

2 Difrakce, rozdělení difrakčních jevů a difrakční integrály

2.1 Vymezení pojmů rozptyl, difrakce a interference

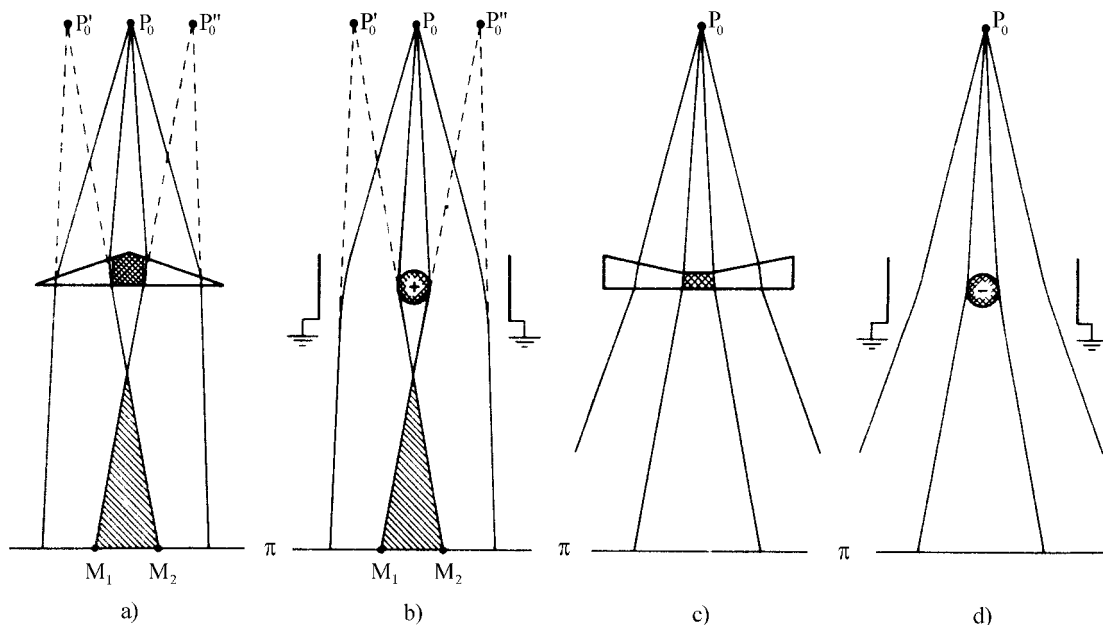
2.2 Fresnelova a Fraunhoferova difrakce

2.3 Difrakční integrály

Na začátku předcházející kapitoly jsme s obtížemi vymezovali pojem vlnění. Nyní budeme mít neméně potíže s vymezením pojmu difrakce. Zejména je nesnadné přísně rozlišovat mezi difrakcí, rozptylem a interferencí. Usilovat o přesnou definici těchto pojmů pravděpodobně ani nemá smysl. Má však smysl ozřejmit, jak se těchto termínů používá v současné vědecké komunikaci. Než tak učiníme, zmíníme se o etymologii slova difrakce.

Slovo difrakce vytvořil zakladatel teorie difrakce F. M. Grimaldi v polovině 17. století. Složil je z latinského **dis-** vyjadřujícího opak, negaci (srov. např. disharmonie, diskvalifikace, disproporce) a **frangere** s hlavním významem lámat. Grimaldi tímto slovem charakterizoval světlo, jež se odchyluje od přímočarého šíření jinak než odrazem nebo lomem. Jeho kniha „Physico-mathesis de lumine, coloribus, et iride“ (Fyzikálně matematický výklad světla, barev a duhy) [1] téměř začíná (Propositio I) tvrzením: *Lumen propagatur seu diffunditur non solum directe, refracte ac reflexe, sed etiam alio quodam quarto modo, diffracte.* (Světlo se šíří nebo proniká nejen přímo, lomem a odrazem, nýbrž někdy ještě také jakýmsi čtvrtým způsobem, difrakcí.) Toto konstatování slouží dodnes jako definice, nebo spíše vymezení, pojmu difrakce. V dnešní terminologii jen doplníme, že Grimaldi předpokládal, že se světelný svazek šíří homogenním a izotropním prostředím a že použil slova difrakce, aby charakterizoval světelné jevy za nějakou překážkou vnořenou do takového prostředí a omezující svazek. Českým ekvivalentem slova difrakce je ohyb vlnění.

