

Рентгенографическое определение ориентировки неограниченных монокристаллов методом Лауэ

Введение

Отличительным признаком естественных кристаллов является наличие у них характерной огранки: такие кристаллы имеют плоские грани и прямые ребра. Благодаря огранке удается довольно просто (с использованием оптического гониометра) определить ориентацию важнейших кристаллографических направлений относительно внешних (лабораторных) осей координат.

В настоящее время в технике и научных исследованиях широко применяются монокристаллы, получаемые искусственно методами вытягивания из расплава, зонной плавки и др. Такие кристаллы не имеют присущей естественным кристаллам огранки. Так как физические и механические свойства кристалла зависят от ориентировки его внутренних кристаллографических направлений по отношению к внешним осям (например, относительно оси роста кристалла), то практически важным является определение углов между внутренними (кристаллографическими) и внешними осями (лабораторными). Эта задача решается путем использования рентгенографического метода Лауэ.

Основы метода Лауэ

В методе Лауэ дифракционная картина получается от неподвижного монокристалла при облучении его непрерывным спектром рентгеновского излучения. Образцом может служить как изолированный кристалл, так и достаточно крупное зерно поликристалла. В последнем случае размер зерна не должен быть меньше размера первичного пучка рентгеновских лучей, иначе на рентгенограмме будут получаться отражения и от соседних зерен, что мешает расшифровке рентгенограммы.

Для рассмотрения особенностей дифракционной картины в методе Лауэ воспользуемся геометрической интерпретацией интерференционного уравнения

$$(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) / \lambda = \mathbf{H}_{hkl},$$

где \mathbf{s}_0 и \mathbf{s} – единичные вектора вдоль направлений первичного и рассеянного излучения, \mathbf{H}_{hkl} – вектор обратной решетки для отражающей плоскости с индексами (hkl) .

Получение дифракционной картины от неподвижного монокристалла возможно при использовании непрерывного спектра излучения. Непрерывный спектр имеет длинноволновую λ_m и коротковолновую λ_0 границы. Первая, λ_m , определяется поглощением в окошке рентгеновской трубки, вторая, λ_0 – максимальным значением напряжения на рентгеновской трубке. Поэтому в пространстве обратной решетки можно провести бесконечное число сфер распространения, ограниченных с одной стороны сферой радиуса $r = 1/\lambda_m$, а с другой – сферой радиуса $R = 1/\lambda_0$. Все эти сферы проходят через нулевой узел O обратной решетки, а их центры лежат в направлении первичного луча s_0 . Любой из узлов, находящихся в пространстве между ограничивающими сферами, пересекается одной из непрерывного набора сфер распространения, что отвечает условию возникновения дифракционного максимума. Таким образом, число узлов, находящихся между ограничивающими сферами, определяет число дифракционных максимумов.

Направление любого максимума определяется просто. Найдем, например, направление максимума, обусловленного узлом M . Проведем в узел M из нулевого узла O вектор обратной решетки \mathbf{H}_{hkl} . Из середины вектора \mathbf{H}_{hkl} восстановим перпендикуляр к \mathbf{H}_{hkl} . Пересечение этого перпендикуляра с направлением первичного луча s_0 дает точку K , являющуюся центром сферы распространения, пересекающей узел M . Проведя из точки K в точку M прямую, получим искомое направление дифракционного максимума.

Полученная дифракционная картина состоит из рефлексов, расположенных по так называемым *зональным кривым* – эллипсам и гиперболам. В частных случаях зональные кривые могут иметь вид прямых и парабол. Когда кристалл ориентирован так, что с направлением первичного пучка совпадает какая-либо из его осей симметрии, то дифракционные пятна на рентгенограмме располагаются симметрично, причем симметрия рентгенограммы позволяет определить порядок этой оси симметрии. Определение сингонии и лауэвского класса кристалла является одной из важнейших задач, решаемых методом Лауэ.

Цель работы: определение ориентировки неограненного монокристалла по рентгенограммам, полученным методом Лауэ.

