořádně užitečná věta o Fourierově transformaci funkcí, které lze ztotožnit lineární regulární transformací souřadnic. Je dokázána v odst. 3, aplikována na translaci objektů v odst. 4 a v odst. 5 na deformaci. Obecná N -rozměrná mřížka se zde považuje za deformovanou kartézskou mřížku a pomocí uvedené věty je ukázáno, že Fourierova transformace obecné mřížky je rovna (nebo aspoň podobná) reciproké mřížce, srov. (5.6). Kromě toho je v odst. 5 odvozen vztah vyjadřující pomocí Gramova determinantu základní vektory reciproké mřížky prostřednictvím základních vektorů přímé mřížky a naopak (srov. (5.12), (5.13)), a to při libovolné dimenzi mřížky.

V odst. 2 a 5 jde o nekonečné mřížky tvořené body. Aby bylo možné pohodlně pojednat o mřížkách se složitější bází a konečných mřížkách, je v odst. 6 definována konvoluce a jsou diskutovány některé její vlastnosti, zejména ve vztahu k Fourierově transformaci (Fourierova transformace konvoluce a součinu). V závěru odst. 6 je ukázáno, že čtverec modulu Fourierovy transformace je Fourierovou transformací autokorelace. V odst. 7 se využívá vlastností konvoluce k výpočtu Fourierovy transformace nekonečné mřížky s bází a k diskusi strukturního faktoru. V odst. 8 je Fourierova transformace konečné mřížky vyjádřena jednak prostřednictvím mřížkové amplitudy, jednak prostřednictvím tvarové amplitudy. Dále je v odst. 8 odvozen vztah mezi mřížkovou a tvarovou amplitudou a jsou naznačeny přednosti použití tvarové amplitudy k výpočtu Fourierovy transformace konečné mřížky. Tím končí pojednání o Fourierově transformaci mřížek.

Odst. 9 má už poněkud aplikační charakter. Jsou v něm odvozeny podmínky pro směry hlavních difrakčních maxim a představuje povšechný návod, jak přistupovat k interpretaci difrakce na mřížkách v rámci kinematické teorie difrakce.

2 Definice Fourierovy transformace

Fourierova transformace bývá definována různými způsoby. V důsledku toho jsou různého tvaru (liší se různě rozmístěnými konstantami) i věty, jež mají v aplikacích fyzikální obsah (např. věta o konvoluci, Rayleighova–Parsevalova věta apod.). V jednotlivých oborech se však zvolené definice užívá více méně důsledně. Tak dochází k tomu, že i tak základní pojem jako reciproká mřížka se zavádí jinak v krystalografii a jinak ve fyzice pevných látek a vznikají dokonce i spory o oprávněnosti té či jiné volby [1]. Abychom získali interdisciplinární nadhled, zavedeme do definice Fourierovy transformace vhodné konstanty, jejichž konkrétní volba dovolí ztotožnit se s jednotlivými speciálními definicemi Fourierovy transformace.

Snad všechny definice Fourierovy transformace používané v literatuře jsou speciálním případem transformace, definované s použitím tří nenulových konstant A, B, k . Definujeme tedy Fourierovu transformaci $\mathcal{F}\{f\}$ funkce $f(\mathbf{x})$ a inverzní Fourierovu transformaci $\mathcal{F}^{-1}\{F\}$ funkce $F(\mathbf{p})$ integrály

$$\mathcal{F}\{f\} = A^N \int \dots \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{x}) \exp(-i k \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) d^N \mathbf{x}, \quad (2.1)$$

$$\mathcal{F}^{-1}\{F\} = B^N \int \dots \int_{-\infty}^{\infty} F(\mathbf{p}) \exp(i k \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) d^N \mathbf{p}. \quad (2.2)$$

Přitom se předpokládá, že f a F jsou absolutně integrovatelné komplexní funkce reálných proměnných $\mathbf{x}, \mathbf{p} \in E_N$ a že tyto funkce mají konečnou variaci v každé ohraničené oblasti E_N . Konstanty A, B mohou být komplexní, konstanta k musí být ovšem reálná. Zavádět konstanty A, B komplexní je však formální a neúčelné, neboť to komplikuje formulaci některých vět a jejich důkazů. Proto budeme v dalším textu považovat všechny tři konstanty za reálné. Volbu konstant A, B, k svazuje podmínka

$$AB = \frac{|k|}{2\pi}. \quad (2.3)$$

Podmínka (2.3) vyplývá (viz [2]) z tzv. fundamentální věty o Fourierově transformaci. Podle ní platí v bodech spojitosti funkce $f(\mathbf{x})$

$$\mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}\{f(\mathbf{x})\}\} = f(\mathbf{x}) \quad (2.4)$$

a v bodech, v nichž má $f(\mathbf{x})$ konečnou nespojitost, se levá strana vztahu (2.4) rovná střední hodnotě funkce f v infinitezimálním okolí bodu nespojitosti.

Podmínka (2.3) je nezbytná k tomu, aby bylo smysluplné nazývat funkce $f(\mathbf{x})$ a $F(\mathbf{p})$ dvojicí funkcí souvisejících spolu Fourierovou transformací. Z (2.1), (2.2) a (2.3) totiž vyplývá

$$F(\mathbf{p}) = \mathcal{F}\{f(\mathbf{x})\}, \quad f(\mathbf{x}) = \mathcal{F}^{-1}\{F(\mathbf{p})\}. \quad (2.5)$$

Bylo již řečeno, že v různých oborech aplikací se používá navzájem odlišných definic Fourierovy transformace. V matematice samé se nejčastěji používá tzv. symetrického tvaru s $A = B = 1$, $k = 2\pi$ [3, 4], zdaleka však ne vždy [5]. Rovněž v krystalografii se ponejvíce používá tvaru s $A = B = 1$, $k = 2\pi$ [7], často však také $A = B = 1$, $k = -2\pi$ [6, 8], a dokonce i $A = 1/2\pi$, $B = 1$, $k = -1$ [9]. Ve fyzice pevných látek, fyzice povrchů a v teorii obvodů $A = 1$, $B = 1/2\pi$, $k = 1$ nebo $k = -1$ atd. Na tyto různé volby konstant je třeba dávat pozor při používání různých sborníků a sbírek vzorců pro Fourierovu transformaci.

V aplikacích, při modelování reálných objektů a dějů, je často žádoucí počítat s Fourierovými transformacemi funkcí, které nejsou absolutně integrovatelné. Např. v krystalografických aplikacích jde často o výpočet Fourierova integrálu periodických funkcí. Pro tyto případy se zavádí tzv. limitní Fourierova transformace:

Není-li $f(\mathbf{x})$ absolutně integrovatelná funkce a existuje-li hladká funkce $g(\mathbf{x}, \epsilon)$ taková, že při libovolném \mathbf{x} je $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} g(\mathbf{x}, \epsilon) = f(\mathbf{x})$ a $\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |f(\mathbf{x})g(\mathbf{x}, \epsilon)| d^N \mathbf{x}$ existuje pro ϵ z nějakého okolí \mathbf{a} , pak existuje Fourierova transformace součinu $f(\mathbf{x})g(\mathbf{x}, \epsilon)$ a definujeme

$$F(\mathbf{p}) = \mathcal{F}\{f(\mathbf{x})\} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathcal{F}\{f(\mathbf{x})g(\mathbf{x}, \epsilon)\}. \quad (2.6)$$

V tomto smyslu lze mluvit např. i o Fourierově transformaci konstanty, jak vyplývá z příkladu 2.1.

Příklad 2.1

Pro výpočet Fourierovy transformace fázoru $f(x) = \exp(ikp^{(0)}x)$ zvolíme $g(x, \epsilon) = \exp(-\epsilon x^2)$, $\epsilon > 0$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\{\exp(ikp^{(0)}x)\} &= A \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-\epsilon x^2 - ik(p - p^{(0)})x] dx \\ &= A \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \exp\left[-\frac{k^2}{4\epsilon}(p - p^{(0)})^2\right] \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\epsilon \left[x + \frac{ik}{2\epsilon}(p - p^{(0)})\right]^2\right\} dx \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= A \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sqrt{\frac{\pi}{\epsilon}} \exp\left[-\frac{k^2}{4\epsilon}(p - p^{(0)})^2\right] \\ &= A \frac{2\pi}{|k|} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sqrt{\frac{k^2}{4\epsilon\pi}} \exp\left[-\frac{k^2}{4\epsilon}(p - p^{(0)})^2\right]. \end{aligned}$$

Limita představuje funkci delta proměnné $p - p^{(0)}$, takže

$$\mathcal{F}\{\exp(ikp^{(0)}x)\} = \frac{1}{B} \delta(p - p^{(0)}). \quad (2.7)$$

V E_N zřejmě je

$$\mathcal{F}\{\exp(ik\mathbf{p}^{(0)} \cdot \mathbf{x})\} = \frac{1}{B^N} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}^{(0)}), \quad (2.8)$$

neboť si můžeme představit, že výrazy na obou stranách rovnice (2.8) vznikly z faktorizovaného tvaru

$$\prod_{r=1}^N \mathcal{F}\{\exp(ikp_r^{(0)}x_r)\} = \prod_{r=1}^N \frac{1}{B} \delta(p_r - p_r^{(0)})$$

v nějaké kartézské soustavě souřadnic.

Speciálně při $\mathbf{p}^{(0)} = \mathbf{0}$ dostáváme z (2.8)

$$\mathcal{F}\{1\} = \frac{1}{B^N} \delta(\mathbf{p}). \quad (2.9)$$

Příklad 2.2

Výraz pro Fourierovu transformaci funkce $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)})$ vyplývá z filtrační vlastnosti funkce delta

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\{\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)})\} &= A^N \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}) \exp(-ik\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) d^N \mathbf{x} \\ &= A^N \exp(-ik\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}^{(0)}). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Fázory a funkce delta tedy tvoří dvojice funkcí, které spolu souvisejí Fourierovou transformací.

Příklad 2.3

Vypočteme nyní Fourierovu transformaci funkce

$$f_0(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - n), \quad (2.11)$$

která charakterizuje nekonečnou mřížku v E_1 tvořenou body s celočíselnou souřadnicí (srov. obr. 2.1(a)).

Uvedeme nejprve jiné vyjádření řady (2.11), které získáme, vyjádříme-li tuto periodickou funkci s periodou délky jedna Fourierovou řadou

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - n) = \sum_{h=-\infty}^{\infty} \exp(i2\pi hx), \quad (2.12)$$

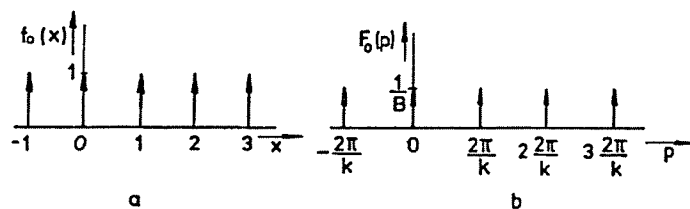
jejíž Fourierovy koeficienty c_h jsou rovny jedné, neboť

$$c_h = \int_{-1/2}^{1/2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - n) \exp(-i 2\pi h x) dx = 1.$$

Uděláme-li v exponenciálních funkcích v rovnici (2.12) formální úpravu $\sum_h \exp(i k h x 2\pi/k)$, vyplývá ihned z (2.7), že Fourierovou transformací nekonečné řady funkcí delta je opět nekonečná řada funkcí delta

$$F_0(p) = \mathcal{F}\left\{\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - n)\right\} = \frac{1}{B} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \delta\left(p - \frac{2\pi}{k} h\right). \quad (2.13)$$

Tato řada charakterizuje rovněž nekonečnou mřížku v E_1 tvořenou body (viz obr. 2.1(b)). Její mřížkový parametr $2\pi/k$ závisí na volbě konstanty k ve Fourierově transformaci.



Obr. 2.1 Lineární mřížka (2.11) (a) a její Fourierova transformace (2.13) (b).

Příklad 2.4

Použitím výsledku (2.13) snadno vyjádříme Fourierovu transformaci funkce

$$f_0(\mathbf{x}) = \sum_{n \in \text{inf}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{n}) \quad (2.14)$$

charakterizující nekonečnou mřížku v E_N tvořenou body s celočíselnými kartézskými souřadnicemi. Mřížkový vektor $\mathbf{n} = n_1 \mathbf{i}_1 + \dots + n_N \mathbf{i}_N$, kde $\mathbf{i}_1, \dots, \mathbf{i}_N$ jsou jednotkové vektory ve směru kartézských os. Čísla n_r nabývají všech celočíselných hodnot a symbol $\mathbf{n} \in \text{inf}$ vyjadřuje, že jde o N -násobnou nekonečnou řadu. Protože jde o kartézskou soustavu souřadnic, lze funkci (2.14) faktorizovat

$$\sum_{n \in \text{inf}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{n}) = \sum_{n \in \text{inf}} \prod_{r=1}^N \delta(x_r - n_r) = \prod_{r=1}^N \sum_{n_r=-\infty}^{\infty} \delta(x_r - n_r). \quad (2.15)$$

Také jádro Fourierovy transformace v E_N lze faktorizovat, takže dostaneme i faktorizovanou Fourierovu transformaci funkce (2.14). Podle (2.13) a (2.15) je

$$\mathcal{F}\left\{\sum_{n \in \text{inf}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{n})\right\} = \frac{1}{B^N} \prod_{r=1}^N \sum_{h_r=-\infty}^{\infty} \delta\left(p_r - \frac{2\pi}{k} h_r\right). \quad (2.16)$$

Postupem opačným jako v (2.15) pak dostaneme

$$F_0(\mathbf{p}) = \mathcal{F}\left\{\sum_{n \in \text{inf}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{n})\right\} = \frac{1}{B^N} \sum_{h \in \text{inf}} \delta\left(\mathbf{p} - \frac{2\pi}{k} \mathbf{h}\right), \quad (2.17)$$

kde $\mathbf{h} = h_1 \mathbf{i}_1 + \dots + h_N \mathbf{i}_N$ a čísla h_r nabývají všech celočíselných hodnot. Fourierova transformace mřížky (2.14) tedy představuje nekonečnou „kubickou“ mřížku bodů v E_N s mřížkovým parametrem $2\pi/k$.