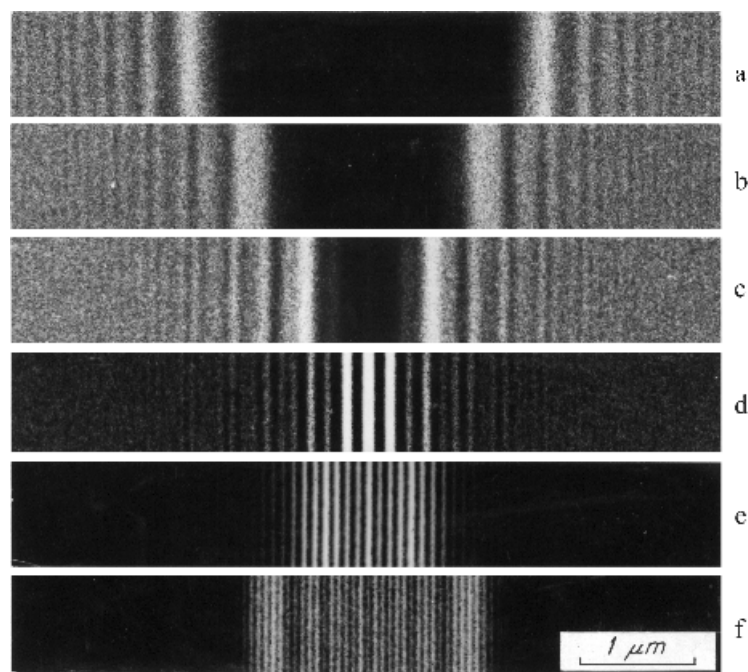
2.1 Vymezení pojmů rozptyl, difrakce a interference



Obrázek 1: Porovnání Fresnelova dvojhranolu (a) a (c) a Möllenstedtova-Dükerova dvojhranolu (b) a (d). Působením dvojhranolů (a) a (b) vzniká interferenční oblast, dvojhranolů (c) a (d) odchylní světelné resp. elektronové svazky od sebe.

Vhodným příkladem ilustrujícím používání termínů rozptyl, difrakce a interference je Möllenstedtův-Dükerův pokus, při němž elektrony, vycházející z čárového zdroje P_0 , interagují s vláknem a elektrostatickým polem tzv. elektrostatického dvojhranolu (obr. 1). Pokud je vlákno dvojhranolu uzemněno, dochází k ohybu na vlákně (viz obr. 2c). Je-li na vlákně záporný potenciál (obr. 2a,b), cítíme, že slovo ohyb je nevhodné, a použijeme

raději slova rozptyl. Je-li však na vlákně kladný potenciál (obr. 2d,e,f), začneme si představovat virtuální zdroje P'_0 , P''_0 a uijeme termínu interference (aspoň pro jevy v interferenční oblasti M_1 M_2 roviny pozorování π).



Obrázek 2: Rozptyl (a), (b), ohyb (c) a interference (d), (e), (f) elektronů (74,8 keV) získané elektrostatickým dvojhranolem při různých potenciálech vlákna: (a) $\varphi = -20$ V; (b) $\varphi = -10$ V; (c) $\varphi = 0$ V; (d) $\varphi = 10$ V; (e) $\varphi = 20$ V; (f) $\varphi = 30$ V [2], [4].

Je zajímavé, že ve zcela analogické situaci — odlišné od elektrostatického dvojhranolu jen tím, že uspořádání má rotační symetrii, takže nemá smysl si představovat nějaké virtuální zdroje — již termínu interference nepoužijeme. Když elektrony interagují s nabitými kuličkami (obr. 3), použijeme vždy termínu rozptyl, ať je jejich náboj kladný nebo záporný.

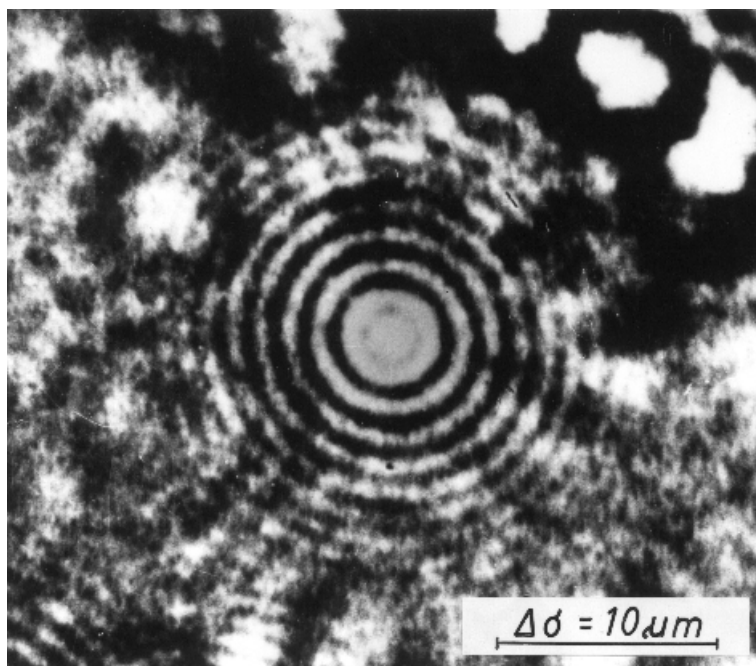
Podobných příkladů lze uvést mnoho. Dávají nám odvahu nabídnout tato pravidla pro používání termínů interference, difrakce a rozptyl:

