

УДК 548.734.2

АНАЛИЗ ЛАУЭГРАММ: 100 ЛЕТ СПУСТЯ

В.М. Пугачев

Кемеровский государственный университет
E-mail: vm1707@mail.ru

Статья поступила 25 января 2014 г.

Предложено несколько формул для определения по лауэграммам углов между первичным рентгеновским лучом и узловыми рядами, что позволяет по одному Лауэ-снимку построить решетку монокристалла и определить его ориентацию.

Ключевые слова: рентгеновская дифракция, метод Лауэ, лауэграмма, зональная кривая, монокристалл, узловый ряд, кристаллографическое направление.

Теперь, вероятно, не каждый структурщик может с уверенностью прочитать информацию с лауэграммы — обычного еще не так давно фотоснимка кристаллической решетки в полихроматическом излучении. Несколько формул, предлагаемых автором, вряд ли найдут сегодня широкое практическое применение — все необходимое нынче "зашиито" в программном обеспечении современного монокристалльного дифрактометра, фотометрические камеры "вымерли", да и сам автор пользовался этими формулами лишь в студенческие годы (конец 70-х прошлого века), когда вывел их для выполнения своей дипломной работы. И лишь удачный повод — недавнее столетие опыта М. Лауэ — оправдывает обращение к этому интереснейшему опыту прошлых лет.

Специалист старой закалки без труда поймет, глядя на лауэграмму (рис. 1), что зональным кривым в виде маленьких "кружочков" отвечают кристаллографические направления, расположенные под малым углом к первичному лучу, а открытые (развернутые) кривые параболического или гиперболического типа с малой кривизной указывают на узловые ряды, расположенные, наоборот, близко к плоскости лауэграммы. В результате, на качественном уровне, можно увидеть и выбрать три параметра элементарной ячейки и даже понять, какие зональные кривые отвечают диагональным направлениям.

Очевидно, что пространственное расположение кристаллографического направления связано с геометрией лауэграммы следующим образом: проекция направления совпадает с линией симметрии соответствующей зональной кривой (рис. 2), и непосредственно по этой проекции можно отсчитывать один ориентационный угол φ . Другой ориентационный угол ρ отклонения узлового ряда от первичного луча определяется кривизной (размером) зональной кривой. В случае, когда зональная кривая размещается на лауэграмме целиком, этот угол определяется очень просто. Для этого достаточно измерить высоту H замкнутой кривой вдоль линии симметрии и расстояние D от кристалла до пленки (лауэграммы), тогда из простейших геометрических соображений (эта формула есть в классических учебниках Г.Б. Бокия, М.А. Порай-Кошица и др.):

$$\operatorname{tg} 2\rho = \frac{H}{D}.$$

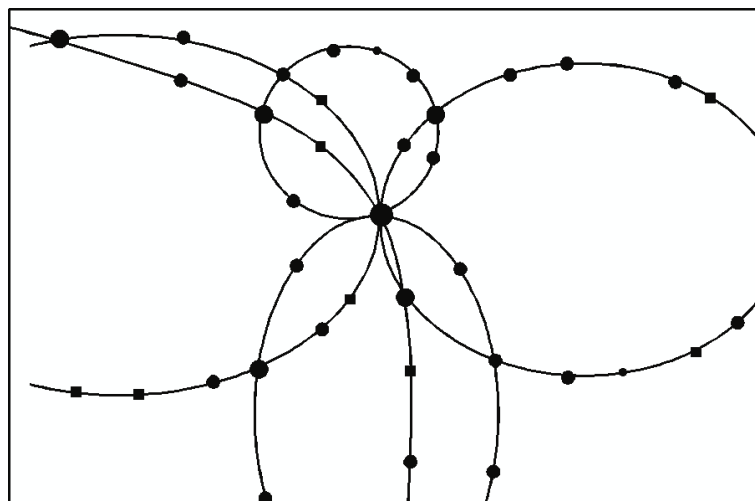


Рис. 1. Схематичный вид зональных кривых на лауэграмме

В тех же классических учебниках рекомендовалось получить еще несколько лауэграмм, повернув кристалл так, чтобы остальные интересующие нас кривые уместились на лауэграмме, после чего их ориентационный угол ρ можно также легко определить.

