

A KRISZTALLOGRÁFIAI FÁZISPROBLÉMA ÉS A KOSEL-VONALAK PROFILJA

Bortel Gábor, Tegze Miklós, Faigel Gyula
MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont, Szilárdtestfizikai Intézet

Az anyagok atomi szintű szerkezetéről a legtöbb információt mindmáig a különféle diffrakciós mérések szolgáltatják. Az alkotó részecskék térbeli elhelyezkedéséről, azaz a szerkezetéről az információt az általuk szórt hullámok által kialakított interferenciakép hordozza. Ezt többféle nyáláb alkalmazásával is megmérhetjük, így röntgensugárással, elektronokkal vagy neutronokkal. A lényeg, hogy a hullámhossz az atomi méretek, azaz az ångström (10^{-10} m) nagyságrendjébe essen. A röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat alapelveit és egyenleteit a 20. század elején *P. P. Ewald*, *M. von Laue*, *W. H. Bragg* és *W. L. Bragg* (apa és fia) ismerték fel és fogalmazták meg. Az azóta eltelt időszak eredményeit a rutinszerűen alkalmazott módszerek, adatbázisokban elérhető milliós nagyságrendbe eső megoldott szeretlen, szerves kismolekulás vagy biológiai makromolekulás szerkezet [1–3] és több tucat, a diffrakcióhoz köthető Nobel-díj is jellemzi. E

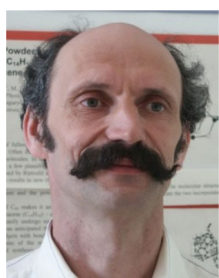
A cikk az Eötvös Loránd Fizikai Társulat szegedi Vándorgyűlésén, 2016. augusztus 27-én elhangzott előadás [17] írott változata.



Bortel Gábor 1993-ban végzett az ELTE TTK fizikus szakán, 1998 óta a fizikai tudomány kandidátusa. Az amerikai APS szinkrotronnál töltött két éves időszakot leszámítva, az MTA SZFKI, jelenleg az MTA Wigner FK Szerkezetkutató Laboratóriumának munkatársa. A klasszikus diffrakció alkalmazásán túl kutatási tevékenységét az anyag és röntgensugárzás kölcsönhatásán alapuló új szerkezetvizsgálati módszerek fejlesztése és kísérleti megvalósítása jellemzi.



Tegze Miklós, az MTA doktora 1979-ben végzett az ELTE TTK fizikus szakán. Faigel Gyulával közösen valósították meg az első belső forrásos atomi felbontású holográfiamérést, amely eredményükért Széchenyi-díjban részesültek. Jelenlegi kutatási tevékenysége az egyedi, nem periodikus részecskék atomi szerkezetének szabadelektron-lézerekkel történő meghatározásához kapcsolódik.



Faigel Gyula, Széchenyi-díjas fizikus, 2007 óta az MTA rendes tagja, az MTA Wigner FK Szerkezetkutató Laboratóriumának alapítója és vezetője. Nevéhez fűződik a nukleáris rezonanciaszórás dinamikus elmélete több jóslatának igazolása, a szinkrotron-sugárforrások interdiszciplináris alkalmazásainak itthoni elterjesztése. Fő kutatási területe a szerkezetkutatás, a röntgen- és γ -sugárzáson alapuló kísérleti technikák és a szerkezetkutatás új méréstípusai, a szinkrotronsugárzás atommagokon való rezonanciája.

jelentős korszak tiszteletére nyilvánították 2014-et a Krisztallográfia Nemzetközi Évének [4], amiről a *Fizikai Szemle* is megemlékezett [5].

Diffrakciós szerkezetmeghatározást általában periodikus translációs renddel rendelkező rendszereken, azaz kristályokon végeznek – ez a diszkrét Bragg-reflexiók és a krisztallográfia birodalma. A nem periodikus rendszereken történő diffrakciós méréseket folytonos intenzitáseloszlású szórásképek jellemzik. Ide tartozik a kisszögű szórás, a diffúz szórás, az amorf anyagok vagy folyadékok szórása, illetve az egyedi részecskéken végzett szórás kísérletek. A teljesség kedvéért meg kell említeni, hogy az atomi léptékű szerkezetvizsgálatban egyre nagyobb jelentőséggel bírnak a direkt leképzésen alapuló elektron- vagy pásztázó szondás mikroszkópos módszerek, illetve az atommagok spinjeinek kölcsönhatásán alapuló szerkezetmeghatározásra is alkalmas magmágneses rezonancia módszerek.