3 Věta o Fourierově transformaci funkcí, které lze ztotožnit lineární regulární transformací souřadnic

Mnohé věty o Fourierově transformaci mají v difraktografických aplikacích pozoruhodný fyzikální obsah [10]. Např. lineárnost

$$\mathcal{F}\left\{\sum_{j=1}^n \alpha_j f_j(\mathbf{x})\right\} = \sum_{j=1}^n \alpha_j \mathcal{F}\{f_j(\mathbf{x})\}$$

je vyjádřením tzv. Babinetovy věty pro Fraunhoferovu difrakci. Rayleighova–Parsevalova věta

$$A^N \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |f(\mathbf{x})|^2 d^N \mathbf{x} = B^N \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |F(\mathbf{p})|^2 d^N \mathbf{p}$$

vyjadřuje zachování energie. Pro krystalografii a difrakci je velmi obsažná věta, která udává vztah mezi Fourierovými transformacemi funkcí, jež lze ztotožnit regulární lineární transformací proměnných.

Považujme vektor \mathbf{x} za sloupcovou matici a vektor \mathbf{p} za řádkovou matici. Nechť čtvercová matice $\mathbf{A} = \|a_{rs}\|$ charakterizuje regulární (tj. $\det \mathbf{A} \neq 0$) lineární transformaci souřadnic

$$\mathbf{x}' = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{x}^{(0)}. \tag{3.1}$$

Pak inverzní transformaci charakterizuje inverzní matice $\mathbf{A}^{-1} = \|a_{rs}^{-1}\| = \|A_{rs}/\det \mathbf{A}\|$, kde A_{rs} je algebraický doplněk prvku a_{rs} v matici \mathbf{A} a inverzní transformace má tvar

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}^{(0)}). \tag{3.2}$$

O Fourierově transformaci funkcí, které lze ztotožnit regulární lineární transformací proměnných, platí věta:

Nechť funkce f_1, f_2 spolu souvisejí vztahem

$$f_2(\mathbf{x}) = f_1(\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{x}^{(0)}). \tag{3.3}$$

Pak jejich Fourierovy transformace spolu souvisejí vztahem

$$F_2(\mathbf{p}) = \frac{1}{|\det \mathbf{A}|} \exp(i k \mathbf{p} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{x}^{(0)}) F_1(\mathbf{p} \mathbf{A}^{-1}). \tag{3.4}$$

Důkaz je založen na pouhé substituci ve Fourierově integrálu

$$\begin{aligned} F_2(\mathbf{p}) &= A^N \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f_2(\mathbf{x}) \exp(-i k \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) d^N \mathbf{x} = \\ &= A^N \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f_1(\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{x}^{(0)}) \exp(-i k \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) d^N \mathbf{x} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= A^N \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f_2(\mathbf{x}) \exp(-i k \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) d^N \mathbf{x} = \\ &= A^N \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f_1(\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{x}^{(0)}) \exp(-i k \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) d^N \mathbf{x} = \\ &= A^N \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f_1(\mathbf{x}) \exp[-i k \mathbf{p} \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)})] \frac{d^N \mathbf{x}}{|\det \mathbf{A}|} = \\ &= \frac{1}{|\det \mathbf{A}|} \exp(i k \mathbf{p} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{x}^{(0)}) A^N \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f_1(\mathbf{x}) \exp(-i k \mathbf{p} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{x}) d^N \mathbf{x} = \\ &= \frac{1}{|\det \mathbf{A}|} \exp(i k \mathbf{p} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{x}^{(0)}) F_1(\mathbf{p} \mathbf{A}^{-1}). \end{aligned}$$

Lineární regulární transformace (3.1) zahrnuje jako zvláštní případy translaci (když matice transformace je jednotkovou maticí, tj. $\|a_{rs}\| = \|\delta_{rs}\|$ a $\mathbf{x}^{(0)} \neq \mathbf{0}$, rotaci (když je matice transformace ortogonální, tj. $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^T$ a $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$), i lineární deformaci (když \mathbf{A} je obecnou regulární maticí). O translaci a lineární deformaci pojednáme v následujících odstavcích.

Závěrem tohoto odstavce si všimneme rotace a využijeme dokázané věty k formálnímu odvození určité vlastnosti Fourierovy transformace, kterou většinou pokládáme za samozřejmost. Protože v případě rotace je $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^T$, $\det \mathbf{A} = 1$ (ortogonálnost matice \mathbf{A}), vyplývá podle věty (3.4) z předpokladu $f_2(\mathbf{x}) = f_1(\mathbf{A}\mathbf{x})$, že $F_2(\mathbf{p}) = F_1(\mathbf{p} \mathbf{A}^T) = F_1((\mathbf{A} \mathbf{p}^T)^T)$. Rotaci objektu i jeho Fourierovy transformace charakterizuje tedy táž matice \mathbf{A} . Pootočí-li se tedy nějak objekt, pootočí se stejně i Fourierova transformace objektu. Kromě toho, má-li objekt vlastnost symetrie související s rotací, tj. je-li $f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{A}\mathbf{x})$, má tutéž vlastnost i Fourierova transformace $F(\mathbf{p}) = F((\mathbf{A} \mathbf{p}^T)^T)$.

4 Translace a soustava identických stejně orientovaných objektů

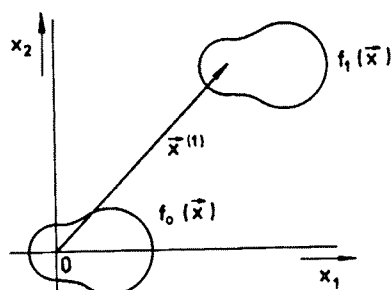
Uvažujme o dvou identických a stejně orientovaných objektech, z nichž jeden $f_1(\mathbf{x})$ je vzhledem k druhému $f_0(\mathbf{x})$ posunut o vektor $\mathbf{x}^{(1)}$ (viz obr. 4.1). Platí tedy

$$f_1(\mathbf{x}) = f_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(1)}). \quad (4.1)$$

Fourierovy transformace obou funkcí spolu zřejmě souvisejí vztahem, který získáme z věty (3.4) při $\mathbf{A} = \mathbf{I} = \mathbf{A}^{-1}$, $\mathbf{x}^{(0)} = -\mathbf{x}^{(1)}$:

$$\mathcal{F}\{f_1(\mathbf{x})\} = \mathcal{F}\{f_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(1)})\} = \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}^{(1)}) \mathcal{F}\{f_0(\mathbf{x})\}. \quad (4.2)$$

Posun objektu se tedy ve Fourierově transformaci projeví právě jen fázorem $\exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}^{(1)})$. Je-li tedy nějaký jev (difrakce) charakterizován Fourierovou transformací, avšak detekovatelný jen jako čtverec jejího modulu, neprojeví se posun preparátu jako celku. Této skutečnosti se využívá např. při práci s optickým difraktografem k přesnému stanovení roviny, v níž se pozoruje Fraunhoferova difrakce, jež je Fourierovou transformací funkce propustnosti vyšetřovaného objektu. Posunujeme-li (bez rotace) objektem v rovině kolmé k optické ose, pak v rovině Fraunhoferovy difrakce se toto posouvání objektu nesmí projevit.



Obr. 4.1 Translace objektu $f_0(\mathbf{x})$ podle (4.1).

Vyjádříme nyní Fourierovu transformaci souboru n identických stejně orientovaných objektů. Takový soubor je charakterizován funkcí

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^n f_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(j)}). \quad (4.3)$$

Fourierova transformace funkce (4.3) má vzhledem k (4.2) tvar

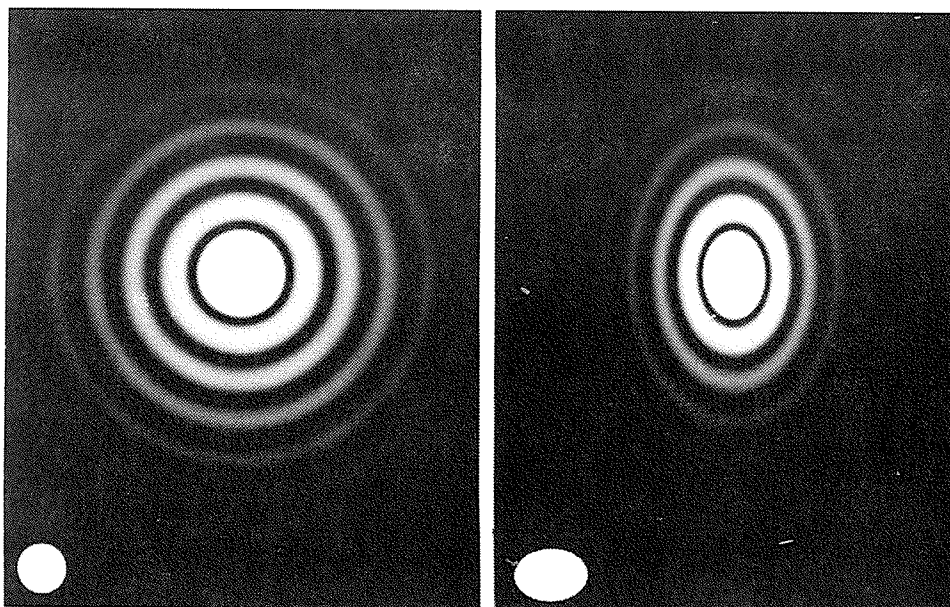
$$\mathcal{F}\{f(\mathbf{x})\} = \mathcal{F}\left\{\sum_{j=1}^n f_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(j)})\right\} = \mathcal{F}\{f_0(\mathbf{x})\} \sum_{j=1}^n \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}^{(j)}).$$

Fourierova transformace n identických, stejně orientovaných objektů je tedy součinem dvou funkcí, z nichž jedna je Fourierovou transformací jednoho objektu a druhá závisí jen na vzájemné poloze objektů (a nikoli na tvaru a jiných vlastnostech objektů samých). V aplikacích jde většinou o strukturu, tj. o vzájemné polohy objektů, tedy o druhou z uvedených funkcí, o součet $\sum_{j=1}^n \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}^{(j)})$.

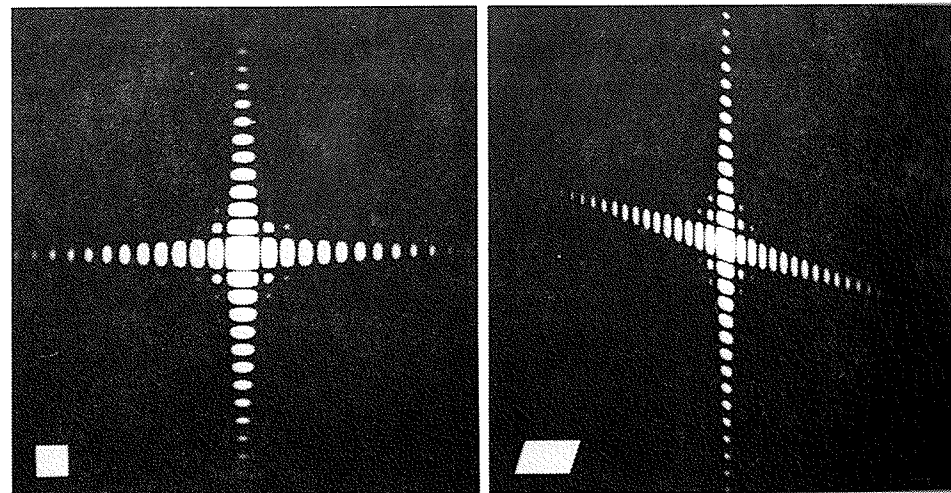
5 Lineární deformace a reciproká mřížka

Lineární deformace objektu se projeví ve Fourierově transformaci „reciprokou“ deformací. V nejjednodušším případě, deformujeme-li objekt v nějakém směru, deformuje se Fourierova transformace v témž směru nepřímo úměrně. Tyto jevy jsou dobře známy z difraktografické praxe (viz obr. 5.1 až 5.3).

Z krystalografie je známo, že stejným způsobem souvisí deformace mřížky s deformací reciproké mřížky. Reciproká mřížka se však v krystalografii definuje geometricky (vztahy (5.7)), bez zřejmého vztahu k Fourierově transformaci mřížky. Pak se však bez dalšího odvozování předpokládá, že takto zavedená reciproká mřížka je Fourierovou transformací krystalové mřížky. Tento problém nyní vyjasníme. Budeme při tom postupovat do jisté míry opačně. Vypočteme Fourierovu transformaci mřížky a ukážeme, jak souvisí s geometricky definovanou reciprokou mřížkou. V druhé části tohoto odstavce uve-



Obr. 5.1 Fraunhoferova difrakce na kruhovém a elipsovitém otvoru. Otvory jsou vyobrazeny v levých dolních rozích difrakčních obrazců. Elipsovitý otvor vznikl roztahením kruhového otvoru ve vodorovném směru. V důsledku toho je difrakční obrazec ve vodorovném směru v témž poměru zkrácen.



Obr. 5.2 Fraunhoferova difrakce na čtvercovém a kosodélníkovém otvoru. Otvory jsou vyobrazeny v levých dolních rozích difrakčních obrazců. Představujeme-li si, že rovnoběžník vznikl deformací čtverce, je pro deformaci difrakčního obrazce příznačné, že ramena difrakčního obrazce zůstávají kolmá ke stranám rovnoběžníku (tzv. Abbeova věta).

deme, jak při libovolné dimenzi N vyjádřit vektory báze reciproké mřížky pomocí vektorů báze krystalové mřížky a naopak. Začneme příkladem.

Příklad 5.1

Vypočteme Fourierovu transformaci jednorozměrné nekonečné mřížky s parametrem a , tj. funkce

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na) \quad (5.1)$$

(viz obr. 5.4(a)). Tuto funkci můžeme považovat za deformovanou funkci (2.11).