Termínu interference (z anglického **to interfere** tj. vnášet, překážet, střetávat se, rušit) se používá především k označení skládání libovolného (většinou však konečného) počtu vln s přihlédnutím k jejich fázi. Tedy tak, jak tento pojem zavedl T. Young. Termínu interference (resp. interferenční jev, interferogram) ve významu rozložení intenzity v nějaké rovině pozorování používáme jen pro výsledek vzájemné interakce vlnění pocházejících od konečného počtu (reálných nebo virtuálních) zdrojů. Jestliže je počet zdrojů nekonečný (např. osvětlený otvor ve stínítku, tj. plošný zdroj) použijeme pro vzniklé rozložení intenzity termínu rozptylový nebo difrakční jev (obrazec).

Termínu difrakce používáme tehdy, když lze situaci aproximovat interakcí vlnění s dvojrozměrným objektem, jehož jednotlivosti jsou větší než vlnová délka (v instrumentální optice podstatně větší než vlnová délka), např. difrakce světla na polorovině, difrakční jevy v okolí ohniska čočky apod. Kromě toho se však termínem difrakce charakterizují jevy vzniklé interakcí záření na trojrozměrných objektech s pravidelnou strukturou, jejíž perioda je větší než vlnová délka záření (difrakce rentgenového záření na krystalech).

Termín rozptyl je jistě nejobecnější. Lze ho snad použít vždy, když vlnění interaguje s dvojrozměrnými nebo trojrozměrnými objekty. Vzhledem k tomu, co bylo řečeno o termínu difrakce, budeme termínu rozptyl používat zejména, když jde o interakci záření s trojrozměrným objektem, který nemá onu periodickou stavbu krystalů a když jde o interakci záření s dvojrozměrnými objekty, jejichž detaily jsou menší než vlnová délka. Tedy např. rozptyl rentgenového záření amorfní látkou, rozptyl světla matnicí apod.

V literatuře najdeme mnoho příkladů, které tomuto vymezení pojmů odpovídají. Jsou to výrazy typu: „Rozptyl rentgenového záření na elektronu.“ „Difrakční jev od soustavy otvorů vzniká interferencí světla difraktovaného jednotlivými otvory.“ „Difrakci rentgenového záření na krystalu lze interpretovat jako interferenci záření rozptýleného jednotlivými elementárními buňkami.“



Obrázek 3: Rozptyl elektronů nabitou kuličkou z polystyrenového latexu spočívající na uzemněné uhlíkové podložní bláně [3], [4].

Jsou však také příklady, které uvedenému návrhu protičeří a které jsou svým významem nepřehlédnutelné. Například klasické dílo M. v. Laueho pojednávající převážně o difrakci rentgenového záření na krystalech se v doslovném překladu nazývá: „Interference rentgenových paprsků“ [5]. V knize vydané při příležitosti padesátého výročí objevu elektronové difrakce [6] jsou kapitoly pojednávající o rozptylu elektronů v plynech nazvány: „Gas electron diffraction“.

Uvedené příklady naznačují, že pojmy rozptyl, difrakce a interference skutečně nelze vymezit bezvýjimečným způsobem. Rádi tedy přijmeme poučení Julie Kapuletové „...ta, již nazýváme různě, by voněla stejně sladce pod jakýmkoli jiným jménem...“, přestaneme se zabývat terminologií a budeme se věnovat oné různě. Bude jí pro nás difrakce, a to zejména difrakce v instrumentální optice.