A diffrakciós szórásképet a szórási szög függvényében mért intenzitás, vagy az azonos információt hordozó $I(\mathbf{q})$ függvény jellemzi, ahol a \mathbf{q} szórási vektor a szórt és a beeső síkhullám hullámszámvektorának különbsége. (Jelen cikk képleteiben a reciprokter skálázásánál a $k = 2\pi/\lambda$ fizikai konvenciót követjük a $k = 1/\lambda$ krisztallográfiai konvencióval szemben.) Szóró objektumok kiterjedt rendszere esetén $I(\mathbf{q})$ meghatározásához a szórt hullámokat fázishelyesen kell összegezni. Az úthosszkülönbségek alapján könnyen belátható, hogy adott \mathbf{q} vektorhoz tartozó szórási geometriában az \mathbf{r} pontban elhelyezkedő szőrőcentrum járulékat egy $e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$ fázisfaktorral kell figyelembe venni. Ez arra vezet, hogy a szórt hullám amplitúdóját a szóró objektumok sűrűségének Fourier-transzformáltja, az intenzitást pedig ennek abszolútérték-négyzete adja:

$$A(\mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r}$$

$$I(\mathbf{q}) \sim |A(\mathbf{q})|^2$$

Kristályok esetében a sűrűségfüggvény az \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} elemi rácsvektorok szerint periodikus, aminek következtében a szórási amplitúdó két tényező szorzatára szeparálható:

$$A(\mathbf{q}) = \int_{V_{\text{cella}}} \rho(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} \times \sum_{n_1, n_2, n_3 = -\infty}^{\infty} e^{i\mathbf{q}(n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} + n_3 \mathbf{c})}$$

Az első az $F(\mathbf{q})$ szerkezeti tényező, amely egyetlen elemi cella sűrűségének Fourier-transzformáltja, a

második az $L(\mathbf{q})$ rácsösszeg, amely tovább bontható három egydimenziós összeg szorzatára.

A mértani sor összegképletének segítségével az egydimenziós rácsösszeg véges N tagra zárt alakra hozható:

$$L_N(x) = \sum_{n=0}^{N-1} e^{in2\pi x} = \frac{\sin(N\pi x)}{\sin(\pi x)} e^{i(N-1)\pi x}.$$

E komplex függvény modulusa x egész értékeinél éles maximumokkal (értékük N), köztük $N-1$ zérusponttal rendelkezik, fázisa pedig minden zérusátmenetnél az előjelváltás következtében π -vel ugrik. N növekvő értékeinél az oszcillációk egyre sűrűbbé válnak és fizikailag csak egy kis tartományra vett átlagérték lesz megfigyelhető. Ebben a határesetben a rácsösszeg az elemi cellák számával megegyező értékű rendkívül éles maximumai biztosítják a Bragg-reflexiók könnyen mérhető intenzitását. Ezekben az irányokban az összes elemi cella járuléka koherensen, vagyis azonos fázisban adódik össze. Ugyanakkor a reflexiók közötti irányokban bekövetkező gyakorlatilag tökéletes kioltás lehetetlenné teszi a szerkezeti tényezők tetszőleges pontban történő mérését. Számunkra most a rácsösszegnek az a jellemzője is fontos lesz, hogy az említett határesetben a szórt hullám a Bragg-reflexió két átellenes pontján (a reciproktérben a $\mathbf{q}_{hkl} \pm \Delta\mathbf{q}$ pontokban) mindig ellenfázisban van.

A szórt hullám amplitúdóját megadó másik faktor, a szerkezeti tényező hordozza az elemi cella tartalmára vonatkozó krisztallográfiai információt. Mivel azonban a rácsösszeg csak a Bragg-reflexiók diszkrét pontjaiban teszi lehetővé az intenzitás mérését, a reflexiók indexelésével (h, k, l), és a szóró objektumok atomos leírásával, azaz az elemi cellán belüli frakcionális koordináták használatával (x, y, z) és röntgendiffrakció esetén az $f(\mathbf{q})$ atomszórás tényező bevezetésével a szerkezeti tényezőt a következő alakban lehet felírni:

$$F_{hkl} = \sum_{\text{atom}} f_{\text{atom}}(q_{hkl}) e^{i2\pi(hx + ky + lz)} = |F_{hkl}| e^{i\Phi_{hkl}}.$$

Amennyiben az összes szerkezeti tényezőt ismernénk, az elemi cellán belüli elektronsűrűség egy végtelen inverz Fourier-sor segítségével tetszőleges pontossággal meghatározható lenne:

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{V_{\text{cella}}} \sum_{h,k,l} F_{hkl} e^{-i\mathbf{q}_{hkl}\cdot\mathbf{r}}.$$