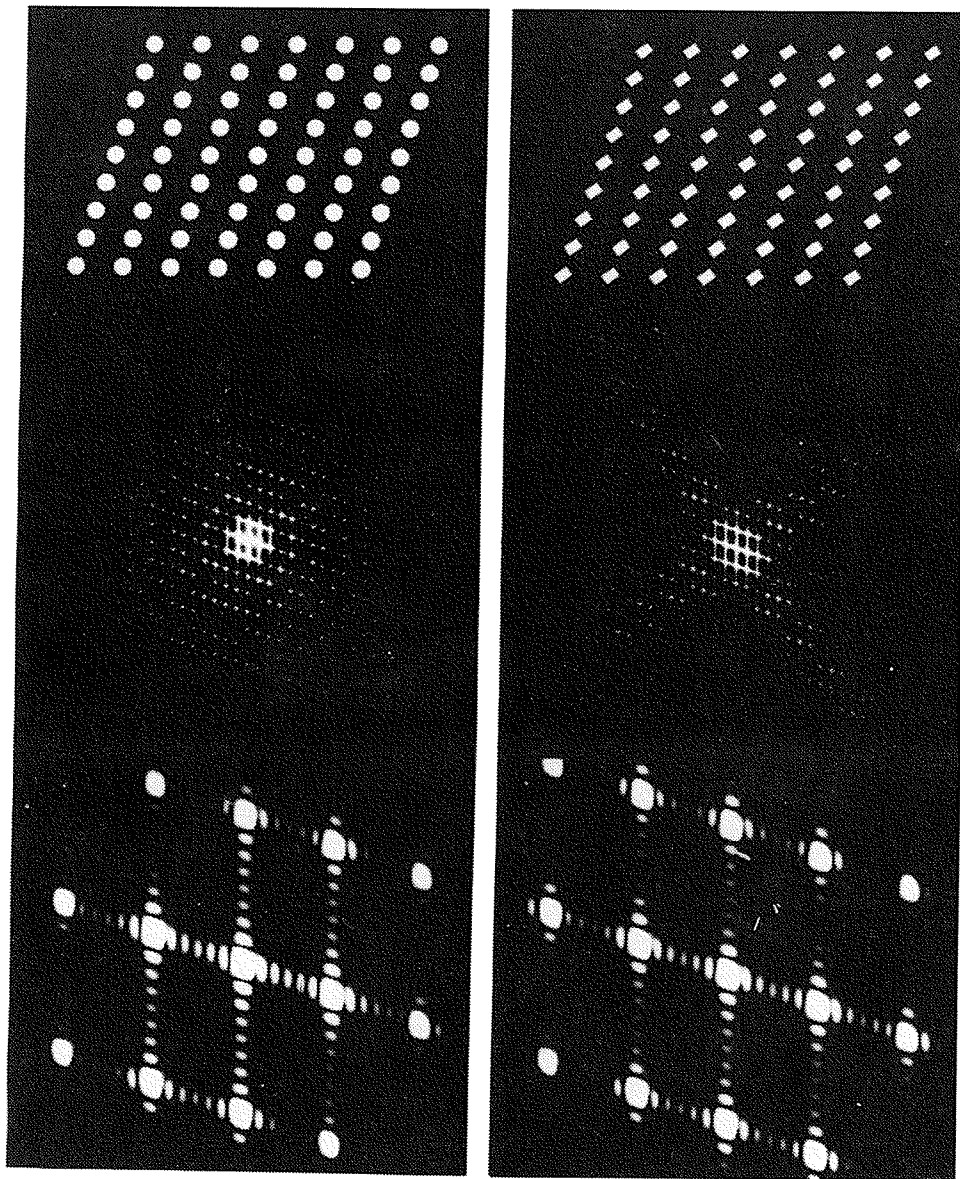
Pro jednorozměrnou deformaci vyplývá z věty (3.3), (3.4): Je-li $f(x) = f_0(ax)$, pak pro Fourierovu transformaci platí $F(p) = |a^{-1}| F_0(a^{-1}p)$. Vezmeme tedy za f_0 a F_0 funkce (2.11) a (2.13) a funkci (5.1) vyjádříme prostřednictvím funkce (2.11)

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(a(a^{-1}x - n)) = |a^{-1}| \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(a^{-1}x - n) = |a^{-1}| f_0(a^{-1}x).$$

Fourierovu transformaci této funkce pak vyjádříme pomocí funkce (2.13)

$$F(p) = |a| |a^{-1}| F_0(ap) = \frac{1}{B} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \delta\left(ap - \frac{2\pi}{k}h\right) = \frac{1}{B} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \delta\left(a\left(p - \frac{2\pi}{k}a^{-1}h\right)\right),$$

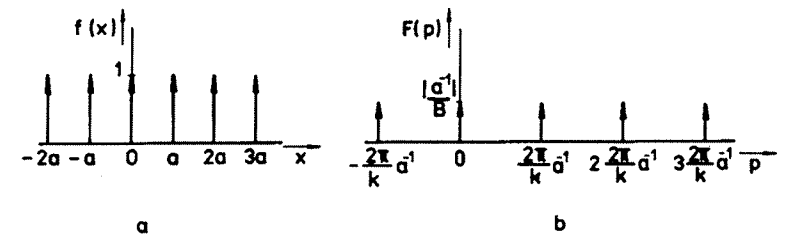
takže Fourierova transformace funkce (5.1) má tvar



Obr. 5.3 Fraunhoferova difrakce na dvojrozměrné mřížce. V horní části obrázku je též dvojrozměrná mřížka tvořená jednou kruhovými, jednou obdélníkovými otvory. Ve střední části obrázku jsou celé Fraunhoferovy difrakční obrazce těchto mřížek. Ukazují, že difrakční obrazec jako celek je vymezen útvarem odpovídajícím difrakci na motivu vytvářejícím mřížku (rotačně symetrický Airyho difrakční obrazec představuje difrakci na kruhovém otvoru, kříž s rameny kolmými na strany difrakci na obdélníkovém otvoru). V dolní části obrázku je zvětšená centrální část difrakčního obrazce. Hlavní maxima tvoří reciprokovou mřížku k difrakční mřížce.

$$F(p) = \frac{1}{B|a|} \sum_{h=-\infty}^{\infty} \delta\left(p - \frac{2\pi}{k} a^{-1}h\right) \quad (5.2)$$

(viz obr 5.4(b)).



Obr. 5.4 Lineární mřížka (5.1) s parametrem a (a) a její Fourierova transformace (5.2) (b).

Definujeme-li tedy reciprokovou mřížku k jednorozměrné mřížce s parametrem a jako mřížku s parametrem a^{-1} , je takto zavedená reciproká mřížka Fourierovou transformací jen tehdy, používáme-li Fourierovy transformace s $k = \pm 2\pi$, $A = B = 1$. Ukážeme nyní, že k obdobnému výsledku dospějeme i v obecném případě N -rozměrné mřížky.

V příkladě 2.4 jsme se zabývali nekonečnou mřížkou tvořenou v E_N body s celočíselnými kartézskými souřadnicemi a její Fourierovou transformací. Obecnou nekonečnou mřížku tvořenou body,

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{n \in \mathbb{Z}^N} \delta(\mathbf{x} - n_1 \mathbf{a}_1 - \dots - n_N \mathbf{a}_N), \quad (5.3)$$

lze považovat za deformaci mřížky (2.14) (n zde značí multiindex). Matice charakterizující tuto deformaci souvisí s maticí $\mathbf{A} = \|\mathbf{a}_{rs}\|$, jejíž řádky jsou tvořeny kartézskými složkami základních vektorů

$$\mathbf{a}_r = a_{r1} \mathbf{i}_1 + \dots + a_{rN} \mathbf{i}_N \quad (5.4)$$

obecné mřížky. Formálně to vyjadřuje úprava

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= \sum_{n \in \mathbb{Z}^N} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{A}^T \mathbf{n}) = \sum_{n \in \mathbb{Z}^N} \delta(\mathbf{A}^T ((\mathbf{A}^T)^{-1} \mathbf{x} - \mathbf{n})) = \\ &= |\det \mathbf{A}^{-1}| \sum_{n \in \mathbb{Z}^N} \delta((\mathbf{A}^T)^{-1} \mathbf{x} - \mathbf{n}). \end{aligned}$$

Deformace mřížky (2.14) v mřížku (5.3) je charakterizována maticí $(\mathbf{A}^T)^{-1}$. Podle věty (3.4) je pak deformace Fourierovy transformace (2.17) charakterizována maticí \mathbf{A}^T a platí

$$\begin{aligned} F(\mathbf{p}) &= F_0(\mathbf{p} \mathbf{A}^T) = \frac{1}{B^N} \sum_{h \in \mathbb{Z}^N} \delta\left(\mathbf{p} \mathbf{A}^T - \frac{2\pi}{k} \mathbf{h}\right) = \\ &= \frac{1}{B^N} \sum_{h \in \mathbb{Z}^N} \delta\left(\left(\mathbf{p} - \frac{2\pi}{k} \mathbf{h} (\mathbf{A}^T)^{-1}\right) \mathbf{A}^T\right) = \\ &= \frac{1}{B^N} \frac{1}{|\det \mathbf{A}|} \sum_{h \in \mathbb{Z}^N} \delta\left(\mathbf{p} - \frac{2\pi}{k} (\mathbf{A}^{-1} \mathbf{h}^T)^T\right). \end{aligned}$$

Výraz $(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{h}^T)^T$ působí dosti komplikovaně. Je však snadné se přesvědčit, že jde o řádkovou matici

$$(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{h}^T)^T = (a_{11}^{-1}h_1 + \dots + a_{1N}^{-1}h_N, \dots, a_{N1}^{-1}h_1 + \dots + a_{NN}^{-1}h_N),$$

jejíž prvky jsou kartézské složky vektoru $h_1\mathbf{a}_1^{-1} + \dots + h_N\mathbf{a}_N^{-1}$, kde vektory

$$\mathbf{a}_s^{-1} = a_{1s}^{-1}\mathbf{i}_1 + \dots + a_{Ns}^{-1}\mathbf{i}_N \tag{5.5}$$

jsou sloupcové vektory matice \mathbf{A}^{-1} . Kromě toho z faktu, že řádky matice \mathbf{A} jsou tvořeny kartézskými složkami základních vektorů mřížky (srov. (5.4)), vyplývá (viz např. [17], str. 230), že

$$|\det \mathbf{A}| = V_U,$$

kde V_U značí N -rozměrný objem elementární buňky. Má tedy Fourierova transformace obecné mřížky (5.3) tvar

$$F(\mathbf{p}) = \frac{1}{B^N} \frac{1}{V_U} \sum_{\mathbf{h} \in \text{inf}} \delta\left(\mathbf{p} - \frac{2\pi}{k} (h_1\mathbf{a}_1^{-1} + \dots + h_N\mathbf{a}_N^{-1})\right), \tag{5.6}$$

jenž představuje opět obecnou mřížku s bazálními vektory $2\pi/k\mathbf{a}_s^{-1}$, $s = 1, \dots, N$.

Vyjasníme nyní vztah Fourierovy transformace (5.6) a reciproké mřížky. V krystalografii (viz např. [6], str. 53) se definuje ke krystalové mřížce se základními vektory \mathbf{a}_r reciproká mřížka se základními vektory \mathbf{a}_s^{-1} vztahy

$$\mathbf{a}_r \cdot \mathbf{a}_s^{-1} = \delta_{rs}. \tag{5.7}$$

V E_N představuje (5.7) N^2 rovnic, jimiž je báze reciproké mřížky jednoznačně určena. Kromě toho je ze symetrie rovnic (5.7) zřejmé, že reciproká mřížka k reciproké mřížce je původní krystalová mřížka.

Co se Fourierovy transformace (5.6) týká, je především zřejmé, že vektory \mathbf{a}_s^{-1} určené vztahem (5.5) a vektory \mathbf{a}_r určené vztahem (5.4) splňují rovnice (5.7). Vyplývá to z toho, že vektor \mathbf{a}_r je řádkový vektor matice \mathbf{A} a vektor \mathbf{a}_s^{-1} je sloupcový vektor inverzní matice \mathbf{A}^{-1} . Pro prvky inverzní matice platí $a_{rs}^{-1} = A_{sr}/\det \mathbf{A}$, kde A_{sr} je algebraický doplněk prvku a_{sr} v matici \mathbf{A} a rovnost

$$a_{r1}a_{1s}^{-1} + \dots + a_{rN}a_{Ns}^{-1} = \delta_{rs},$$

tj.

$$a_{r1}A_{s1} + \dots + a_{rN}A_{sN} = \det \mathbf{A} \delta_{rs},$$

vyjadřuje rozvoj $\det \mathbf{A}$ podle prvků r -tého řádku. Je tedy Fourierova transformace (5.6) reciprokou mřížkou s reciprokou konstantou [11] $K = 2\pi/k$, jež závisí na definici Fourierovy transformace.

Z toho, co bylo až dosud uvedeno, je vidět, jak bychom mohli k dané mřížce sestrojit reciprokou mřížku. Vektory báze mřížky rozložíme do složek v nějaké kartézské soustavě souřadnic, utvoříme matici \mathbf{A} , jejíž řádky jsou složky jednotlivých vektorů báze mřížky. Vypočteme inverzní matici \mathbf{A}^{-1} a její sloupce

jsou složky vektorů báze reciproké mřížky. Takto bychom ovšem vyjádřili reciprokou mřížku prostřednictvím složek bazálních vektorů krystalové mřížky v nějaké pomocné kartézské soustavě souřadnic. To není žádoucí a v krystalografii se, jak známo, vyjadřují vektory báze reciproké mřížky přímo prostřednictvím vektorů báze krystalové mřížky a naopak. Uvedeme nyní návod, jak takové vztahy odvodit v prostoru E_N libovolné dimenze.

Vektor \mathbf{a}_s^{-1} rozložíme v bázi tvořené základními vektory mřížky

$$\mathbf{a}_s^{-1} = \alpha_{s1}\mathbf{a}_1 + \dots + \alpha_{sN}\mathbf{a}_N \tag{5.8}$$

a znásobíme postupně vektory \mathbf{a}_r . Podle (5.7) pak je

$$\alpha_{s1}\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_r + \dots + \alpha_{sN}\mathbf{a}_N \cdot \mathbf{a}_r = \delta_{rs}. \tag{5.9}$$

Při pevném s představuje (5.9) soustavu N rovnic pro N koeficientů $\alpha_{s1}, \dots, \alpha_{sN}$. Determinant této soustavy je Gramův determinant vektorů báze

$$G = \begin{vmatrix} \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 & \dots & \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_N \\ \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_2 & \dots & \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{a}_N \cdot \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_N \cdot \mathbf{a}_2 & \dots & \mathbf{a}_N \cdot \mathbf{a}_N \end{vmatrix}. \tag{5.10}$$

Označíme-li G_{st} algebraický doplněk prvku $\mathbf{a}_s \cdot \mathbf{a}_t$, dostáváme podle Cramerova pravidla pro koeficienty α_{st} výrazy

$$\alpha_{st} = \frac{G_{st}}{G}. \tag{5.11}$$

Dosadíme-li je do (5.8), dospějeme k pozoruhodnému vyjádření vektorů reciproké mřížky

$$\mathbf{a}_s^{-1} = \frac{1}{G} (G_{s1}\mathbf{a}_1 + \dots + G_{sN}\mathbf{a}_N). \tag{5.12}$$

Označíme-li tedy symbolem \mathbf{G}_s determinant vzniklý z Gramova determinantu nahrazením s -tého řádku vektory báze, lze (5.12) zapsat ve tvaru

$$\mathbf{a}_s^{-1} = \frac{\mathbf{G}_s}{G}. \tag{5.13}$$

Tento výsledek – formálně velmi jednoduchý – je ve skutečnosti dosti komplikovaný, je-li třeba rozepisovat determinanty. Skutečností je, že při $N = 1$ je výsledek (5.13) triviální, při $N = 2$ je cenný a v případě $N = 3$ je nepřiměřeně komplikovaný ve srovnání s běžně používaným vyjádřením prostřednictvím vektorových součinů.