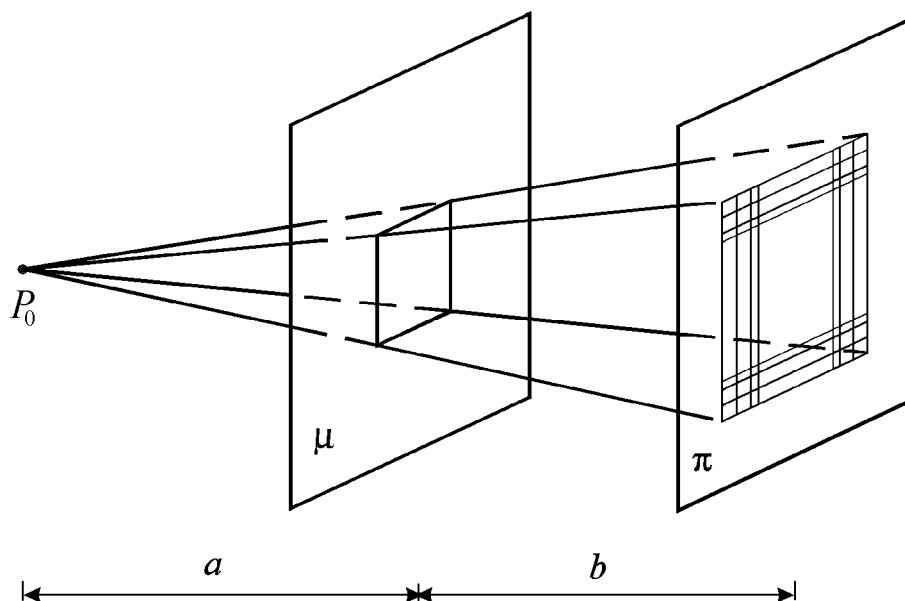
2.2 Fresnelova a Fraunhoferova difrakce

V optice se rozlišují Fresnelovy a Fraunhoferovy difrakční jevy. Pro toto rozlišování jsou dobré důvody, a proto se ho přidržíme (i když ve strukturní analýze jsou důležité téměř jen difrakční jevy Fraunhoferova typu).

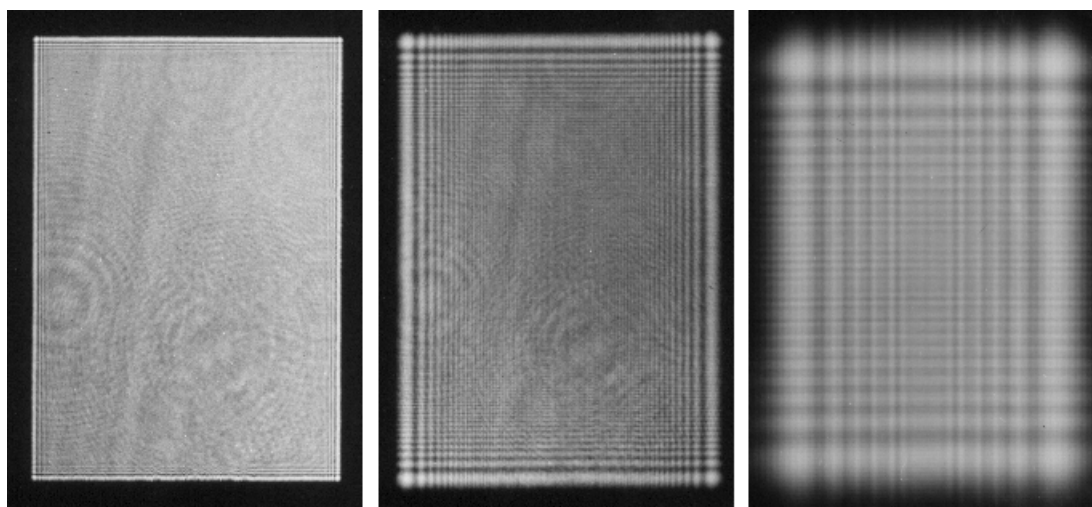
Fresnelova difrakce. Dejme tomu, že bychom chtěli promítat (zvětšovat) nějaké obrazy, např. obdélníkový otvor, a to bez použití optiky (viz obr. 4). Umístili bychom tedy stínítko μ s obdélníkovým otvorem mezi zdroj světla P_0 a rovinu pozorování π a očekávali bychom, že průmět otvoru v rovině pozorování bude tím věrnější, čím menší („bodovější“) bude zdroj světla P_0 . Výsledek takového pokusu by nás zklamal. Místo průmětu s ostrými okraji bychom pozorovali složitou kompozici barevných proužků a kdybychom použili monochromatického světla, pozorovali bychom obrazce toho typu, jako na obr. 5. Příčinou neúspěchu je právě ohyb světla. Do homogenního a izotropního prostředí (vzduch) mezi zdroj a rovinu pozorování byla vložena překážka (nepropustné stínítko s otvorem omezující svazek), a tak se světlo šíří také oním „čtvrtým způsobem“, difrakcí.

Tento příklad ukazuje, že Fresnelovy ohybové jevy se objevují při stínové projekci, použijeme-li malého monochromatického zdroje světla (tzv. koherentního osvětlení). Naznačuje však také, že se s Fresnelovou difrakcí setkáváme i u optických zobrazovacích soustav, a to v místech, kde zobrazení je neostré. Rozostřený obraz lze (při koherentním osvětlení) považovat za Fresnelovu difrakci.