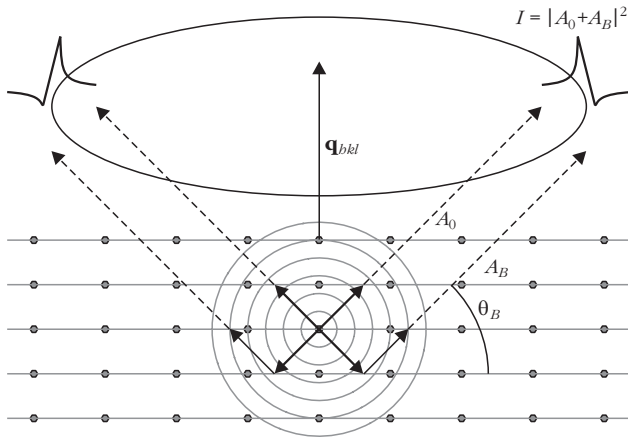
Ennek azonban egyik akadály, hogy az összes szerkezeti tényezőt nem tudjuk megmérni (ez általában a felbontást limitálja), a másik viszont az, hogy e komplex mennyiségeknek csak az $|F_{hkl}|$ modulusát ismerjük, Φ_{hkl} fázisát nem. Ez azért van, mert az elektromágneses spektrum röntgentartományában működő detektorok (valamint az elektron- és neutrondetektorok is) csak a szórt sugárzás intenzitását képesek mérni. (Míg a rádióhullámok, a mikrohullám tartományában egy elektromágneses hullám fázisa elektronikai eszközökkel a térerősség időfüggésén keresztül közvet-

lenül mérhető, az optikai frekvenciákon és felette ez már nem lehetséges.) Így a szerkezeti információknak legalább a fele – de tapasztalatok szerint a fontosabb fele – a mérésből nem áll rendelkezésünkre. Ez a krisztallográfiai fázisprobléma.

A krisztallográfia elmúlt évszázad során elért nagyszerű eredményei annak köszönhetőek, hogy több módszert is kidolgoztak a fázisproblémából eredő információhiány leküzdésére. Ezek jórészt matematikai és statisztikai alapokon nyugszanak, vagy általános kémiai információkat használnak fel, például az összetételt, vagy egyes alkotóelemek ismeretét, de arra is van lehetőség, hogy kísérleti úton pótoljuk a hiányzó információt. Többlet információt jelent, ha változatlan szerkezeten – a szóró objektumok szórási paramétereinek változtatása mellett – több mérést végzünk például a röntgensugárzás energiájának az abszorpció élek közelében történő hangolásával, vagy neutronszórás esetén az eltérő szórási hosszal rendelkező izotópok arányának változtatásával. Másik kísérleti lehetőség, ha a kristály speciális orientációiban egyidejűleg több rácscikot hozunk a Bragg-feltételt teljesítő helyzetbe. Ekkor a gerjesztett reflexiók intenzitásviszonyaiból fázisaik közötti összefüggéseket kaphatunk. A harmadik lehetőség, hogy a diffraktált hullámok egy ismert, koherens hullámmal interferálnak, és így a fázisinformáció intenzitásinformációvá konvertálható, amely már mérhető. Nem kristályos esetben erre az elvre példa az atomi felbontású belső forrásos holográfia [6], ahol a mintán belül elhelyezkedő forrástomok által kibocsátott sugárzás és a környezetükben elhelyezkedő atomokról szóródott sugárzás folytonos interferenciaképét detektálják, és ebből rekonstruálják a forrástomok közvetlen környezetét. Jelen írásban egy ezzel rokon, mégis sok részletében lényegesen eltérő módszert mutatunk be, amely a Kossel-vonalak profiljának mérésén alapul és alkalmas a Bragg-reflexiók fázisának mérésből történő meghatározására. A módszer elvi alapjainak bemutatásán túl a kísérleti megvalósítás nehézségeire, eredményeire és unikális alkalmazási lehetőségeire is kitérünk.

A Kossel-vonalakat először *Walther Kossel* (1888–1956) német fizikus figyelte meg munkatársaival 1935-ben [7, 8]. Elektronnyalábbal gerjesztette egy réz egykristály atomjait, és azok fluoreszcens sugárzása a kristály szimmetriáját tükröző éles fekete-fehér vonalrendszert hozott létre a kristály közelébe helyezett filmen. A jelenség magyarázatát *Max von Laue* írta le a részletes kísérleti publikációt közvetlenül követő cikkében [9]. Az elektronok kristályokban bekövetkező szórási folyamatainak analóg következményei a már évekkel korábban felfedezett Kikuchi-vonalak.