Závěrem odstavce uvedeme vztahy mezi vektory přímé a reciproké báze v E_1 , E_2 a E_3 :

V E_1 zřejmě je

$$\mathbf{a}^{-1} = \frac{\mathbf{a}}{a^2}, \quad \mathbf{a} = \frac{\mathbf{a}^{-1}}{(a^{-1})^2}. \tag{5.14}$$

V E_2 je

$$\mathbf{a}_1^{-1} = \frac{\begin{vmatrix} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 & \mathbf{a}_2^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \mathbf{a}_1^2 & \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2^2 \end{vmatrix}}, \quad \mathbf{a}_2^{-1} = \frac{\begin{vmatrix} \mathbf{a}_1^2 & \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \mathbf{a}_1^2 & \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2^2 \end{vmatrix}},$$

tj.

$$\mathbf{a}_1^{-1} = \frac{a_2^2 \mathbf{a}_1 - (\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2) \mathbf{a}_2}{a_1^2 a_2^2 - (\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2)^2}, \quad \mathbf{a}_2^{-1} = \frac{a_1^2 \mathbf{a}_2 - (\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2) \mathbf{a}_1}{a_1^2 a_2^2 - (\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2)^2}. \quad (5.15)$$

Naopak

$$\mathbf{a}_1 = \frac{(a_2^{-1})^2 \mathbf{a}_1^{-1} - (\mathbf{a}_1^{-1} \cdot \mathbf{a}_2^{-1}) \mathbf{a}_2^{-1}}{(a_1^{-1})^2 (a_2^{-1})^2 - (\mathbf{a}_1^{-1} \cdot \mathbf{a}_2^{-1})^2}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{(a_1^{-1})^2 \mathbf{a}_2^{-1} - (\mathbf{a}_1^{-1} \cdot \mathbf{a}_2^{-1}) \mathbf{a}_1^{-1}}{(a_1^{-1})^2 (a_2^{-1})^2 - (\mathbf{a}_1^{-1} \cdot \mathbf{a}_2^{-1})^2}. \quad (5.16)$$

V E_3 jsou vztahy tradičně používané mnohem jednodušší než (5.13). Odvozuji se takto: Z (5.7) vyplývá, že \mathbf{a}_1^{-1} je kolmý k rovině $(\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$, \mathbf{a}_2^{-1} je kolmý k rovině $(\mathbf{a}_3, \mathbf{a}_1)$ a \mathbf{a}_3^{-1} k rovině $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$. Platí tedy

$$\mathbf{a}_1^{-1} = \varepsilon_1 (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3), \quad \mathbf{a}_2^{-1} = \varepsilon_2 (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1), \quad \mathbf{a}_3^{-1} = \varepsilon_3 (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2).$$

Skalárním vynásobením těchto rovnic postupně vektory $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ dostaneme s přihlédnutím ke (5.7)

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = \frac{1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}.$$

Takže

$$\mathbf{a}_1^{-1} = \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{a}_2^{-1} = \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{a}_3^{-1} = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}. \quad (5.17)$$

Naopak

$$\mathbf{a}_1 = \frac{\mathbf{a}_2^{-1} \times \mathbf{a}_3^{-1}}{\mathbf{a}_1^{-1} \cdot (\mathbf{a}_2^{-1} \times \mathbf{a}_3^{-1})}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{\mathbf{a}_3^{-1} \times \mathbf{a}_1^{-1}}{\mathbf{a}_1^{-1} \cdot (\mathbf{a}_2^{-1} \times \mathbf{a}_3^{-1})}, \quad \mathbf{a}_3 = \frac{\mathbf{a}_1^{-1} \times \mathbf{a}_2^{-1}}{\mathbf{a}_1^{-1} \cdot (\mathbf{a}_2^{-1} \times \mathbf{a}_3^{-1})}. \quad (5.18)$$

Příklad 5.2

Vypočítáme základní vektory reciproké mřížky k prosté obdélníkové mřížce v E_2 s poměrem délek základních vektorů 1:2 a s delší stranou elementární buňky ve svislém směru. Délky základních vektorů $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ označíme $a_1 = a, a_2 = 2a$ (viz obr. 5.5(a)), takže $a_1^2 = a^2, a_2^2 = 4a^2, \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 = 0$. Ze vztahů (5.15) pak vyplývají základní vektory reciproké mřížky ve tvaru $\mathbf{a}_1^{-1} = \mathbf{a}_1/a^2, \mathbf{a}_2^{-1} = \mathbf{a}_2/(2a)^2$. Mají tedy základní vektory reciproké mřížky též směr jako vektory původní mřížky a jejich velikosti jsou $a_1^{-1} = 1/a, a_2^{-1} = 1/(2a)$. Reciproká mřížka je opět obdélníková, avšak s poměrem stran elementární buňky 2:1, tj. s delší stranou ve vodorovném směru (viz obr. 5.5(b)).

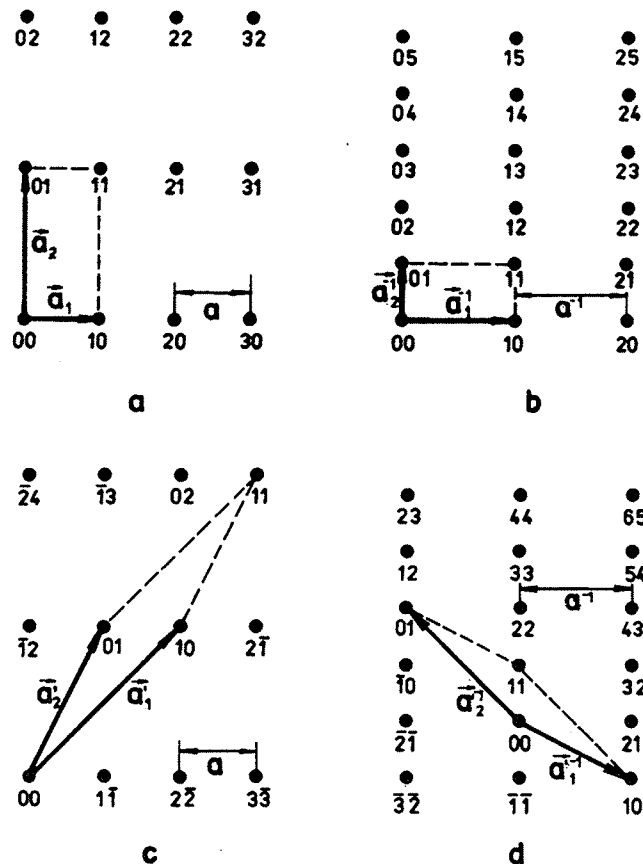
Kdybychom z nějakého důvodu nezvolili základní vektory naší obdélníkové mřížky ortogonální, ale nějaké jiné, dostaneme ovšem tutéž reciprokou mřížku; bude pouze charakterizována jinými základními vektory: Zvolme za základní vektory mřížky např. vektory $\mathbf{a}'_1, \mathbf{a}'_2$ podle obr. 5.5(c). Zřejmě je $a_1'^2 = 8a^2, a_2'^2 = 5a^2, \mathbf{a}'_1 \cdot \mathbf{a}'_2 = 6a^2$, takže ze vztahů (5.15) vyplývají pro základní vektory reciproké mřížky výrazy

$$\mathbf{a}_1'^{-1} = \frac{5}{4} \frac{\mathbf{a}'_1}{a^2} - \frac{3}{2} \frac{\mathbf{a}'_2}{a^2}, \quad \mathbf{a}_2'^{-1} = \frac{-3}{2} \frac{\mathbf{a}'_1}{a^2} + 2 \frac{\mathbf{a}'_2}{a^2}.$$

Velikosti těchto vektorů jsou

$$a_1'^{-1} = \frac{\sqrt{5}}{2a}, \quad a_2'^{-1} = \frac{\sqrt{2}}{a}$$

(viz obr. 5.5(d)).



Obr. 5.5 Dvojměrná obdélníková mřížka (a), (c) s různě zvolenými základními vektory $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ a její reciproká mřížka (b), (d).

Příklad 5.3

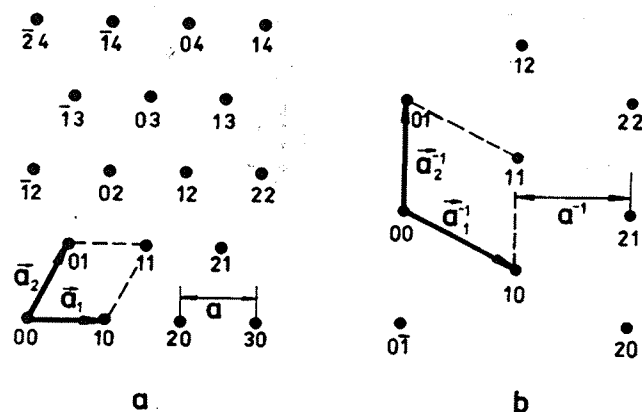
Vypočítáme reciprokou mřížku k centrované obdélníkové mřížce v E_2 s poměrem stran obdélníkové elementární buňky 1:2 a s delší stranou ve svislém směru. Protože jsme se dosud zabývali pouze mřížkami tvořenými body (a nikoli dvojicemi bodů nebo jiným motivem), zvolíme za základní vektory neortogonální vektory \mathbf{a}_1 a \mathbf{a}_2 podle obr. 5.6(a). Zřejmě je $a_1^2 = a^2$, $a_2^2 = 5a^2/4$, $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 = a^2/2$. Z rovnic (5.15) pak vyplývá, že základní vektory reciproké mřížky jsou

$$\mathbf{a}_1^{-1} = \frac{5}{4} \frac{\mathbf{a}_1}{a^2} - \frac{1}{2} \frac{\mathbf{a}_2}{a^2}, \quad \mathbf{a}_2^{-1} = \frac{-\frac{1}{2} \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2}{a^2}.$$

Jejich velikosti jsou

$$a_1^{-1} = \frac{\sqrt{5}}{2a}, \quad a_2^{-1} = \frac{1}{a}$$

(viz obr. 5.6(b)). Reciproká mřížka je tedy opět centrovaná obdélníková mřížka, avšak s poměrem stran elementární buňky 2:1, tj. s delší stranou ve vodorovném směru.



Obr. 5.6 Dvojměrná centrovaná obdélníková mřížka (a) se základními vektory \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 definujícími primitivní mřížku a její reciproká mřížka (b).

6 Konvoluce

Konvolucí $f_1 * f_2$ funkcí $f_1(\mathbf{x})$ a $f_2(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in E_N$, se rozumí integrál

$$f_1 * f_2 = \int \dots \int f_1(\mathbf{y}) f_2(\mathbf{x} - \mathbf{y}) d^N \mathbf{y}. \quad (6.1)$$

Podmínky existence jsou složité. Někdy se uvádí jako dostačující podmínka absolutní integrovatelnost aspoň jedné z funkcí f_1 , f_2 . Jinou dostačující podmínkou je existence 2^N -tantu, kde obě funkce jsou absolutně integrovatelné.

Konvoluce je komutativní

$$f_1 * f_2 = f_2 * f_1, \quad (6.2)$$

asociativní

$$(f_1 * f_2) * f_3 = f_1 * (f_2 * f_3), \quad (6.3)$$

distributivní

$$(\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2) * f_3 = \alpha_1 f_1 * f_3 + \alpha_2 f_2 * f_3, \quad (6.4)$$

invariantní vzhledem k translaci, tj. označíme-li $f_1(\mathbf{x}) * f_2(\mathbf{x}) = f_3(\mathbf{x})$, platí také

$$f_1(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}) * f_2(\mathbf{x}) = f_3(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}). \quad (6.5)$$

Všechny tyto vlastnosti lze dokázat jednoduchou úpravou konvolučního integrálu.

V krystalografických aplikacích se konvoluce hojně využívá k zápisu translace nějaké funkce $f(\mathbf{x})$ (motivu, elementární buňky). Pak druhou funkcí v konvolučním integrálu je funkce delta a translace $\mathbf{x}^{(0)}$ se запиše výrazem

$$f_1(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}) = \int \dots \int f_1(\mathbf{y}) \delta(\mathbf{y} - (\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)})) d^N \mathbf{y} = f_1(\mathbf{x}) * \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(0)}). \quad (6.6)$$

Při výpočtech Fourierovy transformace mřížky je pak důležité vědět, co je Fourierovou transformací konvoluce. Vypovídá o tom následující věta:

Nechť $F_1 = \mathcal{F}\{f_1\}$ a $F_2 = \mathcal{F}\{f_2\}$. Pak

1.

$$\mathcal{F}\{f_1 * f_2\} = \frac{1}{A^N} F_1 F_2, \quad (6.7)$$

a tedy

$$\mathcal{F}^{-1}\{F_1 F_2\} = A^N f_1 * f_2, \quad (6.8)$$

2.

$$\mathcal{F}\{f_1 f_2\} = B^N F_1 * F_2, \quad (6.9)$$

a tedy

$$\mathcal{F}^{-1}\{F_1 * F_2\} = \frac{1}{B^N} f_1 f_2. \quad (6.10)$$

Vyjádřeno slovy: 1. Fourierova transformace konvoluce funkcí je (až na eventuální konstantní faktor) součinem Fourierových transformací funkcí. 2. Fourierova transformace součinu funkcí je konvolucí Fourierových transformací funkcí.