Проблеме измерения угла между узловым рядом и первичным лучом автор в свое время посвятил целый раздел дипломной работы. Для этого было выведено уравнение, описывающее в специальной координатной системе произвольную условную слоевую линию порядка n (одной из которых при $n = 0$ является сама зональная кривая — нулевая слоевая) при регистрации на плоскость; условно — поскольку это не метод вращения. Осью Y координатной системы является линия симметрии зональной кривой, ось X перпендикулярна ей, начало координат — в точке падения первичного луча (см. рис. 2). Уравнение имеет вид:

$$\frac{n\lambda}{T} = \frac{D \cos \rho + y \sin \rho}{\sqrt{x^2 + y^2 + D^2}} - \cos \rho.$$

При очень благоприятных обстоятельствах по этому уравнению можно пытаться индцировать наиболее яркие рефлексy (как на зональных кривых — нулевого порядка, так и вне их — иных порядков) в надежде, что они получены в характеристическом излучении, и таким образом определять периоды соответствующих узловых рядов. Т.е. существует принципиальная возможность определения всех параметров решетки (включая линейные) всего по одной лауэграмме, и автору представляется, что ему в свое время удавалось это сделать. Более практичное приложение, однако, в другом.

Есть несколько интересных и весьма полезных следствий из этого уравнения. В частности, при $x = 0$ и $\rho = 90^\circ$ уравнение непосредственно обращается в известное простое выражение для метода вращения (схема перпендикулярного луча), по которому вычисляют параметр вдоль оси вращения. Здесь же нам более интересен вариант уравнения для самой зональной кривой (при $n = 0$), из которого легко получается выражение для второго ориентационного угла оси зоны:

$$\operatorname{tg} \rho = \frac{\sqrt{x^2 + y^2 + D^2} - D}{y}.$$

По этому уравнению можно сделать вычисления для множества рефлексов, принадлежащих данной зональной кривой, и получить статистически обработанный результат. Что касается точности, здесь многое зависит от корректности вычерчивания координатной системы. В попытках уйти от некой произвольности при черчении координатной системы автором была выведена еще одна формула, также позволяющая вычислить этот второй ориентационный угол:

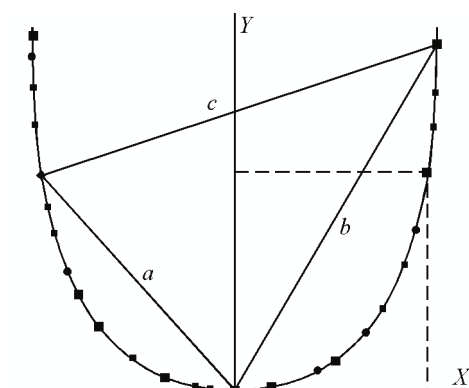


Рис. 2. К определению угла между осью зоны и первичным рентгеновским лучом

$$\operatorname{tg}^2 \rho = \{2a^2b^2 + (a^2 + b^2 + c^2)D^2 + [(a^2 - b^2 - c^2)\sqrt{a^2 + D^2} + (b^2 - a^2 - c^2)\sqrt{b^2 + D^2}]D + (c^2 - a^2 - b^2)\sqrt{(a^2 + D^2)(b^2 + D^2)}\} : \{a^2b^2 - [(c^2 - a^2 - b^2)/2]^2\}.$$

Здесь a и b — расстояния от точки падения первичного луча до двух произвольных рефлексов, принадлежащих одной зональной кривой; c — расстояние между этими рефлексами (см. рис. 1). Плата за простоту измерений — громоздкие вычисления, сильно снижающие точность. Однако измерения расстояний для множества пар рефлексов могут несколько улучшить ситуацию. Предлагаемые формулы, вероятно, могут быть применены в программах по вычислению ориентации монокристаллов.