Kossel-vonalak a kristályon belül keltett monokromatikus gömbhullámforrások és a kristályos rend kölcsönhatásaként keletkeznek. Egy gömbhullámnak ugyanis mindig van olyan síkhullámkomponense, amely a Bragg-egyenletnek megfelelő szögben éri a kristály egy adott rácscsíkját, így reflektálódni fog. Ezek – a síkkal adott Bragg-szöget bezáró irányok – a síkra merőleges tengelyű kúpok mentén helyezked-



1. ábra. A Kossel-vonalak kialakulásának szemléltetése. A mintán belüli keltett gömbhullámforrások A_0 direkt sugárzása interferál ugyanezen sugárzás kristálysíkok által reflektált részével (A_B). A reflexió feltétel a rácssíkokra merőleges tengelyű kúpok mentén teljesül, amelyek egy síkdetektoron kúpszeletekként jelennek meg a síksereg mindkét oldalán. Ezek rendszere a kristály szimmetriájára és rácsparamétereire jellemző, intenzitásprofiljuk pedig a komplex szerkezeti tényezővel áll összefüggésben. A reflexió fázisára vonatkozó információt a kúpok mentén az interferencia következtében kialakuló intenzitásmoduláció, azaz a Kossel-vonalak szerkezete hordozza.

nek el (1. ábra). Azonban az eredeti gömbhullámforrás a reflexiók kúpok irányába is sugároz, és – a két hullám koherens lévén – a kúpok mentén interferencia lép fel. A belső források által kibocsátott sugárzás természetesen az összes rácssíknak megfelelő kúp mentén módosul és a kristályon kívül jellegzetes vonalminztázként detektálható. A Kossel-vonalakat a 20. század második felében döntően a kristályrácsok szimmetriájának, torzulásának és pontos ráczállandóinak meghatározására használták.

Már a diffrakció korábban említett kinematikus elmélete is megmutatta, hogy egy reflexió átellenes oldalán a reflektált hullámok ellenfázisban vannak. A Kossel-vonalak jellegzetes fekete-fehér szerkezetének (az eredeti német irodalomban Hell–Dunkel Struktur) ez az oka, de mivel ez a tisztán geometriai elmélet nem alkalmas a reflexiók véges intenzitásának, szélességének és a fázis 180° -os változásának pontos visszaadására, a diffrakció egy összetettebb elméletéhez, a dinamikus elméletéhez kell fordulnunk. Ez az elmélet több fizikai effektust is figyelembe vesz, így az anyagok röntgensugárzásra vonatkozó törésmutatóját, a Bragg-reflexiók során a direkt nyaláb gyengülését, és a többszörös szórást,

azaz a már reflektálódott hullámok ismételt reflexióját. Ennek az elméletnek többféle formalizmusa is létezik [10–13], amelyekre kitérni most nincs lehetőség. Eredményük szerint egy Bragg-reflexió komplex reflektivitását a legegyszerűbb, úgynevezett szimmetrikus Bragg-esetben a következő függvénnyel lehet leírni:

$$R(x) = x \pm \sqrt{x^2 - 1}.$$

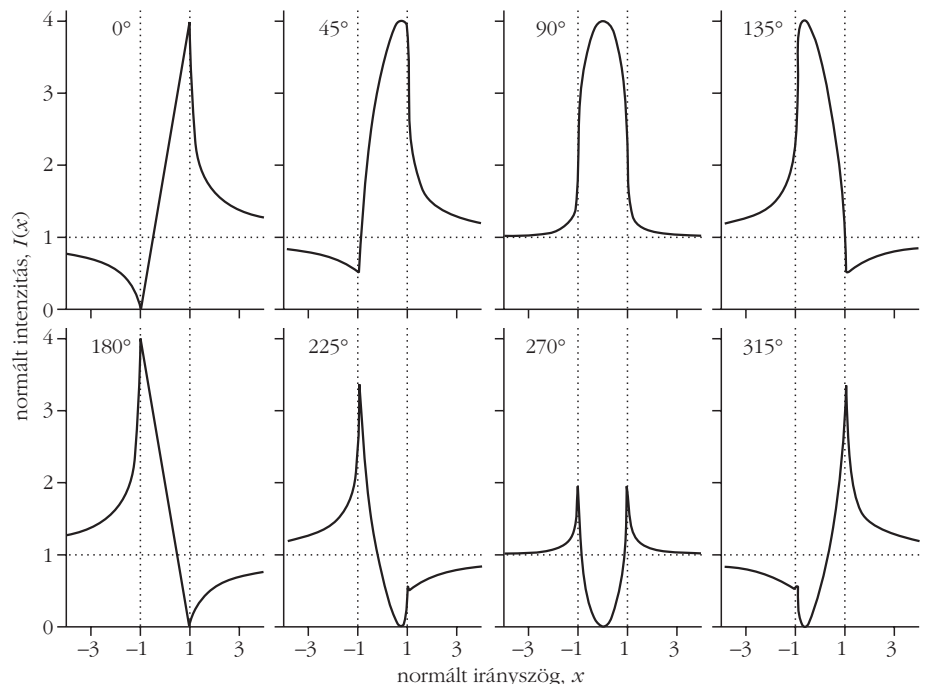
Itt x egy anyagi állandókkal és szerkezeti paraméterekkel skálafüggetlenné tett mennyiség, amely alapvetően a reflexió irányszögét méri. A két előjel közül fizikai megfontolások alapján kell választani. Ez a komplex függvény helyesen írja le a reflexiók véges szélességű teljes visszaverődési tartományát és a fázis lineáris változását e tipikusan ezredfoknyi szélességű szögtartományon.