Приборы и оборудование

Для получения рентгенограмм по методу Лауэ используют камеру РКСО (рис. 1).

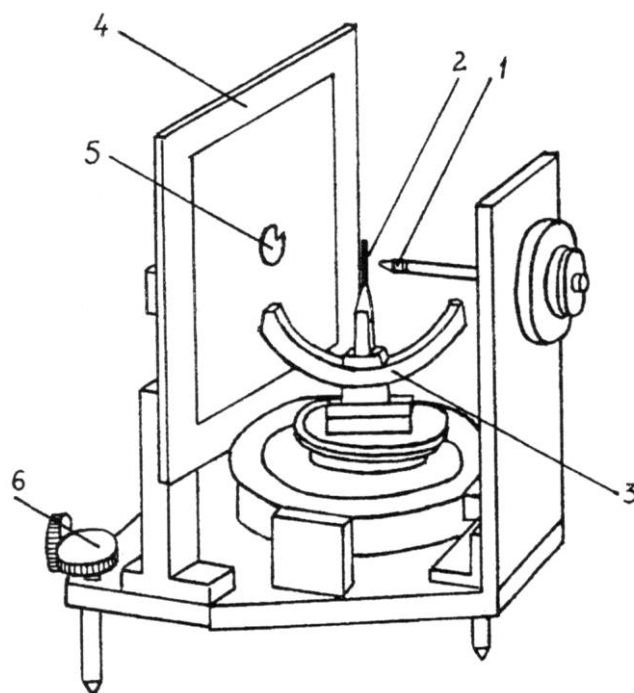


Рис. 1. Рентгеновая камера РКСО

Такая камера имеет диафрагму 1 с двумя отверстиями диаметром 0,5-1 мм. Диаметр отверстий и расстояние между ними определяют степень параллельности первичного пучка рентгеновских лучей: расходимость пучка будет тем меньше, чем меньше диаметр отверстий диафрагмы и чем больше расстояние между ними. Размер отверстий диафрагмы подбирают таким образом, чтобы сечение первичного пучка было больше поперечника исследуемого кристалла (при изучении кристаллов малых размеров). Кристалл 2 устанавливают на гониометрической головке 3, состоящей из системы двух взаимно перпендикулярных дуг. Держатель кристалла можно перемещать относительно малой дуги на $\pm 60^\circ$ (угол поворота отсчитывают по лимбу, имеется нониус). В свою очередь плоскость малой дуги можно поворачивать относительно большой дуги тоже на 60° , а саму гониометрическую головку можно поворачивать вокруг ее вертикальной оси на угол 0-360°. Таким образом, гониометрическая головка позволяет менять ориентацию кристалла относительно первичного пучка и устанавливать нужное кристаллографическое направление вдоль первичного пучка рентгеновских лучей.

Дифракционная картина в камере регистрируется на фотопленку, расположенную своей плоскостью перпендикулярно к первичному пучку в кассете 4. В зависимости от характера исследования кассету с пленкой располагают двумя способами:

1) при исследовании кристаллов малых размеров или прозрачных для рентгеновских лучей тонких кристаллов кассету располагают позади кристаллов. Такая съемка называется прямой, а получаемая рентгенограмма – *лауэграммой*;

2) при исследовании толстых кристаллов в фотопленке делают отверстие для пропускания первичного пучка, а кассету с ней помещают перед кристаллом. Такая съемка называется обратной, а получаемая рентгенограмма – *эпиграммой*.

На кассете перед пленкой натянута тонкая вольфрамовая проволочка, расположенная параллельно (или перпендикулярно) оси гониометрической головки; проволочка смещена относительно середины фотопленки к одному из ее краев. Тень от проволочки, получающаяся на рентгенограмме вследствие засвечивания фотопленки рассеянным рентгеновским излучением, позволяет определить ориентацию рентгенограммы относительно оси гониометрической головки. На кассете в месте попадания первичного пучка помещают свинцовую ловушку 5. Толщину этой ловушки подбирают таким образом, чтобы почернение от первичного пучка на рентгенограмме было сравнимо с плотностью почернения дифракционных пятен. Ловушку обычно делают фигурной, что позволяет по ее тени (а также тени от проволочки) определить, с какой стороны падал первичный пучок на фотопленку.