Fraunhoferova difrakce. Vniknout do problematiky Fraunhoferovy difrakce je poněkud obtížnější. Ne snad spočívá v tom, že Fraunhoferova difrakce je v mnoha ohledech speciálním případem Fresnelovy difrakce. Tento speciální případ je však v aplikacích tak mimořádně důležitý, že většina specialistů, kteří používají ke své práci difrakci, rozumějí pod pojmem difrakce právě jen Fraunhoferovu difrakci.



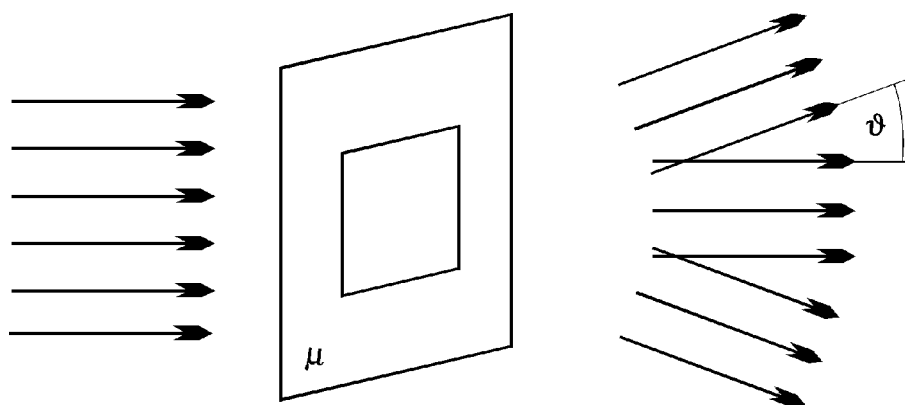
Obrázek 4: Projekce otvoru ve stínítku μ do roviny π . Použijeme-li malého (bodového) zdroje P_0 světla, pozorujeme v rovině π místo ostrého obrazu otvoru Fresnelův difrakční obrazec (srov. obr. 5).



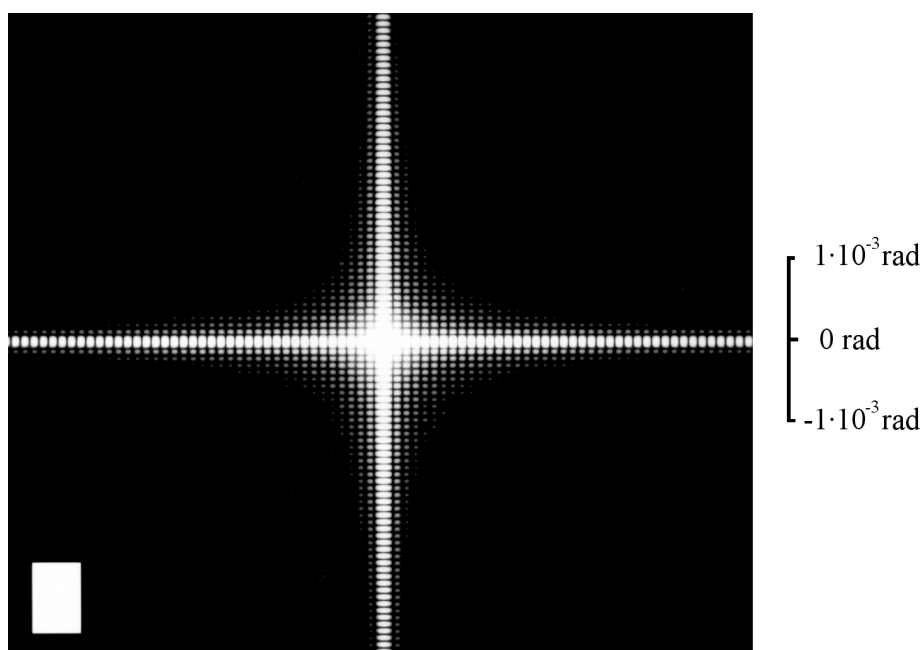
Obrázek 5: Fresnelova difrakce na obdélníkovém otvoru v nepropustném stínítku získaná způsobem naznačeným na obr. 4 při různých kombinacích délek a , b . Rozměry otvoru jsou $5,4 \text{ mm} \times 7,5 \text{ mm}$, $\lambda = 6,3 \cdot 10^{-7} \text{ m}$.