Vzhledem k důležitosti této věty naznačíme důkaz tvrzení (6.7) a (6.9):

1. Důkaz tvrzení (6.7) je snadný a zakládá se na záměně pořadí integrace

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\{f_1 * f_2\} &= A^N \int_{\mathbf{x}} \dots \int_{\mathbf{y}} \left[\int_{\mathbf{y}} \dots \int_{\mathbf{y}} f_1(\mathbf{y}) f_2(\mathbf{x} - \mathbf{y}) d^N \mathbf{y} \right] \exp(-i k \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) d^N \mathbf{x} = \\ &= \int_{\mathbf{y}} \dots \int_{\mathbf{y}} f_1(\mathbf{y}) \left\{ A^N \int_{\mathbf{x}} \dots \int_{\mathbf{x}} f_2(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \exp[-i k \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})] d^N (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right\} \\ &\quad \exp(-i k \mathbf{p} \cdot \mathbf{y}) d^N \mathbf{y}. \end{aligned}$$

Výraz ve složené závorce je roven $F_2(\mathbf{p})$, takže

$$\mathcal{F}\{f_1 * f_2\} = F_2(\mathbf{p}) \frac{1}{A^N} F_1(\mathbf{p}) = \frac{1}{A^N} F_1(\mathbf{p}) F_2(\mathbf{p}).$$

2. Důkaz tvrzení (5.9) je o málo složitější. Zakládá se na záměně pořadí integrace a integrálním vyjádření funkce delta

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\{f_1 f_2\} &= A^N \int_{\mathbf{x}} \dots \int_{\mathbf{x}} f_1(\mathbf{x}) f_2(\mathbf{x}) \exp(-i k \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) d^N \mathbf{x} = \\ &= A^N B^{2N} \int_{\mathbf{x}} \dots \int_{\mathbf{x}} \left[\int_{\mathbf{r}} \dots \int_{\mathbf{r}} F_1(\mathbf{r}) \exp(i k \mathbf{r} \cdot \mathbf{x}) d^N \mathbf{r} \right. \\ &\quad \left. \times \int_{\mathbf{s}} \dots \int_{\mathbf{s}} F_2(\mathbf{s}) \exp(i k \mathbf{s} \cdot \mathbf{x}) d^N \mathbf{s} \right] \exp(-i k \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) d^N \mathbf{x} = \\ &= A^N B^{2N} \int_{\mathbf{r}} \dots \int_{\mathbf{r}} F_1(\mathbf{r}) \int_{\mathbf{s}} \dots \int_{\mathbf{s}} F_2(\mathbf{s}) \int_{\mathbf{x}} \dots \int_{\mathbf{x}} \exp[i k (\mathbf{r} + \mathbf{s} - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}] \times \\ &\quad \times d^N \mathbf{x} d^N \mathbf{s} d^N \mathbf{r}. \end{aligned}$$

Integrál podle \mathbf{x} je integrálním vyjádřením funkce delta

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp[i k (\mathbf{r} + \mathbf{s} - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{x}] d^N \mathbf{x} = \left(\frac{2\pi}{|k|} \right)^N \delta(\mathbf{r} + \mathbf{s} - \mathbf{p}). \quad (6.11)$$

Použitím filtrační vlastnosti funkce delta a vztahu (2.3) dostáváme tvrzení (6.9)

$$\mathcal{F}\{f_1 f_2\} = \left(AB \frac{2\pi}{|k|} \right)^N B^N \int_{\mathbf{r}} \dots \int_{\mathbf{r}} F_1(\mathbf{r}) F_2(\mathbf{p} - \mathbf{r}) d^N \mathbf{r} = B^N F_1 * F_2.$$

Při difrakčních experimentech se téměř vždy registruje intenzita záření, a nikoli komplexní amplituda příslušného vlnění. Je-li difrakční jev charakterizován Fourierovou transformací, znamená to, že experiment poskytuje údaje nikoli o Fourierově transformaci $F(\mathbf{p})$ nějaké funkce $f(\mathbf{x})$ charakterizující zkoumaný objekt, ale o čtverci modulu $|F(\mathbf{p})|^2$ Fourierovy transformace funkce $f(\mathbf{x})$. Využijeme tedy právě uvedené věty a odvodíme ještě jiný význam čtverce modulu Fourierovy transformace.

Podle (6.7) je

$$F(\mathbf{p}) F^*(\mathbf{p}) = A^N \mathcal{F}\{f(\mathbf{x}) * \mathcal{F}^{-1}\{F^*(\mathbf{p})\}\}.$$

Použitím (2.3) a výrazu (6.11) pro funkci delta vypočteme inverzní transformaci komplexně sdružené Fourierovy transformace

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{-1}\{F^*(\mathbf{p})\} &= \\ &= B^N \int_{\mathbf{p}} \dots \int_{\mathbf{p}} \left[A^N \int_{\mathbf{x}'} \dots \int_{\mathbf{x}'} f^*(\mathbf{x}') \exp(i k \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}') d^N \mathbf{x}' \right] \exp(i k \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) d^N \mathbf{p} = \\ &= (AB)^N \int_{\mathbf{x}'} \dots \int_{\mathbf{x}'} f^*(\mathbf{x}') \left\{ \int_{\mathbf{p}} \dots \int_{\mathbf{p}} \exp[i k \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x}' + \mathbf{x})] d^N \mathbf{p} \right\} d^N \mathbf{x}' = \\ &= \left(AB \frac{2\pi}{|k|} \right)^N \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f^*(\mathbf{x}') \delta(\mathbf{x}' + \mathbf{x}) d^N \mathbf{x}' = f^*(-\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Takže

$$\begin{aligned} F(\mathbf{p}) F^*(\mathbf{p}) &= A^N \mathcal{F}\{f(\mathbf{x}) * f^*(-\mathbf{x})\} = \\ &= A^N \mathcal{F}\left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{y}) f^*(\mathbf{y} - \mathbf{x}) d^N \mathbf{y} \right\}. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Integrál

$$f(\mathbf{x}) * f^*(-\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{y}) f^*(\mathbf{y} - \mathbf{x}) d^N \mathbf{y} = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f^*(\mathbf{y}) f(\mathbf{y} + \mathbf{x}) d^N \mathbf{y}$$

se nazývá autokorelační funkcí funkce $f(\mathbf{x})$. V krystalografických aplikacích se při reálné funkci f tento integrál nazývá zobecněnou Pattersonovou funkcí (viz [8], str. 92).

Z (6.12) tedy vyplývá, že čtverec modulu Fourierovy transformace je Fourierovou transformací autokorelace funkce charakterizující objekt. Jinými slovy, kdybychom vypočetli nebo experimentálně získali inverzní Fourierovu transformaci z intenzity $I(\mathbf{p}) = F(\mathbf{p})F^*(\mathbf{p})$, získali bychom nikoli funkci $f(\mathbf{x})$ charakterizující objekt, nýbrž pouze její autokorelaci.

7 Nekonečná krystalová mřížka a její Fourierova transformace, strukturní faktor

V odst. 5 jsme se zabývali nekonečnou mřížkou tvořenou body. Využijeme nyní věty o konvoluci Fourierovy transformace k výpočtu Fourierovy transformace nekonečné mřížky tvořené pravidelným rozmístěním nějakého složitějšího motivu. Takové mřížce se říká (bez ohledu na dimenzi) krystalová mřížka. Charakterizujeme-li elementární buňku funkcí $f_U(\mathbf{x})$, je zřejmé (srov. (5.3), (6.6)), že nekonečnou krystalovou mřížku $f(\mathbf{x})$ charakterizuje konvoluce

$$f(\mathbf{x}) = f_U(\mathbf{x}) * \sum_{n \in \text{inf}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n), \quad (7.1)$$

v níž

$$\mathbf{x}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + \dots + n_N \mathbf{a}_N \quad (7.2)$$

značí mřížkový vektor. Podle věty (6.7) a s použitím (5.6) a (2.3) je zřejmé, že Fourierova transformace nekonečné mřížky (7.1) je dána součinem

$$F(\mathbf{p}) = \left(\frac{2\pi}{|k|} \right)^N \frac{1}{V_U} F_U(\mathbf{p}) \sum_{h \in \text{inf}} \delta\left(\mathbf{p} - \frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h\right), \quad (7.3)$$

v němž $F_U(\mathbf{p})$ značí Fourierovu transformaci elementární buňky $f_U(\mathbf{x})$ a

$$\mathbf{p}_h = h_1 \mathbf{a}_1^{-1} + \dots + h_N \mathbf{a}_N^{-1} \quad (7.4)$$

mřížkový vektor reciproké mřížky. Výraz (7.3) lze upravit do tvaru

$$F(\mathbf{p}) = \left(\frac{2\pi}{|k|} \right)^N \frac{1}{V_U} \sum_{h \in \text{inf}} F_U\left(\frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h\right) \delta\left(\mathbf{p} - \frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h\right). \quad (7.5)$$

Fourierova transformace nekonečné mřížky (7.1), jejíž mřížkové polohy \mathbf{x}_n jsou osazeny elementárními buňkami $f_U(\mathbf{x})$, je nekonečná mřížka (7.5) tvořená body, jejichž „váha“ je různá a je určena hodnotou Fourierovy transformace F_U v těchto bodech. To není nic překvapujícího, neboť nekonečná mřížka (7.1) je periodickou funkcí, a proto samozřejmě má diskrétní spektrum.

Vyjádříme-li mřížku (7.1) prostřednictvím inverzní Fourierovy transformace (2.2) funkce (7.3), dostaneme Fourierovu řadu funkce (7.1)

$$\begin{aligned} f_U(\mathbf{x}) * \sum_{n \in \text{inf}} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) &= \\ &= \frac{1}{A^N V_U} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F_U(\mathbf{p}) \exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \sum_{h \in \text{inf}} \delta\left(\mathbf{p} - \frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h\right) d^N \mathbf{p} = \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{A^N V_U} \sum_{h \in \text{inf}} F_U \left(\frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h \right) \exp(2\pi i \mathbf{p}_h \cdot \mathbf{x}). \quad (7.6)$$

K úplnému popisu nekonečné krystalové mřížky i její Fourierovy transformace stačí tedy znát mřížkové vektory \mathbf{p}_h reciproké mřížky a hodnoty Fourierovy transformace F_U elementární buňky v bodech $2\pi/k \mathbf{p}_h$. Tyto hodnoty $F_U(2\pi/k \mathbf{p}_h)$ se nazývají strukturní faktor a jsou tabelovány. Rovněž jsou tabelovány rozvoje (7.6) všech dvojrozměrných a trojrozměrných mřížek (viz [11], str. 353 až 525).

Poznámka:

Terminologie je zde poněkud nesjednocená (srov. např. [6, 11, 12] vs. [13, 14]). Logické by bylo nazývat Fourierovu transformaci $F_U(\mathbf{p})$ elementární buňky strukturní amplitudou, čtverec jejího modulu $|F_U(\mathbf{p})|^2$ strukturním faktorem, hodnoty $F_U(2\pi/k \mathbf{p}_h)$, resp. $|F_U(2\pi/k \mathbf{p}_h)|^2$ strukturní amplitudou, resp. strukturním faktorem v bodě $\mathbf{p} = 2\pi/k \mathbf{p}_h$.

Uvedeme nyní, jak se strukturní faktor F_U počítá. Nechť elementární buňku tvoří U rozptylových center (atomy, ionty, molekuly) charakterizovaných funkcemi $f_u(\mathbf{x})$, $u = 1, \dots, U$ (elektronová hustota v rentgenové difrakto grafii, elektrostatický potenciál v elektronové difrakci apod.). Je-li u -té rozptylové centrum lokalizováno v elementární buňce v poloze

$$\mathbf{x}_u = \varepsilon_{u1} \mathbf{a}_1 + \dots + \varepsilon_{uN} \mathbf{a}_N, \quad \varepsilon_{ur} \in \langle 0, 1 \rangle, \quad (7.7)$$

charakterizuje elementární buňku funkce

$$f_U(\mathbf{x}) = \sum_{u=1}^U f_u(\mathbf{x}) * \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_u). \quad (7.8)$$

Její Fourierova transformace má podle (6.7) a (2.10) tvar

$$F_U(\mathbf{p}) = \sum_{u=1}^U F_u(\mathbf{p}) \exp(-i k \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}_u) \quad (7.9)$$

a hodnoty v bodech $\mathbf{p} = 2\pi/k \mathbf{p}_h$ jsou

$$F_U \left(\frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h \right) = \sum_{u=1}^U F_u \left(\frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h \right) \exp(-2\pi i \mathbf{p}_h \cdot \mathbf{x}_u). \quad (7.10)$$

Fourierova transformace $F_u(\mathbf{p})$ se nazývá atomový rozptylový faktor. Je rovněž tabelována (viz např. [15, 16]) pro rozptyl rentgenového záření, elektronů i neutronů. Ve strukturní analýze se pro strukturní faktor $F_U(2\pi/k \mathbf{p}_h)$ používá symbolu $F(hkl)$ a pro atomový rozptylový faktor $F_u(\mathbf{p})$ symbolu f (viz např. [11], str. 353).

Vypočteme strukturní faktor několika mřížek. Omezíme se na mřížky prvků (tj. $f_u(\mathbf{x}) = f_0(\mathbf{x})$, $F_u(\mathbf{p}) = F_0(\mathbf{p})$ pro všechna u), zato však uvedeme strukturní faktor téměř všech mřížek, které jsou pro prvky důležité (srov. [12], tab. 1.3).

Pro mřížku s elementárními buňkami tvořenými jediným atomem umístěným v počátku elementární buňky je zřejmě $F_U = F_0$.