Методом Лауэ определяется ориентация монокристаллов любых кристаллографических систем. Если кристаллографическая система (сингония) кристалла неизвестна, то это представляет собой довольно сложную задачу.

Содержание работы

Получить, рассчитать и проиндицировать лауэграмму кристалла. Измерить углы поворота для вывода главного кристаллографического направления вдоль первичного пучка.

Получить ориентированную лауэграмму.

Получить, рассчитать и проиндицировать эпиграмму кристалла. Рассчитать графическим и матричным методами установочные углы для полной ориентации кристалла.

Получение лауэграммы

Наиболее просто находится ориентация кристаллов кубической системы. При исследовании кристаллов, имеющих форму проволочек диаметром до 1 мм, их устанавливают на держателе гониометрической головки таким образом, чтобы ось кристалла

была примерно параллельна оси головки (угол поворота держателя и малой дуги устанавливают равным углам 60°).

С помощью имеющихся в нижней части головки двух взаимно-перпендикулярных салазок производят *центровку* кристалла. Для этого сначала поворачивают головку так, чтобы верхние салазки были параллельны плоскости кассеты. С помощью винта салазок перемещают кристалл, чтобы он был виден через отверстия диафрагм. Затем головку поворачивают на 180° и смотрят, нет ли при этом смещения кристалла в поле зрения диафрагмы. Если такое смещение наблюдается, то винтом салазок передвигают кристалл на половину этого смещения. Возвращаются в исходное положение.

Если опять наблюдается небольшое смещение, то операцию повторяют. То же самое проделывают при расположении нижних салазок параллельно кассете. Центровку кристалла проверяют вращением головки вокруг ее оси на 360° . Правильно центрированный кристалл не должен смещаться в поле зрения диафрагмы.

После окончания центровки гониометрическую головку поворачивают так, чтобы плоскость ее большой дуги располагалась параллельно первичному пучку (угловое положение указателя поворота на нижнем лимбе записывают в тетрадь). Такое расположение головки отвечает следующей системе координат: ось X – ось гониометрической головки; ось Y – перпендикулярна к оси головки и направлена вправо от наблюдателя, глядящего на фотопленку со стороны диафрагмы; ось Z совпадает с осью первичного пучка и направлена от диафрагмы к фотопленке.

Рентгеновскую камеру с установленным на ней кристаллом помещают перед окошком рентгеновской трубки с зеркалом анода из вольфрама или молибдена. Такие трубки дают интенсивное рентгеновское излучение с непрерывным спектром. Камеру необходимо установить определенным образом относительно первичного пучка. Для этого вращают установочные винты 6, добиваясь того, чтобы на люминесцирующем экране, поставленном за диафрагмой, появилось круглое пятно с равномерной интенсивностью свечения по всему полю.

Предупреждение: при установке камеры следует снизить напряжение относительно рабочего и избегать попадания частей тела под первичный пучок (особенно глаз!).

После установки камеры **при выключенном** высоком напряжении вставляют кассету, заряженную фотопленкой. Затем включают рентгеновский аппарат и устанавливают режим съемки: напряжение 45 кВ и ток 10 мА. Время съемки – 10 мин. Кассету с экспонированной пленкой вынимают из камеры при выключенном

высоком напряжении. Полученную рентгенограмму проявляют в фотокомнате. Проявленный снимок сразу после фиксирования и промывки следует показать преподавателю. Снимок можно считать удачным, если на нем имеется один или несколько ярко выраженных эллипсов, содержащих не менее 6-8 интенсивных пятен. Такие эллипсы отвечают кристаллографическим зонам с небольшими индексами. Если эллипсы на рентгенограмме плохо выражены, то снимок следует повторить, предварительно повернув пальцами кристалл, укрепленный пластилином в держателе, на $20-30^\circ$ вокруг его оси. **Без разрешения преподавателя или лаборанта кристалл пальцами не трогать!**

Мокрую рентгенограмму высушивают за несколько минут с помощью электрополотенца.