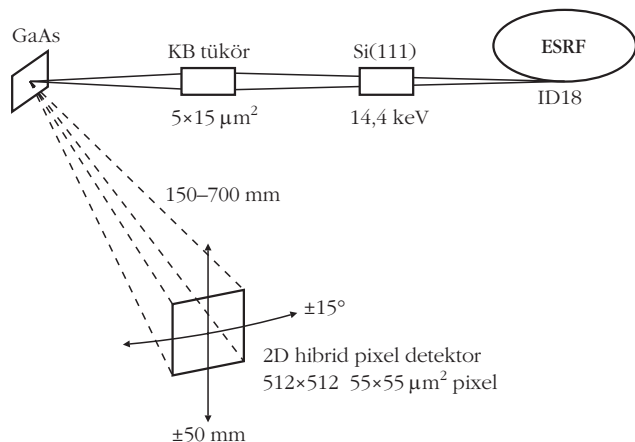
E reflexiók profil ismeretében felírhatjuk egy Kossel-vonal intenzitásának szögfüggését:

$$I(x) \sim \left| 1 + R(x) e^{i\phi_{bkl}} e^{i\mathbf{q}_{bkl} \cdot \mathbf{r}_s} \right|^2.$$

Az első tag a mintát közvetlenül elhagyó hullám, a második pedig a reflektálódott hullám komplex amplitúdója. Ez utóbbi három, a fázist befolyásoló tényező szorzata. Az első adja a reflexiók profil szögfüggését és a fázisugrást, a második a reflexió kristallográfiai fázisa, amely ezen a kis szögtartományon állandónak vehető, a harmadik pedig a forrástom elemi cellán belüli elhelyezkedéséből adódó konstans fáziseltolódás. Amikor a két tag azonos fázisban van, a

2. ábra. A Kossel-vonalak profiljának függése a reflexió kristallográfiai fázisától. A Kossel-vonalak finomszerkezetében a reflektált hullám Bragg-reflexiónál bekövetkező fázisugrása tükröződik. A profil kialakulását azonban befolyásolja még a reflexiók szerkezeti tényezője és a forrástomok szerkezetben elfoglalt helye. A kristallográfiai fázis 45° -os lépésénél ábrázolt profil jól szemlélteti a fázisinformáció „kódolását”.





3. ábra. Szinkrotronsugárzás által keltett Kossel-vonalmintázat felvételére alkalmazott mérési elrendezés vázlata. A gerjesztő nyaláb energiájának kiválasztása Si(111) monokromátorral, fókuszálása Kirkpatrick–Baez-tükörrel történt. A fókuszálására és a detektortávolság növelésére az ezredfoknyi szögfelbontás elérése érdekében volt szükség. Ez viszont a korlátozott méretű detektor minta körüli mozgását és a képek mozaikként való összeillesztését tette szükségessé.

felvett érték maximális, azaz $(1+1)^2 = 4$, ellenfázisban pedig minimális, $(1-1)^2 = 0$. A reflexiótól távol az intenzitás a módosulatlan gömbhullám amplitúdójához, ezen a normált skálán 1-hez tart. E görbe jellegzetes alakjai különböző krisztallográfiai fázisok esetén (2. ábra) jól illusztrálják a fázisinformáció Kossel-vonalprofilba történő kódolását. Ez a kezdetektől fogva ismert volt; a fenti görbe már Laue első magyarázatában is megjelent. Azóta több, ezekre az elvi alapokra épülő mérést is végeztek, de ezekben csak egyedi vonalak játszottak szerepet. Olyan mérés azonban, amely a fázisprobléma megoldására fókuszálva elemezte volna nagyszámú Kossel-vonal szerkezetét, nem született.