Objemově centrovanou mřížku tvoří elementární buňky se dvěma atomy. Polohové vektory (7.7) atomů jsou $\mathbf{x}_1 = \mathbf{0}$, $\mathbf{x}_2 = 1/2(\mathbf{a}_1 + \dots + \mathbf{a}_N)$, takže strukturní faktor (7.10) je

$$F_U \left(\frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h \right) = F_0 \left(\frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h \right) \{1 + \exp[-i \pi (h_1 + \dots + h_N)]\} = F_0 [1 + (-1)^{h_1 + \dots + h_N}].$$

Takže

$$F_U = 2 F_0, \text{ když } h_1 + \dots + h_N = \text{sudé číslo},$$

$$F_U = 0, \text{ když } h_1 + \dots + h_N = \text{liché číslo}. \quad (7.11)$$

Plošně centrovaná trojrozměrná mřížka má elementární buňku se čtyřmi atomy s polohovými vektory $\mathbf{x}_1 = \mathbf{0}$, $\mathbf{x}_2 = 1/2(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$, $\mathbf{x}_3 = 1/2(\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)$, $\mathbf{x}_4 = 1/2(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_3)$. Strukturní faktor pak je

$$F_U = F_0 [1 + (-1)^{h_1 + h_2} + (-1)^{h_2 + h_3} + (-1)^{h_1 + h_3}].$$

Takže

$$F_U = 4 F_0, \text{ když čísla } h_1, h_2, h_3 \text{ jsou stejné parity},$$

$$F_U = 0, \text{ když čísla } h_1, h_2, h_3 \text{ jsou různé parity}.$$

Hexagonální nejměstnější mřížka má elementární buňku se dvěma atomy v polohách $\mathbf{x}_1 = \mathbf{0}$, $\mathbf{x}_2 = 2/3 \mathbf{a}_1 + 1/3 \mathbf{a}_2 + 1/2 \mathbf{a}_3$. Strukturní faktor je tedy dán výrazem

$$F_U = F_0 \left\{ 1 + \exp \left[-\frac{2}{3} \pi i (2 h_1 + h_2) \right] \exp(-i \pi h_3) \right\}.$$

Rozborem tohoto výrazu lze nahlédnout, že

$$F_U = 0, \text{ když } 2 h_1 + h_2 = 3n, \quad h_3 = \text{liché číslo},$$

$$F_U = 2 F_0, \text{ když } 2 h_1 + h_2 = 3n, \quad h_3 = \text{sudé číslo},$$

$$F_U = \frac{1}{2} (3 \mp i\sqrt{3}) F_0, \text{ tj. } |F_U|^2 = 3 |F_0|^2, \text{ když } 2 h_1 + h_2 = 3n \pm 1, \quad h_3 = \text{liché číslo},$$

$$F_U = \frac{1}{2} (1 \pm i\sqrt{3}) F_0, \text{ tj. } |F_U|^2 = |F_0|^2, \text{ když } 2 h_1 + h_2 = 3n \pm 1, \quad h_3 = \text{sudé číslo}.$$

Diamantová mřížka má elementární buňku s osmi atomy s polohovými vektory

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{0}, \quad \mathbf{x}_5 = \frac{1}{4} (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + 3 \mathbf{a}_3),$$

$$\mathbf{x}_2 = \frac{1}{2} (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2), \quad \mathbf{x}_6 = \frac{1}{4} (\mathbf{a}_1 + 3 \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3),$$

$$\mathbf{x}_3 = \frac{1}{2} (\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3), \quad \mathbf{x}_7 = \frac{1}{4} (3 \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3),$$

$$\mathbf{x}_4 = \frac{1}{2} (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_3), \quad \mathbf{x}_8 = \frac{3}{4} (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3).$$

Strukturní faktor (7.10) je pak dán výrazem

$$F_U = F_0 [1 + (-1)^{h_1+h_2} + (-1)^{h_2+h_3} + (-1)^{h_1+h_3} + (-i)^{h_1+h_2+3h_3} + (-i)^{h_1+3h_2+h_3} + (-i)^{3h_1+h_2+h_3} + i^{h_1+h_2+h_3}].$$

Rozborem se zjistí, že

$F_U = 0$, když h_1, h_2, h_3 jsou různé parity, nebo když $h_1 + h_2 + h_3 = 2(2n + 1)$,

$F_U = 8F_0$, když h_1, h_2, h_3 jsou vesměs sudá čísla a $h_1 + h_2 + h_3 = 4n$,

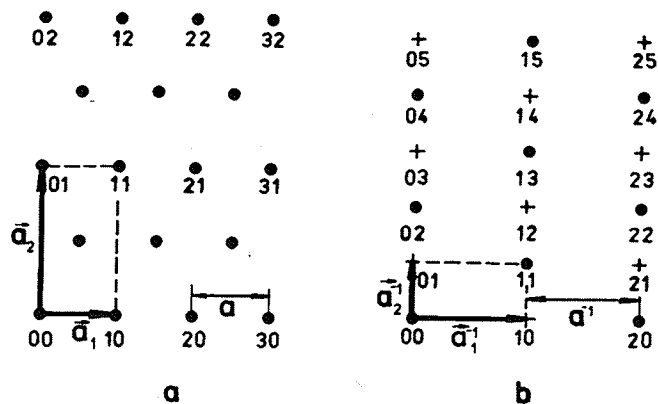
$F_U = 4(1 \pm i)F_0$, tj. $|F_U|^2 = 32|F_0|^2$, když h_1, h_2, h_3 jsou vesměs lichá čísla

(znaménko imaginární části je shodné se znaménkem u jedničky ve výrazu $h_1 + h_2 + h_3 = 4n \pm 1$).

Příklad 7.1

Vypočítáme znovu reciprokou mřížku k centrované obdélníkové mřížce v E_2 s poměrem stran obdélníkové elementární buňky 1:2, známou z příkladu 5.3. Nyní však zvolíme za základní vektory mřížky ortogonální vektory $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ podle obr. 7.1(a). Základní vektory reciproké mřížky se vypočítají stejně jako v příkladu 5.2 a jsou tedy $\mathbf{a}_1^{-1} = \mathbf{a}_1/a^2$, $\mathbf{a}_2^{-1} = \mathbf{a}_2/(2a)^2$ (srov. obr. 7.1(b)). Strukturní faktor je podle (7.11) roven nule v bodech, kde h_1, h_2 jsou různé parity (na obr. 7.1(b) jsou označeny křížkem) a $2F_0$ v bodech, kde h_1, h_2 jsou téže parity (na obr. 7.1(b) jsou označeny kolečky). Je zřejmé, že reciproká mřížka tvořená body s nenulovým strukturním faktorem je stejná jako v příkladě 5.3 (obr. 5.6(b)). (Mohlo by se zdát, že je rozpor v tom, že nenulové hodnoty struktur-

ního faktoru jsou nyní $2F_0$, kdežto v příkladě 5.3 by byly pouze F_0 . Skutečně tomu tak je, je však třeba mít na paměti, že ve výrazu (7.5) pro Fourierovu transformaci nekonečné mřížky je ve jmenovateli objem V_U elementární buňky. Elementární buňka má v příkladu 7.1 dvojnásobnou velikost ve srovnání s primitivní buňkou v příkladu 5.3 (srov. obr. 7.1(a) a 5.6(a)).



Obr. 7.1 Dvojměrná centrovaná obdélníková mřížka (a) a její reciproká mřížka (b). Za základní vektory mřížky byly zvoleny ortogonální vektory $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$, takže na elementární buňku připadají dvě rozptylová centra. V důsledku toho není strukturní faktor $F_U(h_1, h_2)$ týž pro všechny hodnoty h_1, h_2 , nýbrž je roven nule v mřížkových bodech označených křížky a $2F_0$ v bodech označených kolečky.

8 Konečná mřížka a její Fourierova transformace, mřížková a tvarová amplituda

Konečnou mřížku $f(\mathbf{x})$ – pravidelně rozmístěný motiv $f_U(\mathbf{x})$ (elementární buňka) v konečné oblasti V N -rozměrného prostoru – lze matematicky popsat dvěma formálně odlišnými způsoby:

$$f(\mathbf{x}) = f_U(\mathbf{x}) * \sum_{\mathbf{n} \in V} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n), \quad (8.1a)$$

$$f(\mathbf{x}) = f_U(\mathbf{x}) * \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^N} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) s(\mathbf{x}). \quad (8.1b)$$

Výraz (8.1a) je přirozenější, neboť suma představuje součet konečného počtu sčítanců (symbol $\mathbf{n} \in V$ vyjadřuje, že součet tvoří sčítance, v nichž koncový bod mřížkového vektoru \mathbf{x}_n (7.2) patří do oblasti V). Ve výrazu (8.1b) se naproti tomu vymezuje konečná oblast V z nekonečné mřížky (sčítá se přes všechny hodnoty multiindexu \mathbf{n}) pomocí tzv. tvarové funkce $s(\mathbf{x})$ (charakteristické funkce oblasti V):

$$\begin{aligned} s(\mathbf{x}) &= 1, \text{ když } \mathbf{x} \in V, \\ s(\mathbf{x}) &= 0, \text{ když } \mathbf{x} \notin V. \end{aligned} \quad (8.2)$$

Pokud předpokládáme, že konečná mřížka je tvořena jen kompletními elementárními buňkami, je výraz (8.1b) nezávislý na pořadí, v němž se provádí konvoluce a násobení, a oba výrazy (8.1a) a (8.1b) jsou ekvivalentní.

Ekvivalentní jsou i Fourierovy transformace obou výrazů (8.1). Jsou však vyjádřeny různými funkcemi.

Fourierova transformace výrazu (8.1a) je podle (6.7) a (2.10) součinem

$$F(\mathbf{p}) = F_U(\mathbf{p}) G(\mathbf{p}), \quad (8.3)$$

v němž funkce

$$G(\mathbf{p}) = \sum_{\mathbf{n} \in V} \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_n) \quad (8.4)$$

je součtem konečného počtu fázorů, který v. Laue [18] nazval mřížkovou amplitudou. Je zřejmě periodickou funkcí s $2\pi/k$ -násobnou periodicitou reciproké mřížky a poněvadž $\mathbf{p}_h \cdot \mathbf{x}_n$ je celé číslo, je

$$\max |G(\mathbf{p})| = G\left(\frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h\right) = \frac{V}{V_U}. \quad (8.5)$$

Podíl V/V_U je počet elementárních buněk tvořících konečnou mřížku.

Fourierova transformace výrazu (8.1b) je podle (6.7), (6.9), (5.6) a (7.4) dána výrazem

$$F(\mathbf{p}) = \frac{1}{A^N V_U} F_U(\mathbf{p}) \sum_{\mathbf{h} \in \mathbb{Z}^N} \delta\left(\mathbf{p} - \frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h\right) * S(\mathbf{p}), \quad (8.6)$$

kde

$$S(\mathbf{p}) = \mathcal{F}\{s(\mathbf{x})\} = A^N \int_V \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) d^N \mathbf{x}. \quad (8.7)$$

Funkci $S(\mathbf{p})$ nazval Ewald [19] tvarovou amplitudou. Týmž termínem se označují i veličiny úměrné Fourierově transformaci tvarové funkce, zejména bezrozměrné veličiny

$$\Psi(\mathbf{p}) = \frac{1}{A^N V} S(\mathbf{p}) \quad \text{a} \quad G_1(\mathbf{p}) = \frac{1}{A^N V_U} S(\mathbf{p}) \quad (8.8)$$

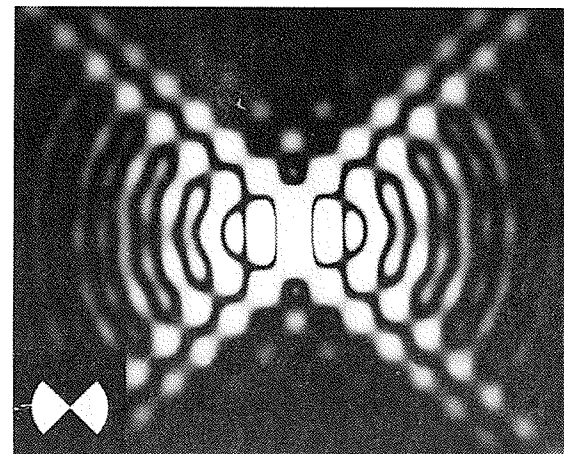
Je zřejmé, že pro $\mathbf{p} = \mathbf{0}$ nabývají absolutní hodnoty těchto veličin maximálních hodnot

$$S(0) = A^N V, \quad \Psi(0) = 1, \quad G_1(0) = \frac{V}{V_U}. \quad (8.9)$$

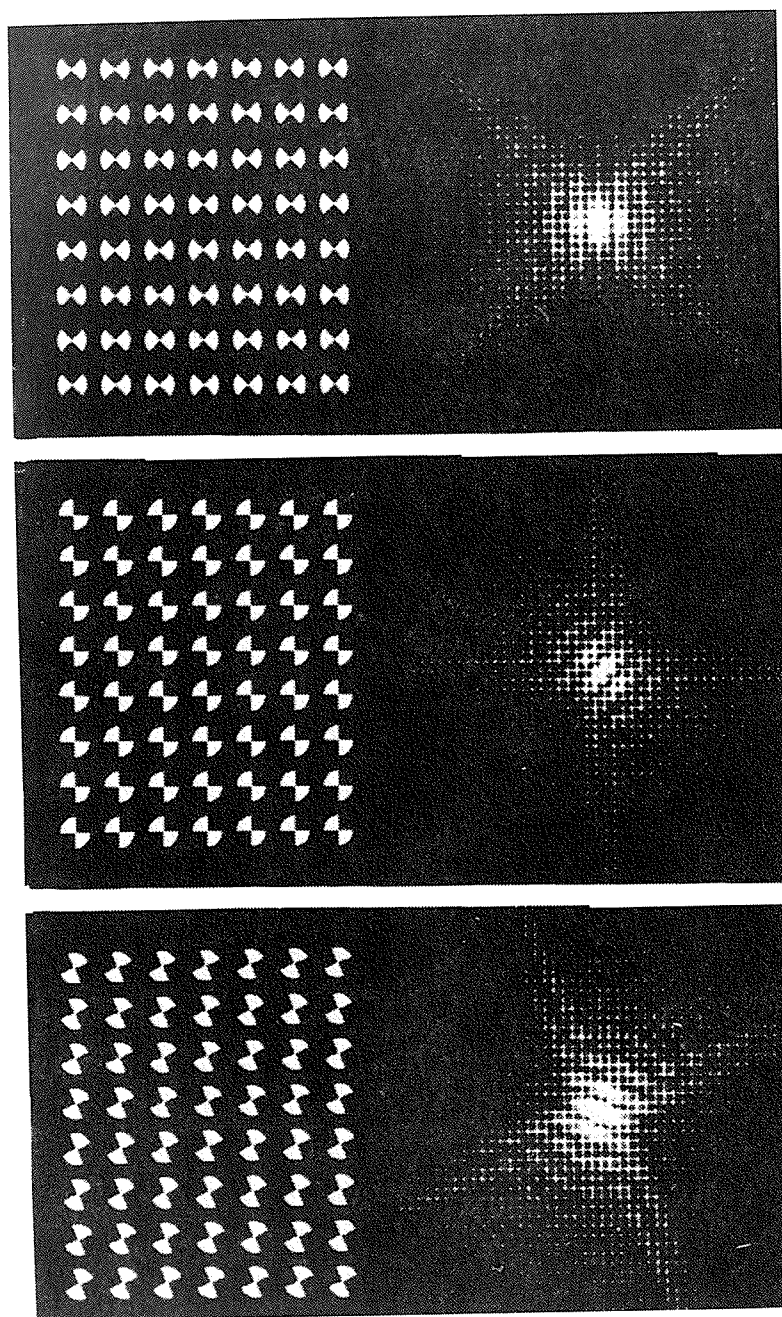
Použitím tvarové amplitudy G_1 lze přepsat Fourierovu transformaci (8.6) konečné mřížky do tvaru

$$F(\mathbf{p}) = F_U(\mathbf{p}) \sum_{\mathbf{h} \in \mathbb{Z}^N} \delta\left(\mathbf{p} - \frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h\right) * G_1(\mathbf{p}), \quad (8.10)$$

