

Бесью перспективно развитие голографич. микро-скопии с применением частично или полностью когерентных источников рентг. излучения, в т. ч. *рентгеновских лазеров*.

Лит.: Рентгеновская оптика и микроскопия, под ред. Г. Шмала и Д. Рудольфа, пер. с англ., М., 1987. В. А. Слемзин.

РЕНТГЕНОВСКИЙ СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ — см. *Рентгеноспектральный анализ*.

РЕНТГЕНОВСКИЙ СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ (рентгеноструктурный анализ) — методы исследования атомного строения вещества по распределению в пространстве и интенсивностям рассеянного на анализируемом объекте рентг. излучения. Р. с. а. кристаллич. материалов позволяет устанавливать координаты атомов с точностью до 0,1–0,01 нм, определять характеристики тепловых колебаний этих атомов, включая анизотропию и отклонения от гармонич. закона, получать по эксперим. дифракц. данным распределения в пространстве плотности валентных электронов на хим. связях в кристаллах и молекулах. Этими методами исследуются металлы и сплавы, минералы, неорганич. и органич. соединения, белки, нуклеиновые кислоты, вирусы. Спец. методы Р. с. а. позволяют изучать полимеры, аморфные материалы, жидкости, газы.

Среди дифракц. методов исследования атомного строения вещества Р. с. а. является наиб. распространенным и развитым. Его возможности дополняют методы *нейтронографии* и *электрографии*. Дифракц. картина зависит от атомного строения изучаемого объекта, характера и длины волны рентг. излучения. Для установления атомного строения вещества наиб. эффективно использование рентг. излучения с длиной волны $\lambda \sim 10$ нм и меньше, т. е. порядка размеров атомов. Особенно успешно и с высокой точностью методами Р. с. а. исследуют атомное строение кристаллич. объектов, структура к-рых обладает строгой периодичностью, и они, т. о., представляют собой естеств. трехмерную дифракц. решётку для рентг. излучения.

Историческая справка

В основе Р. с. а. кристаллич. вещества лежит учение о симметрии кристаллов. В 1890 рус. кристаллограф Е. С. Фёдоров и нем. математик А. Шёнфлис (A. Schönflis) завершили вывод 230 пространственных групп симметрии, характеризующих все возможные способы размещения атомов в кристаллах. Дифракция рентг. лучей на кристаллах, составляющая эксперим. фундамент Р. с. а., была открыта в 1912 М. Лауэ (M. Laue) и его сотрудниками В. Фридрихом (W. Friedrich) и П. Книппингом (P. Knipping). Разработанная Лауэ теория дифракции рентг. лучей на кристаллах позволила связать длину волны излучения λ , линейные размеры элементарной ячейки кристалла a, b, c , углы падающего $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$ и дифракционного α, β, γ лучей соотношениями

$$\begin{aligned} a(\cos\alpha - \cos\alpha_0) &= h, \\ b(\cos\beta - \cos\beta_0) &= k, \\ c(\cos\gamma - \cos\gamma_0) &= l, \end{aligned} \quad (1)$$

где h, k, l — целые числа (*индексы кристаллографические*). Соотношения (1) получили название ур-ний Лауэ, выполнение их необходимо для возникновения дифракции рентг. лучей на кристалле. Смысл ур-ний (1) в том, что разности хода между параллельными лучами, рассеянными атомами, отвечающими соседним узлам решётки, должны быть целыми кратными λ .

В 1913 У. Л. Брэгг (W. L. Bragg) и Г. В. Вульф показали, что дифракц. рентг. пучок можно рассматривать как отражение падающего луча от нек-рой системы кристаллографич. плоскостей с межплоскостным расстоянием d :

$$2d \sin \theta = n\lambda,$$

где θ — угол между отражающей плоскостью и дифракц. лучом (угол Брэгга). В 1913–14 гг. Г. и У. Л. Брэгги впервые использовали дифракцию рентг. лучей для эксперим. проверки предсказанного У. Барлоу (W. Barlow) атомного строения кристаллов NaCl, Cu, алмаза и др. В 1916 П. Дебай (P. Debye) и П. Шеррер (P. Scherrer) предложили и разработали дифракц. методы рентгеноструктурных исследований поликристаллич. материалов (*Дебая — Шеррера метод*).

В качестве источника рентг. излучения использовались (и используются поныне) отпаянные рентг. трубки с анодами из разл. металлов и, следовательно, с различными λ соответствующего характеристич. излучения — Fe ($\lambda = 19,4$ нм), Cu ($\lambda = 15,4$ нм), Mo ($\lambda = 7,1$ нм), Ag ($\lambda = 5,6$ нм). Позднее появились на порядок более мощные трубки с вращающимся анодом, для структурных исследований используются также наиб. мощный, имеющий белый (непрерывный) спектр излучения источник — рентг. *синхротронное излучение*. С помощью системы монохроматоров можно непрерывным образом изменить λ применяемого в исследовании синхротронного рентг. излучения, что имеет принципиальное значение при использовании в Р. с. а. эффектов аномального рассеяния. В качестве детектора излучения в Р. с. а. служит рентг. фотошлэнк, к-рую вытесняют сцинтилляционные и полупроводниковые детекторы. Эффективность измерит. систем резко возросла с применением координатных одномерных и двумерных детекторов.

Количество и качество информации, получаемой с помощью Р. с. а., зависят от точности измерений и обработки эксперим. данных. Алгоритмы обработки дифракц. данных определяются используемым приближением теории взаимодействия рентг. излучения с веществом. В 1950-х гг. началось применение ЭВМ в технике рентгеноструктурного эксперимента и для обработки эксперим. данных. Созданы полностью автоматизированные системы для исследования кристаллич. материалов, к-рые проводят эксперимент, обработку эксперим. данных, осн. процедуры по построению и уточнению атомной модели структуры и, наконец, графич. представление результатов исследования. Однако с помощью этих систем пока нельзя изучать в автоматич. режиме кристаллы с псевдосимметрией, двойниковые образцы и кристаллы с др. особенностями структуры.

Экспериментальные методы рентгеновского структурного анализа

Для реализации условий дифракции (1) и регистрации положения в пространстве и интенсивностей дифрагированного рентг. излучения служат рентг. камеры и рентг. дифрактометры с регистрацией излучения соответственно фотогр. методами или детекторами излучения. Характер образца (монокристалл или поликристалл, образец с частично упорядоченной структурой или аморфное тело, жидкость или газ), его размер и решаемая задача определяют необходимую экспозицию и точность регистрации рассеянного рентг. излучения и, следовательно, определённый метод Р. с. а. Для изучения монокристаллов при использовании в качестве источника рентг. излучения отпаянной рентг. трубки достаточен объём образца $\sim 10^{-3}$ мм³. Для получения качественной дифракц. картины образец должен обладать возможно более совершенной структурой, причём его блочность не препятствует структурным исследованиям. Реальное строение крупных, почти совершенных монокристаллов исследует *рентгеновская топография*, к-рую иногда тоже относят к Р. с. а.

Метод Лауэ — простейший метод получения рентгенограмм монокристаллов. Кристалл в эксперименте Лауэ неподвижен, а используемое рентг. излучение имеет непрерывный спектр. Расположение дифракц. пятен на лауэграммах зависит от размеров элементар-