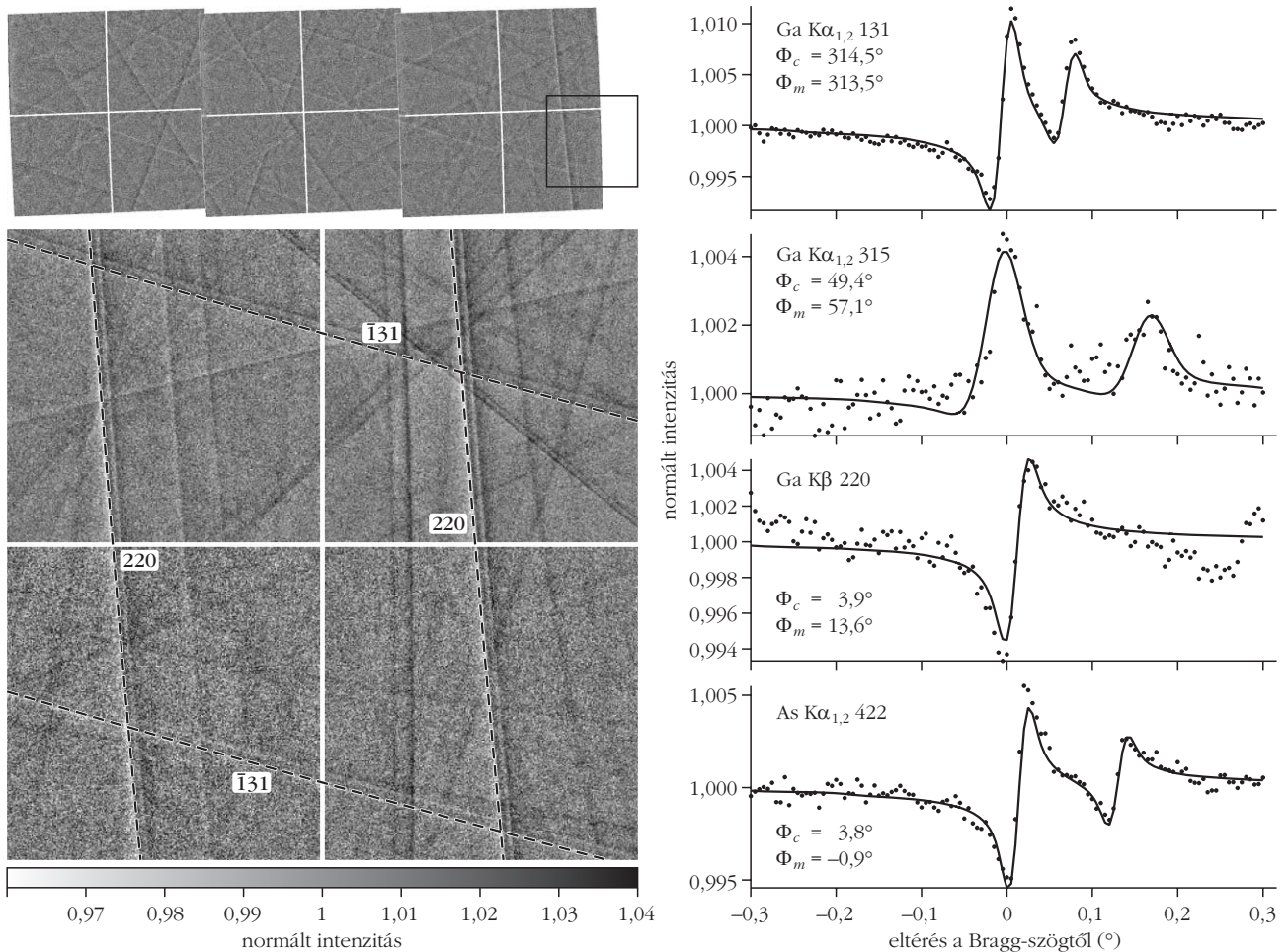
Ebben az írásban egy szinkrotronforrás által gerjesztett röntgen-fluoreszcens sugárzás keltette Kossel-vonalmintázat mérését [14], és a reflexiók krisztallográfiai fázisának kísérleti meghatározását mutatjuk be [15]. Az eddig vázolt egyszerű, de az elveket jól mutató elméletnél a valódi mérések leírása jóval bonyolultabb. Ennek egyik oka, hogy a valódi kristályok döntő többsége a kristályhibák következtében több, a kristályos rendhez képest kis mértékben eltolódott és elfordult mozaikblokkból áll. Így az egyes blokkoktól származó és orientációban akár néhány tized fokot is eltérő Kossel-vonalmintázatok intenzitása adódik össze. Ennek következtében a profilok kiszélesednek és rendkívül jó kontrasztjuk akár több nagyságrenddel is romolhat. A másik nehézség a vonalak leírásakor, hogy a dinamikus elmélet szerinti reflexiók profil függ a szórási és a hullámszámvektorok kristályfelülethez viszonyított irányától is. Ez arra vezet, hogy a Kossel-vonalak profilja – a szimmetrikus esetektől eltekintve – a kúpok mentén folytonosan változik.