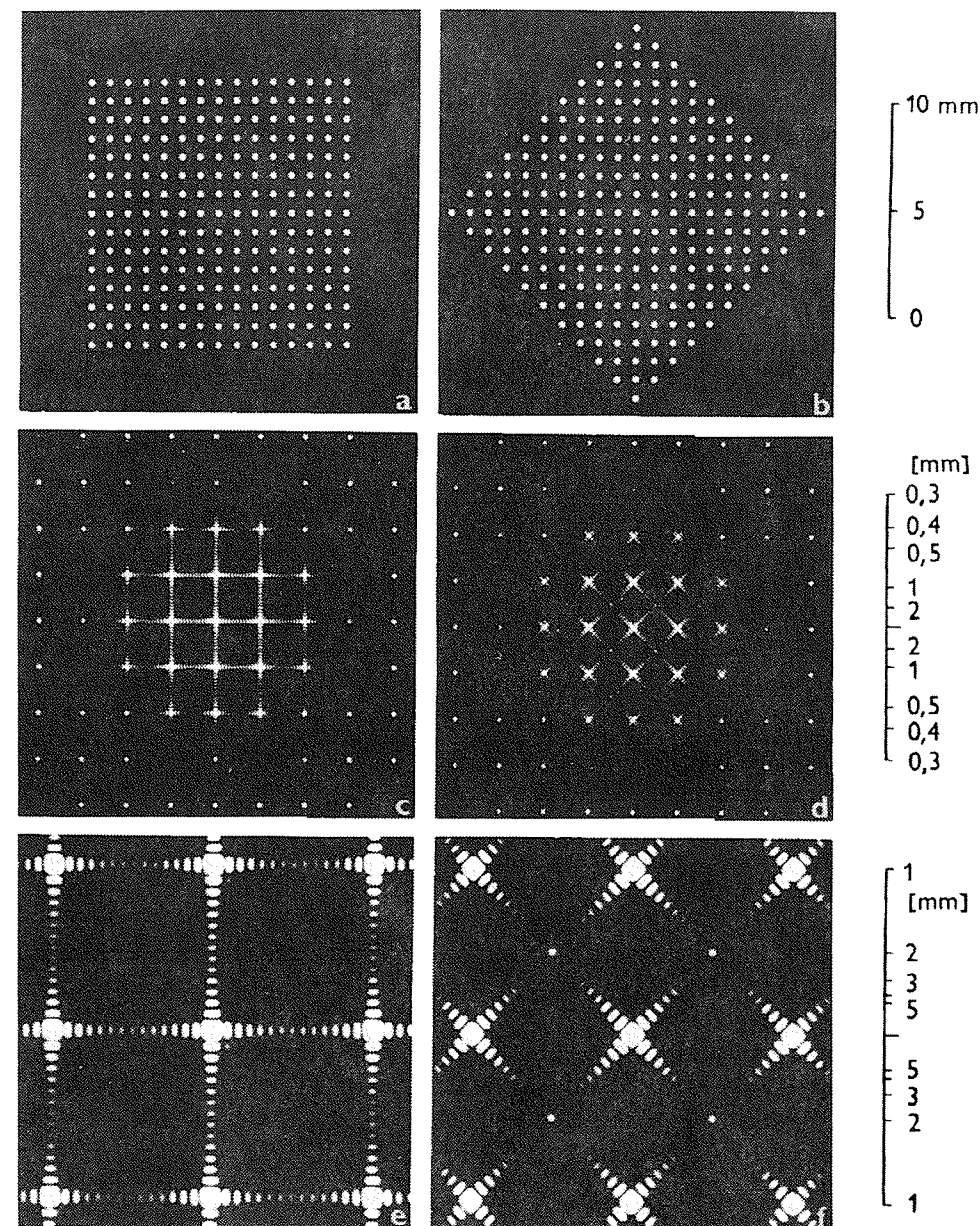
jenž má přesně stejnou výstavbu jako výraz (8.1b) charakterizující konečnou mřížku. Fourierovu transformaci konečné mřížky tvoří tedy tvarové amplitudy



Obr. 8.1 Fraunhoferova difrakce na dvojčetné Siemensově hvězdici. Hvězdice je vyobrazena v levém dolním rohu difrakčního obrazce. Ramena difrakčního obrazce jsou kolmá na rovné úseky okraje hvězdice. Dvojčetné Siemensovy hvězdice je použito jako základního motivu, jehož translací vznikly mřížky na obr. 8.2.



Obr. 8.2 Dvojměrné čtvercové mřížky v levém sloupci jsou tvořeny translací různě orientovaných dvojčetných Siemsenových hvězdic. Fraunhoferovy difrakční jevy v pravém sloupci ukazují, že difrakční obrazec na mřížce je vymezen difrakcí na motivu vytvářejícím mřížku (srov. orientaci ramen kolmých k rovným okrajům Siemsenovy hvězdičky).



Obr. 8.3 Vliv vnějšího tvaru konečné mřížky na tvar difrakčních stop [23]. (a), (b) – dvojrozměrné mřížky s touž strukturou (čtverečnou), avšak s různými vnějšími okraji. (c), (e) a (d), (f) – Fraunhoferova difrakce z (a) a (b). (c), (d) – celá střední část difrakčního obrazce. (e), (f) – detail ukazující tvar difrakčních stop (čtverec modulu mřížkové amplitudy $G(\mathbf{p})$). Vedlejší maxima uprostřed buněk recipročné mřížky zřetelná v (f) zanikají s rostoucí velikostí mřížky. (Jejich intenzita je úměrná počtu rozptylových center, kdežto intenzita hlavních maxim roste s kvadrátem počtu rozptylových center.)

$G_1(\mathbf{p})$ rozmístěné v mřížkových bodech $2\pi/k \mathbf{p}_h$ a násobené Fourierovou transformací $F_U(\mathbf{p})$ elementární buňky. Tato analogie mezi konečnou mřížkou a její Fourierovou transformací je snad ještě zřejmější z výrazů, které se získají, když se v (8.1b) a (8.10) provede nejprve násobení a potom konvoluce:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{n \in \text{inf}} s(\mathbf{x}_n) f_U(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n), \quad (8.11)$$

$$F(\mathbf{p}) = \sum_{h \in \text{inf}} F_U \left(\frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h \right) G_1 \left(\mathbf{p} - \frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h \right). \quad (8.12)$$

Jinými slovy a formálně nahlíženo, Fourierovou transformací konečné mřížky je opět „konečná“ mřížka, v níž tvarové amplitudy G_1 hrají roli elementárních buněk f_U a Fourierova transformace F_U elementární buňky hraje roli tvarové funkce s a omezuje rozsah „konečné“ mřížky v prostoru Fourierovy transformace (srov. obr. 5.3, 8.2, 8.3). Lze v tom opět spatřovat projev reciprocity. Velkému v prostoru proměnné \mathbf{x} odpovídá malé ve Fourierově prostoru proměnné \mathbf{p} a naopak. Věcně však není analogie mezi konečnou mřížkou a její Fourierovou transformací tak úplná jako formálně. Už proto, že konečná mřížka je prostorově omezena tvarovou funkcí $s(\mathbf{x})$, jež nabývá nulové hodnoty skokem (viz (8.2)), kdežto Fourierova transformace konečné mřížky je konečnou mřížkou ve Fourierově prostoru jen v tom smyslu, že je omezena Fourierovou transformací $F_U(\mathbf{p})$ elementární buňky, jež jde k nule pouze asymptoticky, když $p \rightarrow \infty$.

Fourierovu transformaci konečné mřížky lze tedy vyjádřit dvěma formálně různými výrazy. Jednak výrazem (8.3), prostřednictvím mřížkové amplitudy (8.4), jednak výrazem (8.10), resp. (8.12), prostřednictvím tvarové amplitudy (8.8). Mohlo by se zdát, že k výpočtu Fourierovy transformace konečné mřížky je vždy výhodnější použít výrazu (8.3), který je součinem dvou jednoduchých funkcí, než výrazů (8.10) nebo (8.12), které představují N -násobné nekonečné řady. Lze však uvést aspoň tři důvody, které vysvětlují, proč tomu bývá právě naopak:

(i) Mřížkovou amplitudu $G(\mathbf{p})$ bývá obtížné vypočítat podle definice (8.4). Je-li totiž vnější tvar mřížky poněkud komplikovanější, bývá obtížné specifikovat meze součtu (8.4). Proto může být užitečný vztah, který se získá porovnáním (8.3) a (8.10)

$$G(\mathbf{p}) = \sum_{h \in \text{inf}} G_1(\mathbf{p}) * \delta \left(\mathbf{p} - \frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h \right) = \sum_{h \in \text{inf}} G_1 \left(\mathbf{p} - \frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h \right). \quad (8.13)$$

Vyjádruje mřížkovou amplitudu $G(\mathbf{p})$ (periodická funkce) superpozicí tvarových amplitud $G_1(\mathbf{p})$ (neperiodická funkce).

(ii) Je-li konečná mřížka tvořena velkým počtem elementárních buněk v každém směru, má modul tvarové amplitudy $|G_1(\mathbf{p})|$ velmi ostré maximum v počátku, tj. $G_1(\mathbf{p})V_U/V$ se výrazněji liší od nuly jen v blízkosti počátku. V důsledku toho v blízkosti bodů $\mathbf{p} = 2\pi/k \mathbf{p}_h$ platí

$$G(\mathbf{p}) \doteq G_1 \left(\mathbf{p} - \frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h \right), \text{ pokud } \left| \mathbf{p} - \frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h \right| \ll \frac{2\pi}{|k|} a_r^{-1}, \quad (8.14)$$

neboť příspěvky všech ostatních členů řady (8.13) jsou zanedbatelné. Tvarovou amplitudu $G_1(\mathbf{p} - 2\pi/k \mathbf{p}_h)$ lze tedy použít jako lokální aproximaci mřížkové amplitudy $G(\mathbf{p})$ v okolí bodů $\mathbf{p} = 2\pi/k \mathbf{p}_h$. To byl také původní podnět ke studiu tvarové amplitudy, když v r. 1936 v. Laue [20] approximoval součet (8.4) integrálem vyjadřujícím tvarovou amplitudu G_1 .

(iii) Konečná mřížka má vždy tvar nějakého N -rozměrného mnohostěnu (polygonu v E_2 , mnohostěnu v E_3). Tvarové amplitudy mnohostěnu lze poměrně snadno vypočítat, neboť integrál (8.7) je vždy možné vypočítat analyticky, a tím vyjádřit tvarovou amplitudu algebraicky. Upozornil na to v. Laue již v r. 1936 [20] a doporučoval využít k výpočtu integrálu (8.7) tzv. Abbeovy transformace (viz [23]). V r. 1939 Patterson [22] počítal tvarové amplitudy některých mnohostěnu tak, že rozložil mnohostěn na čtyřstěny, vypočetl tvarovou amplitudu obecného čtyřstěnu a tvarovou amplitudu mnohostěnu vyjádřil jako superpozici tvarových amplitud čtyřstěnu. Algebraické formule pro tvarové amplitudy obecných mnohoúhelníků a mnohostěnu však byly publikovány teprve nedávno (viz [23]). Pomocí nich se tvarová amplituda mnohostěnu, resp. mnohoúhelníků bez obtíží vypočítá a Fourierovu transformaci konečné mřížky je pak výhodné počítat podle vztahu (8.12). Přitom je vzhledem k (8.14) možné nahradit nekonečnou řadu (8.12) několika sčítanci, často dokonce jediným.

9 Podmínky pro směry hlavních difrakčních maxim při difrakci na mřížkách

V úvodu bylo vysvětleno, že amplituda záření difraktovaného nějakým objektem $f(\mathbf{x})$ ve směru $\mathbf{n} = \mathbf{n}_0 + \mathbf{p}$ je určena Fourierovou transformací $F(\mathbf{p})$ objektu f v bodě, jehož průvodič je roven vektoru rozptylu \mathbf{p} . Několik předchozích odstavců pojednávalo o Fourierově transformaci mřížek. Je tedy vše připraveno k diskusi difrakce na mřížkách. Začneme difrakcí na trojrozměrné mřížce.

Viděli jsme, že Fourierovou transformací mřížky je reciproká mřížka definována vztahy (5.7) homogenně a izotropně deformovaná v poměru $2\pi/k$ (srov. např. (5.6)). V případě, že původní mřížka je konečná, jsou mřížkové polohy $2\pi/k \mathbf{p}_h$ této reciproké mřížky osazeny tvarovými amplitudami G_1 (srov. (8.12)), jež superponují a vytvářejí mřížkovou amplitudu $G(\mathbf{p})$ (srov. (8.13)). Hlavní difrakční maxima jsou tedy ve směrech \mathbf{n}_h pro něž je vektor rozptylu roven mřížkovému vektoru $\mathbf{p} = 2\pi/k \mathbf{p}_h$ (srov. (8.5)), takže podle (1.3) je

$$\mathbf{n}_h - \mathbf{n}_0 = \frac{2\pi}{k} \mathbf{p}_h. \quad (9.1)$$

Zde ovšem k už není konstanta, kterou bychom si mohli volit (jako ve Fourierově transformaci), nýbrž vlnové číslo $k = 2\pi/\lambda$ (λ je vlnová délka záření), jak je tomu v integrálu (1.4). Podmínka pro směry \mathbf{n}_h hlavních maxim tím nabývá tvaru

$$\frac{\mathbf{n}_h - \mathbf{n}_0}{\lambda} = \mathbf{p}_h, \quad (9.2)$$

známého z příruček strukturní analýzy (viz též např. [18] str. 115). Geometrickou interpretací této podmínky je Ewaldova konstrukce, již se rozumí toto (viz obr. 9.1):

(i) Pomocí vztahů (5.7), resp. (5.17) sestojíme reciprokou mřížku k mřížce, na níž dochází k difrakci, a mřížkové polohy osadíme tvarovými amplitudami G_1 vypočtenými podle (8.7) a (8.8) (do (8.7) dosazeno $k = 2\pi$).

(ii) Počátkem O reciproké mřížky vedeme kulovou plochu ρ o poloměru $1/\lambda$ a se středem v bodě C určeném podmínkou $CO = n_0/\lambda$ (Ewaldova kulová plocha).