Zůstaňme u experimentálního uspořádání bez čoček (obr. 4) a představme si, že zdroj P_0 i rovinu pozorování π velmi vzdálíme od roviny μ difrakčního stínítka. V mezním případě až do nekonečna (tj. $a \rightarrow \infty$, $b \rightarrow \infty$, viz obr. 6). Protože bodům roviny v nekonečnu odpovídají směry, lze tuto situaci chápat tak, že na stínítko dopadá rovnoběžný svazek světla (rovinná vlna) a Fraunhoferovou difrakcí rozumíme směrové rozložení difraktovaného světla. Jinými slovy, při Fraunhoferově difrakci se zajímáme o to, kolik světla se za objektem μ šíří v jednotlivých směrech. Difrakční obrazec tedy nepředstavuje rozložení intenzity světla jako funkci polohy (jak tomu bylo u Fresnelovy difrakce), nýbrž představuje rozložení intenzity jako funkci směru. Vzhled Fraunhoferova difrakčního obrazce se velmi liší od tvaru otvoru ve stínítku, jak to ukazuje příklad na obr. 7. Je na něm Fraunhoferova difrakce na téměř obdélníkovém otvoru, z něhož byla získána Fresnelova difrakce na obr. 5.

Obr. 6 je vlastně nejjednodušším experimentálním uspořádáním pro pozorování Fraunhoferovy difrakce. Na zkoumaný objekt μ dopadá rovnoběžný svazek záření a měříme (např. fotograficky, okem nebo fotonásobičem), kolik záření se za objektem šíří v jednotlivých směrech. Tohoto uspořádání se poměrně často používá. Zejména tehdy, když jde o difrakci vlnění, které se obtížně fokusuje (např. rentgenové záření). Vzdálenosti a



Obrázek 6: Fraunhoferova difrakce představuje rozložení intenzity difraktovaného světla jako funkci směru ϑ .

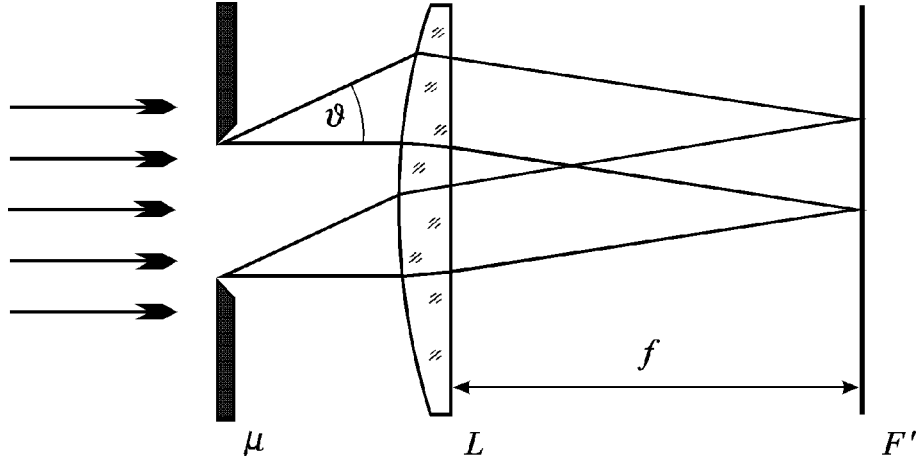


Obrázek 7: Fraunhoferova difrakce na obdélníkovém otvoru v nepropustném stínítku. Rozměry otvoru jsou $5,4 \text{ mm} \times 7,5 \text{ mm}$, $\lambda = 6,3 \cdot 10^{-7} \text{ m}$.

a b z obr. 4 nejsou ovšem nikdy nekonečné, ale pouze velmi velké ve srovnání s velikostí objektu, na němž dochází k difrakci, a ve srovnání s vlnovou délkou λ záření. (V rentgenové difraktografii bývá $a \simeq b \simeq 10^{-1} \text{ m}$, $\lambda = 2 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ a lineární rozměr difraktujících objektů $d \simeq 10^{-4} \text{ m}$. V optice lze takto získat kvalitní Fraunhoferovy difrakční obrazce při vzdálenostech $a, b > 10 \text{ m}$, lineárních rozměrech otvoru $d < 10^{-3} \text{ m}$ a $\lambda = 5 \cdot 10^{-7} \text{ m}$.) Kdybychom chtěli jednoduše získat z našeho obdélníkového otvoru ($d = 7 \cdot 10^{-3} \text{ m}$) difrakční obrazec srovnatelné kvality jako na obr. 7, museli bychom při $\lambda = 6,3 \cdot 10^{-7} \text{ m}$ volit vzdálenosti $a = b = 10^2 \text{ m}$. Plocha difrakčního obrazce by pak byla větší než 1 m^2 . To je ovšem poněkud nepohodlné, a proto se v optice téměř vždy získává Fraunhoferův difrakční obrazec pomocí čoček.