Az European Synchrotron Radiation Facility szinkrotron ID18 [16] mérőnyalábjánál megvalósított demonstrációs mérésünk két fő feladata a megfelelő

energiájú és intenzitású fókuszált gerjesztőnyaláb kialakítása, illetve a minta körül kialakuló Kossel-vonalrendszer minél nagyobb térszögű és felbontású rögzítése volt (3. ábra). A vizsgálandó mintáknak a röntgentartományban fluoreszcens sugárzást kibocsátó atomokat is kell tartalmaznia. K elektronok esetén ez a periódusos rendszer átmeneti fémeknél, L elektronok esetén a lantanidáknál nehezebb elemeit jelenti. A mozaikszerűség minimalizálása érdekében a kristálynak minél tökéletesebbnek kell lennie, és célszerű, ha a kristályszerkezet nem centroszimmetrikus, különben a szerkezeti tényezők valóságosak, és a fázisprobléma egy előjelproblémára redukálódik. E feltételek mindegyikének eleget tesz egy GaAs egykristály, ezért választásunk erre esett. A gerjesztőnyaláb 14,4 keV-os energiája jóval a két alkotóelem emissziós vonala fölé esik, így az általa okozott háttér és a potenciálisan szóró helyzetbe kerülő Bragg-reflexiók hatása energia-diszkriminációval csökkenthető. A Kossel-vonalak szerkezetének detektálása jól definiált nyalábmeneteket követel a minta és a detektor között. Ez tette szükségessé a gerjesztő nyaláb 10 μm-es fókuszálását és az 55 μm-es pixelmérettel rendelkező detektor minél távolabbra helyezését. Ezzel az elrendezéssel egy kép felvétele tipikusan néhány percig tartott. Mivel a rendelkezésre álló hibrid pixeldetektor mérete csupán 28×28 mm² volt, a detektálás térszögének növelését csak a detektor minta körüli mozgásával lehetett megoldani.

A felvett képek feldolgozása több lépésben történt. A detektorszegmensek és pixelek eltérő érzékenységeinek kompenzálása után a szomszédos helyzetekben mért képeket pixelpontossággal kell összeilleszteni (4. ábra, bal oldali panel). Ez az éles Kossel-kúpok indexelésével és síkmetszeteinek képekhez történő illesztésével történt. Majd a Kossel-vonalak mentén keskeny, koncentrikus sávokban végzett integrálással kinyerhető a vonalakra merőleges irányú intenzitásprofil (4. ábra, jobb oldali panel). A befejező lépés az elméleti görbék illesztése e profilokhoz. Ebben reflexióként 4 paraméter szerepel, a szerkezeti tényezők modulusa és fázisa, a vonal helye és mozaikszerkezet miatti szélesedése. A vázolt eljárással a GaAs egyetlen limitált térszögű ($5 \cdot 10^{-3}$ sr) Kossel-vonal felvételéből 26 reflexió krisztallográfiai fázisát határoztuk meg mintegy 10° pontossággal. A tapasztalatok szerint ez már elegendő pontosság egy kezdő elektronsűrűség inverz Fourier-transzformációval történő direkt meghatározásához, majd egy szerkezeti modell megalkotásához és finomításához. A mérési elrendezés és a demonstrációs mérés eredményeinek részletes leírása a két már idézett publikációban található [14, 15].

Korábban már említettük, hogy a belső forrásos atomi felbontású holográfia-kísérletek közeli rokon-ságban állnak az itt leírt Kossel-vonalakon alapuló fázismeghatározással. Mindkét esetben a belső forrás által kibocsátott hullám és a szerkezet többi atomjairól szóródott hullámai interferálnak. Lényeges különbség azonban, hogy a holográfia-méréseknél az



4. ábra. Egy GaAs egykristálymintán végzett mérés eredményei. Balra: a Kossel-vonalmintázat indexeléséhez felvett nagyobb térszögű összeillesztett mozaikkép és a fekete négyzettel jelölt részen nagyobb felbontással felvett kép néhány jellegzetes Kossel-vonal kiemelésével. A képen párhuzamosan futó azonos indexű vonalak (valójában koaxiális kúpok) a mintában előforduló kétféle forrástom (Ga, As) 3-3 – $K\alpha_{1,2}$ és $K\beta$ – emissziós vonala, azaz a hatféle energia következménye. Jobbra: néhány kiválasztott példa a képből kinyert profilok és az elméleti görbék illeszkedésére a Kossel-vonal adatainak feltüntetésével.