(iii) Z rovnice (9.2) pak vyplývá, že difrakční maxima mají směry \mathbf{n}_h ze středu C k těm bodům Q kulové plochy ρ , které koincidují s mřížkovými body \mathbf{p}_h reciproké mřížky.

Jiným vyjádřením podmínky (9.2) jsou Laueho rovnice [24]. Získají se z rovnice (9.2) postupným skalárním násobením základními vektory $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ mřížky. Použitím (5.7) dostaneme

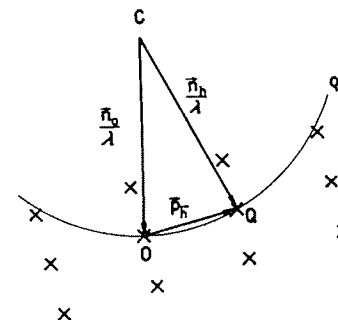
$$\begin{aligned} (\mathbf{n}_h - \mathbf{n}_0) \cdot \mathbf{a}_1 &= h_1 \lambda, \quad \text{tj.} \quad \cos \alpha_1 - \cos \alpha_{01} = h_1 \lambda / a_1, \\ (\mathbf{n}_h - \mathbf{n}_0) \cdot \mathbf{a}_2 &= h_2 \lambda, \quad \text{tj.} \quad \cos \alpha_2 - \cos \alpha_{02} = h_2 \lambda / a_2, \\ (\mathbf{n}_h - \mathbf{n}_0) \cdot \mathbf{a}_3 &= h_3 \lambda, \quad \text{tj.} \quad \cos \alpha_3 - \cos \alpha_{03} = h_3 \lambda / a_3, \end{aligned} \quad (9.3)$$

kde α_{0r} značí úhel $(\mathbf{n}_0, \mathbf{a}_r)$, tj. úhel směru dopadajícího záření a směru základního vektoru \mathbf{a}_r mřížky. Podobně α_r značí úhel $(\mathbf{n}_h, \mathbf{a}_r)$, tj. úhel směru difrakčního maxima a vektoru \mathbf{a}_r .

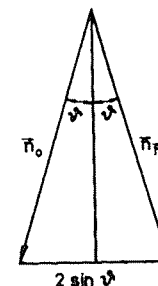
Porovnáním velikostí vektorů na obou stranách rov. (9.2) se získá známá Braggova rovnice [25]. Podle obr. 9.2 platí $\mathbf{n}_h - \mathbf{n}_0 = 2 \sin \vartheta$ a z mřížkové geometrie je známo, že $\mathbf{p}_h = 1/d_h$ kde d_h je mezivrstevná vzdálenost rovin s Millerovými indexy $(h_1 h_2 h_3)$. Takže z (9.2) plyne

$$\lambda = 2 d_{h_1 h_2 h_3} \sin \vartheta. \quad (9.4)$$

Z Ewaldovy konstrukce (obr. 9.1) je zřejmé, že v obecném případě nemusí Ewaldova kulová plocha procházet žádným jiným mřížkovým bodem reciproké mřížky kromě počátku O , takže žádné hlavní difrakční maximum nemusí



Obr. 9.1 Ewaldova konstrukce. \times představují tvarové amplitudy G_1 v mřížkových bodech reciproké mřížky.



Obr. 9.2 K odvození Braggovy rovnice.

Dvojmnořmn analoie k pave probrane trojmnořmne difrakci, kdy vektory \mathbf{n}_h , \mathbf{n}_0 leží v rovine dvojmnořmne mřııky, by mohla eventualne mıt jisty vyznam pro planrnı optiku, nikoli vsak pro strukturnı analyzu. Nebudeme se jı proto zabyvat. Uvedeme jen, že situace by byla obdobna, neboť Ewaldova kruhnice by prochazela poatkem dvojmnořmne reciproke mřııky a dve Laueho rovnice by obecne peurcovaly dva smerove kosiny smeru hlavnıho difrakcnıho maxima vazane jeste podmınkou, že musı bıt slořkami jednotko-

Mějme tedy dvojrozměrnou mřížku se základními vektory $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ a necht' na ni dopadá rovinná vlna, jejíž vektor šíření \mathbf{n}_0 svírá s normálou k mřížce úhel α_{03} (viz obr. 9.4), tj.

$$\cos \alpha_{03} = n_0 \cdot \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|}.$$

$$\frac{n_h - n_0}{\lambda} = p_h + l_h \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{[\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2]} = h_1 \mathbf{a}_1^{-1} + h_2 \mathbf{a}_2^{-1} + l_{h_1, h_2} \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{[\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2]}, \quad (9.5)$$
[illegible]

Obr. 9.4 Ewaldova konstrukce při šikmém dopadu záření na dvojrozměrnou mřížku L . RL – reciproká mřížka, ρ – Ewaldova kulová plocha, P_0P – rovina difrakčního obrazce kolmého na směr \mathbf{n}_0 dopadajícího záření.

$h_1 \mathbf{a}_1^{-1} + h_2 \mathbf{a}_2^{-1}$ dvojrozměrné reciproké mřížky a bodem Q , v němž kolmice jdoucí bodem \mathbf{p}_h protíná Ewaldovu kulovou plochu ρ .

Skalárním násobením rovnice (9.5) postupně vektory \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 a $\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2 / |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|$ dostaneme

$$\begin{aligned}\cos \alpha_1 - \cos \alpha_{01} &= h_1 \lambda / a_1, \\ \cos \alpha_2 - \cos \alpha_{02} &= h_2 \lambda / a_2, \\ \cos \alpha_3 - \cos \alpha_{03} &= l_{h_1, h_2} \lambda.\end{aligned}\quad (9.6)$$

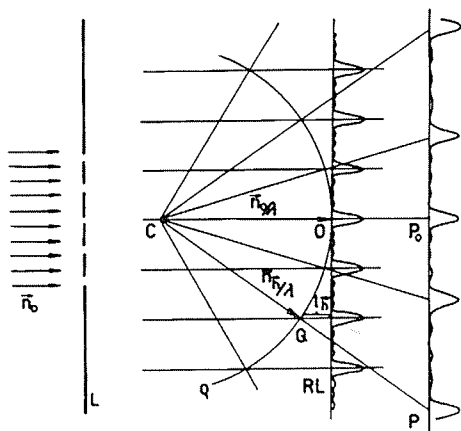
Pro $\lambda < 2a$, existují vždy směry \mathbf{n}_h ($\cos \alpha_1$, $\cos \alpha_2$, $\cos \alpha_3$), jejichž směrové kosiny tyto rovnice splňují, neboť parametr l_{h_1, h_2} může nabývat všech reálných hodnot, nejen celočíselných. Je ovšem zřejmé, že difrakční obrazce v rovině kolmé k primárnímu směru \mathbf{n}_0 nemusí mít středovou symetrii. Mívají zajímavý vzhled, kdy difrakční stopy jsou rozloženy po obloucích představujících části kuželoseček.

Při kolmém dopadu je $\cos \alpha_{01} = \cos \alpha_{02} = 0$, $\cos \alpha_{03} = -1$, takže podmínky (9.6) nabudou tvaru

$$\begin{aligned}\cos \alpha_1 &= h_1 \lambda / a_1, \\ \cos \alpha_2 &= h_2 \lambda / a_2, \\ \cos \alpha_3 &= l_{h_1, h_2} \lambda - 1.\end{aligned}\quad (9.7)$$

Ewaldova konstrukce odpovídající kolmému dopadu záření na dvojrozměrnou mřížku na obr. 9.5 ukazuje, že difrakční obrazec v rovině kolmé na primární směr má v tomto případě středovou symetrii. Difrakční obrazce na obr. 5.3, 8.2 a 8.3 byly získány při tomto experimentálním uspořádání.

Závěrem bychom chtěli znovu zdůraznit, že rovnice (9.1) až (9.7) představují právě jen podmínky pro směry hlavních difrakčních maxim. V běžné řeči se jim totiž říká difrakční podmínky, čímž může vznikat dojem, že v jiných



Obr. 9.5 Ewaldova konstrukce při kolmém dopadu záření na dvojrozměrnou mřížku L . RL – reciproká mřížka, ρ – Ewaldova kulová plocha, P_0P – rovina difrakčního obrazce.

směrech žádné záření difraktováno není. Mluví se pak o diskrétních difrakčních stopách a podobně. To je jistě tím oprávněnější, čím jsou konečně mřížky, na nichž k difrakci dochází, větší. Určitěji řečeno, měly by mít aspoň stovku či stovky elementárních buněk v každém směru. Tak tomu také je v klasických oblastech strukturní analýzy. Jsou-li konečné mřížky menší, jsou zřetelně pozorovatelná i vedlejší difrakční maxima (srov. obr. 5.3, 8.2, 8.3), někdy i spojitě rozložení intenzity v difrakčním obrazci.

Při studiu povrchů difrakčními metodami, zejména při selekční difrakci pomalých elektronů [26], se může uplatňovat i difrakce na mřížkách, které jsou v některém směru tvořeny jen desítkou či desítkami elementárních buněk. Pak je ovšem žádoucí nespokojit se s hlavními difrakčními maximy, ale – ve smyslu Ewaldovy konstrukce – chápat příslušné difraktogramy jako řezy čtvercem modulu Fourierovy transformace těchto mřížek Ewaldovou kulovou plochou.

Smyslem této kapitoly bylo uvést matematickou stránku kinematické teorie difrakce a tím formulovat všeobecné východisko k interpretaci difrakčních obrazců různého druhu. Ve fyzice povrchů je to nejčastěji difrakce pomalých elektronů (LEED) a difrakce rychlých elektronů na odraz (RHEED). V poslední době však jde i o analýzu obrazů povrchu získaných elektronovým mikroskopem s pomalými elektrony (LEEM) pomocí difrakce světla. Tímto způsobem lze studovat jednak vlastnosti přístroje (přenosová funkce, rozlišovací schopnost, astigmatismus), jednak vlastnosti zobrazeného povrchu (nezřetelné periodicity, orientace lineárních útvarů apod.).

Znalost Fourierovy transformace mřížek je nezbytná také při výpočtech Fourierovy transformace modelů povrchových struktur.

Poděkování

Autor děkuje Mgr. K. Komrskové za pomoc při vyhotovení strojopisu této kapitoly. Děkuje také RNDr. M. Fojtíkové a RNDr. R. Chmelíkovi za přečtení strojopisu a za připomínky.

LITERATURA

- [1] KITTEL CH.: Introduction to Solid State Physics. 4th ed., John Wiley, Inc., New York 1971, 62.
- [2] KOMRSKA J.: Proč Fourierova transformace dobře popisuje Fraunhoferovu difrakci. Pokroky matematiky, fyziky a astronomie 29 (1984), 321–338.
- [3] STEIN E.M., WEIS G.: Introduction to Fourier Analysis on Euclidean spaces. Princeton University Press, Princeton, N.J. 1975, 2.
- [4] SCHWARTZ L.: Matematické metody ve fyzice. SNTL, Praha 1972, 203.
- [5] SCHMEISSER H.-J., TRIEBEL H.: Topics in Fourier Analysis and Function spaces. Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G., Leipzig 1986, 14.
- [6] KASPER J.S., LONSDALE K. (eds.): International Tables for X-Ray Crystallography. Vol. 2. The Kynoch Press, Birmingham 1959, 66.
- [7] HOSEMAN R., BAGCHI S.N.: Direct Analysis of Diffraction by Matter. North-Holland, Amsterdam 1962, 79.
- [8] COWLEY J.M.: Diffraction Physics. North-Holland, Amsterdam 1975, 22–23.

- [9] JAMES R.W.: The Optical Principles of the Diffraction of X-Rays. G. Bell and Sons Ltd., London 1967, 404.
- [10] KOMRSKA J.: Symetrie a obecné vlastnosti Fraunhoferových difrakčních jevů. Ve sborníku Sedmá konference čs. fyziků, Praha 24.–28.8. 1981, část II. Fyzikální vědecká sekce JČSMP, str. C8-07 až C8-14.
- [11] HENRY N.F.M., LONSDALE K. (eds.): International Tables for X-Ray Crystallography. Vol. 1. The Kynoch Press, Birmingham 1952, 12.
- [12] KITTEL CH.: Úvod do fyziky pevných látek. Academia, Praha 1985, 72.
- [13] BRAGG L.: The Crystalline State. A General Survey. G. Bell & Sons Ltd., London 1966, 96.
- [14] KRAUS I.: Úvod do strukturní rentgenografie. Academia, Praha 1985, odst. 4.8.
- [15] MACGILLAVRY C.H., RIECK G.D. (eds.): International Tables for X-Ray Crystallography, Vol. 3. The Kynoch Press, Birmingham 1962, section 3.3.
- [16] IBERS J.A., HAMILTON W.C. (eds.): International Tables for X-Ray Crystallography, Vol. 4. The Kynoch Press, Birmingham 1974, section 2.
- [17] GANTMACHER F.R.: Teorija matric. Izdatel'stvo Nauka, Moskva 1966.
- [18] LAUE M.V.: Materiewellen und ihre Interferenzen. 2. vydání. Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig, Leipzig 1948, §§ 9,13.
- [19] EWALD P.P.: X-ray diffraction by finite and imperfect crystal lattices. The Proceedings of the Physical Society (London) 52 (1940), 167–174.
- [20] LAUE M.V.: Die äussere Form der Kristalle in ihrem Einfluss auf die Interferenzerscheinungen an Raumgittern. Annalen der Physik. 5. Folge 26 (1936), 55–68.
- [21] EWALD P.P.: Zur Theorie der Interferenzen der Röntgenstrahlen in Kristallen. Physikalische Zeitschrift 14 (1913), 465–472.
- [22] PATTERSON A.L.: The Diffraction of X-Rays by Small Crystalline Particles. Phys. Rev. 56 (1939), 972–977.
- [23] KOMRSKA J.: Algebraic expressions of shape amplitudes of polygons and polyhedra. Optik 80 (1988), 171–183.
- [24] FRIEDRICH W., KNIPPING P., LAUE M.: Interferenz-Erscheinungen bei Röntgenstrahlen. Sitzungsberichte der Bayer. Akademie der Wissenschaften. Mathematisch-physikalische Klasse (1912), 303–322, rov. (7).
- [25] BRAGG W.L.: The Diffraction of Short Electromagnetic Waves by a Crystal. Proceedings of the Cambridge Philosophical Society 17 (1912–1914), 43–57, str. 48.
- [26] DRAHOŠ V., DELONG A., KOLAŘÍK V., LENC M.: On a mirror-type selected area LEED. Journal de Microscopie 18 (1973), 135–147.