Využívá se přitom známé vlastnosti spojné čočky, totiž toho, že fokusuje rovnoběžné svazky do své ohniskové roviny (viz obr. 8). Jinými slovy, obrazová ohnisková rovina F' čočky je obrazem roviny v nekonečnu, a tedy body této roviny odpovídají směrům předmětového prostoru čočky.

V závěru tohoto odstavce ještě upozorníme na velmi rozšířené nedorozumění. V učebnicích fyziky, které nejsou specializovány na teorii difrakce a zejména v učebnicích kvantové mechaniky, se nezdávkou setkáváme s tvrzeními tohoto typu: „... ohybový jev je patrný jen tehdy, je-li vzdálenost mezi vrypy ohybové mřížky srovnatelná s vlnovou délkou ohýbajících se vln nebo je-li menší než vlnová délka“ [7]. Taková tvrzení jsou nesprávná. Uvedeme dva typické příklady, které to dokazují. (i) Difrakční obrazce na obr. 5 a 7 byly získány světlem z He-Ne laseru, tedy světlem o vlnové délce $\lambda = 6,3 \cdot 10^{-7} \text{ m}$. Obdélníkový otvor má rozměry



Obrázek 8: Spojná čočka L fokusuje rovnoběžné svazky do své obrazové ohniskové roviny F' . Tato rovina F' je obrazem roviny v nekonečnu vytvořeným čočkou L . V ohniskové rovině F' je tedy zobrazena Fraunhoferova difrakce na otvoru ve stínítku μ chápaná jako směrové rozložení difraktovaného světla.

5,4 mm \times 7,5 mm. Rozměry otvoru jsou tedy 10^4 krát větší než vlnová délka použitého světla. (ii) Při difrakci rychlých elektronů (s kinetickou energií 10^5 eV) na krystalech je vlnová délka elektronů $\lambda = 3,7 \cdot 10^{-12}$ m a mezivinné vzdálenosti d krystalů jsou v okolí $1 \cdot 10^{-10}$ m. Poměr d/λ je tedy asi 30. Oba tyto příklady ukazují, že citované tvrzení není správné. Difrakce vzniká vždy, když nějaká překážka brání nerušenému šíření světla. Je-li $d \gg \lambda$, jak tomu bývá v instrumentální optice, jsou difrakční úhly malé. Je-li $d \gtrsim \lambda$, jsou difrakční úhly velké. Vlnění pak může být difraktováno téměř do směru opačného k dopadajícímu vlnění. Tak tomu bývá při difrakci rentgenového záření, pomalých elektronů nebo neutronů na krystalech. Je-li však $d < \lambda$, k difrakci vůbec nedochází. Kritizovaná tvrzení zdomácněla ve fyzikální literatuře asi pod vlivem difrakce rentgenového záření na krystalech, kdy jsou pro přesnost měření mezivinných vzdáleností žádoucí velké difrakční úhly, tj. situace, kdy $d/\lambda = 1 + \varepsilon$ a ε je malé kladné číslo. To však nic nemění na tom, že kritizované tvrzení je nesprávné.

2.3 Difrakční integrály

V příkladech předchozího odstavce šlo o difrakční jevy získané tak, že na difrakční stínítko (obdélníkový otvor v nepropustném stínítku) dopadala dobře definovaná vlna (divergentní kulová vlna v případě Fresnelovy difrakce, rovinná vlna v případě Fraunhoferovy difrakce). Tak tomu bývá, když mají difrakční jevy vypovídat především o difrakčním stínítku (preparátu) a vliv dopadající vlny se snažíme „minimalizovat“. Zvolme například rovinu difrakčního stínítka za souřadnicovou rovinu $z = 0$. Nechť kolmo na tuto rovinu dopadá rovinná vlna $\psi(x, y, z) = \exp(ikz)$. V rovině $z = 0$, před průchodem difrakčním stínítkem, je tedy vlnová funkce $\psi(x, y, 0^-) = 1$ a těsně po průchodu stínítkem je rovna funkci propustnosti $t(x, y)$ stínítka: $\psi(x, y, 0^+) = t(x, y)$. V tomto smyslu pak difrakční jev odpovídá hlavně difrakčnímu stínítku a vliv dopadající vlny je „minimalizován“. Proto se také při vymezování pojmu Fraunhoferova difrakce požaduje, aby nejen rovina pozorování, ale i zdroje byly v nekonečnu, tj. aby na difrakční stínítko dopadala rovinná vlna.