interferenciakép a reciproktérben kiterjedt, így a direkt térben lokalizált, azaz csak a forrástom környezetéről hordoz információt. Továbbá több azonos környezetű forrástom elemi hologramja intenzitás szerint adódik össze, mivel egy általános irányban még a forrástomok kristályrácsban való elhelyezkedésekor sincs koherencia. Ezért ilyen méréseknél a translációs rend (kristályok) nem is követelmény, csak az orientációs rend (kvázikristályok). A hologramok kiértékelésekor alkalmazott eljárás megköveteli még, hogy a tárgyhullám gyenge legyen a referenciahullámhoz képest. A Kossel-vonalak esetében mindez fordítva van. A kihasznált interferenciajelenség a szórási térben lokalizált, a hosszútávú translációs rendre vonatkozó információt hordoz, és az egyes forrástomoktól származó Kossel-vonalprofilok azonosságának feltétele, hogy a forrástomok a kristály translációs rendjében meghatározott r_s helyet foglaljanak el. Amennyiben ez a feltétel nem teljesül, például a kristályon kívüli makroszkopikus divergens forrás alkalmazása esetén, pseudo Kossel-vonalokról beszélünk. Ezek intenzitásprofiljából elvész a kristallográfiai fázisinformáció a forrástomok elhelyezkedésére vo-

natkozó $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_s}$ fázisfaktorokra történő átlagolás miatt. Érdekes még párhuzamba állítani, hogy a holográfia inverz kísérleti megvalósításának megfelelője a Kossel-vonalak esetén az állóhullámmódszer. Ez az optikai reciprocitás elvét kihasználva „fordított irányban” mér. A Kossel-kúpok alkotója mentén beeső síkhullám irányának finom hangolásával, így a kristályban kialakuló hullámtér fázisának eltolásával a szerkezetben (vagy a kristály felszínén) elhelyezkedő detektoratomok helyét lehet meghatározni.

Végül kitekintésként megemlítjük a Kossel-vonalakon alapuló szerkezetmeghatározási módszer olyan unikális jellemzőit, amelyek kihasználásával más mérésekkel nem megkapható információkat nyerhetünk a jövőben. Mindezek ahhoz a tényhez kötődnek, hogy a teljes szerkezeti információ egyetlen, a minta körüli sugárzást rögzítő képben található. Megfelelő intenzitású forrás és nagy térszögű és szögfelbontású detektor alkalmazása esetén a mérés során semmilyen paramétert nem kell változtatni, vagyis a mérés ideje elvileg tetszőlegesen rövidíthető. A stacionárius minta egyben összetettebb mintakörnyezet alkalmazását is lehetővé teszi, így például

rövid ideig fenntartható extrém körülmények (erős mágneses tér, magas hőmérséklet vagy nyomás, optikai gerjesztés) hatására kialakuló szerkezeti sajátosságokról is krisztallográfiai értelemben teljes információt kaphatunk egy szabadelektronlézer-impulzussal történő mérés során.

Irodalom

1. <http://www.fiz-karlsruhe.de/icsd.html>
2. <http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd>
3. <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
4. <http://www.iycr2014.org>
5. *Fizikai Szemle* 2014/10. szám.
6. M. Tegze, G. Faigel, *Nature* 380(1996) 49–51.
7. W. Kossel, V. Loeck, H. Voges, *Zeitschrift für Physik* 94 (1935) 139–144.
8. W. Kossel, H. Voges, *Annalen der Physik* 5(1935) 677–704.
9. M. von Laue, *Annalen der Physik* 5(1935) 705–746.
10. C. G. Darwin, *Philosophical Magazine and Journal of Science* 27(1914) 315–333., 675–690.
11. P. P. Ewald, *Annalen der Physik* 49(1916) 1–38., 117–143.
12. P. P. Ewald, *Annalen der Physik* 54(1917) 519–556., 557–597.
13. M. von Laue, *Ergebnisse der Exakten Naturwissenschaften* 10 (1931) 133–158.
14. G. Bortel, G. Faigel, M. Tegze, A. Chumakov, *Journal of Synchrotron Radiation* 23 (2016) 214–218.
15. G. Faigel, G. Bortel, M. Tegze, *Scientific Reports* 6(2016) 22904.
16. R. Ruffer, A. I. Chumakov, *Hyperfine Interactions* 97 (1996) 589–604.
17. http://titan.physx.u-szeged.hu/fizikus_vandorgyules_2016