To však není nezbytné. Předpokládejme pouze, že v bodech $M(x_M, y_M, 0)$ roviny $z = 0$ známe vlnovou funkci $\psi(x, y, 0) = \psi_0(x_M, y_M)$. Jejím prostřednictvím pak vyjádříme vlnovou funkci $\psi(x, y, z)$ v libovolném bodě $P(x, y, z > 0)$ nebo, v případě Fraunhoferovy difrakce, amplitudu rovinných vln $A_0(n_x, n_y)$ šířících se ve směru $\vec{n}(n_x, n_y, \sqrt{1 - n_x^2 - n_y^2})$. Tato vyjádření mají tvar dvojných integrálů a nazýváme je difrakčními integrály. Odvodíme je rozdílnými přístupy v následujících několika kapitolách (kap. 3, 6 a 7, v kap. 3, bohužel, pouze heuristicky). Zde však už uvedeme konkrétní tvar difrakčních integrálů, podle nichž se v instrumentální optice ($\lambda \ll d$) difrakční jevy nejčastěji počítají.

Difrakční integrál pro Fraunhoferovy difrakční jevy má tvar Fourierovy transformace (viz vztah 3.6(12), ale hlavně 7.3(3) resp. 7.4(1) v dalším textu)

$$A_0(n_x, n_y) = \left(\frac{k}{2\pi}\right)^2 \iint_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x_M, y_M) \exp[-ik(n_x x_M + n_y y_M)] dx_M dy_M. \quad (1)$$

Z této skutečnosti vyplývá množství pozoruhodných vlastností difrakčních jevů Fraunhoferova typu. Věnovali jsme se jim celý semestr v předmětu Fourierovské metody v optice a ve strukturní analýze. Připomeneme zde tedy jen nejdůležitější z nich, reciprocitu: Informace o vnějších obrysech předmětu je v blízkosti středu difrakčního obrazce a informace o detailech objektu je ve vnějších částech difrakčního obrazce. Tato vlastnost, která malé činí velkým a naopak, nejen že připomíná známé podobenství o Božím království, ale je také jednou z příčin toho, že difrakce Fraunhoferova typu je tak vhodná pro studium jemné struktury. Příklady Fraunhoferových difrakčních jevů důležité v instrumentální optice, jsou připomenuty v kap. 4.

Difrakční integrál pro Fresnelovu difrakci je matematicky složitější. Je konvolucí vlnové funkce $\psi_0(x_M, y_M)$ v rovině difrakčního stínítka (vstupní funkce) a propagátoru (impulsové odezvy) charakterizujícího přenos vlnění z roviny difrakčního stínítka do roviny pozorování. Jeho přesným tvarem jsou výrazy 6.5(13) resp. 7.1(1) odvozené v dalším textu. Z něj, resp. z heuristického Huygensova-Fresnelova principu (kap. 3 v dalším textu), lze získat různá aproximativní vyjádření. Pro konkrétní výpočty se nejčastěji používá aproximace, podle níž je vlnová funkce v obecném bodě $P(x, y, z > 0)$ dána konvolucí (viz vztahy 3.6(3), resp. 7.1(2), 7.1(6) v dalším textu)

$$\psi(x, y, z) = -i \frac{k}{2\pi} \frac{\exp(ikz)}{z} \iint_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x_M, y_M) \exp \left\{ \frac{ik}{2z} [(x - x_M)^2 + (y - y_M)^2] \right\} dx_M dy_M. \quad (2)$$

V kapitole 5 použijeme difrakčního integrálu v tomto tvaru k výpočtu konkrétních Fresnelových difrakčních jevů.

Reference

- [1] Grimaldi, F. M.: *Physico-mathesis de lumine, coloribus, et iride*. Bononiae 1665.
- [2] Komrska, J., Drahoš, V., Delong, A.: Intensity distributions in electron interference phenomena produced by an electrostatic biprism. *Optica Acta* **14** (1967), 147–167.
- [3] Drahoš, V., Komrska, J., Lenc, M.: Scattering of Electrons by Charged Spherical Particles. *Zeitschrift für angewandte Physik* **27** (1969), 227–232.
- [4] Komrska, J.: Scalar Diffraction Theory in Electron Optics. In: *Advances in Electronics and Electron Physics* (L. Marton, ed.), Vol. **30**. Academic Press, Inc., New York and London 1971.
- [5] Laue, M.v.: *Röntgenstrahlinterferenzen*. 3. Auflage. Akademische Verlagsgesellschaft, Frankfurt am Main 1960.
- [6] Goodman, P.: *Fifty Years of Electron Diffraction*. D. Reidel Publ. Co., Dordrecht 1981.
- [7] Blochincev, D. I.: *Základy kvantové mechaniky*. Nakladatelství Československé akademie věd, Praha 1956, str. 36.