Расчет и индцирование лауэграммы

Рассмотрим теперь порядок расчета рентгенограммы. Лауэграмму следует повернуть к себе таким образом, чтобы тень от проволоки была снизу, а выступы на тени от ловушки располагались **вверх и вправо** (рис. 2). Затем выбирают на рентгенограмме наиболее ярко выраженный эллипс (он соответствует кристаллографической зоне с небольшими индексами) и нумеруют по порядку пятна, расположенные на нем (на очень слабые пятна можно не обращать внимания). Кроме этого нумеруют 2-3 наиболее ярких пятна, находящихся вне рассматриваемого эллипса. После этого тонкой иглой прокалывают центр пятна, являющегося следом первичного пучка. С помощью линейки с точностью до 0,5 мм промеряют расстояние l_i от центра каждого из пронумерованных пятен до центра первичного пятна.

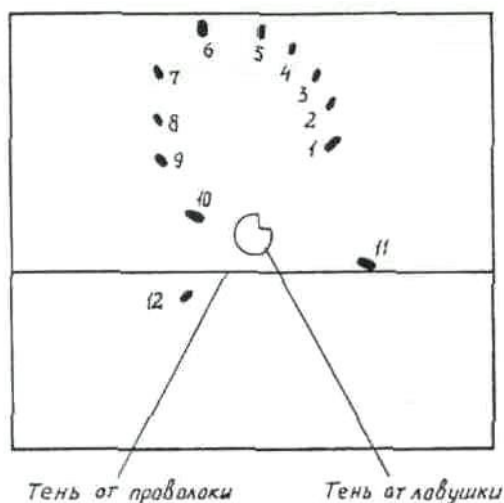


Рис. 2. Схема лауэграммы

Вычисление брэгговских углов проводится по формуле

$$\Theta_i = \frac{1}{2} \arctg \frac{l_i}{D}, \quad (1)$$

где D – расстояние от образца до фотопленки (для камер РКСО $D = 40,5$ мм) (рис. 3).

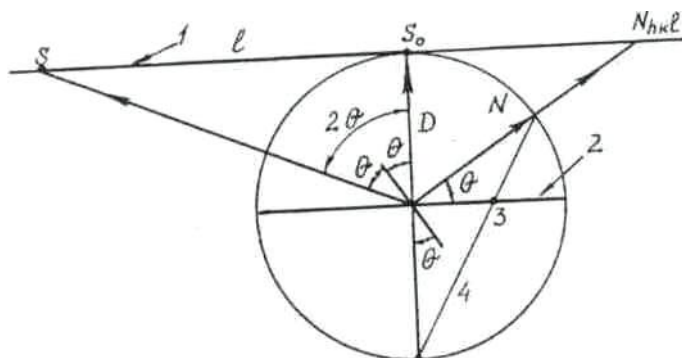


Рис 3. Построение гномостереографической проекции по лауэграмме: 1 - фотопленка, 2 – плоскость проекции, 3 – гномостереографическая проекция плоскости, 4 – проектирующий луч

В табл. 1 приведены данные расчета лауэграммы, помещенной на рис. 2.

Таблица .1

Результаты расчета лауэграммы

Номер пятна	l , мм	Θ	Номер пятна	l , мм	Θ
1	27,0	17°	7	47,0	$24^\circ 30'$
2	37,5	$21^\circ 20'$	8	40,5	$22^\circ 20'$
3	41	$22^\circ 45'$	9	35,5	$20^\circ 30'$
4	47	$24^\circ 30'$	10	20,0	13°
5	51	$25^\circ 45'$	11	28,0	$17^\circ 30'$
6	52,5	26°	12	20,5	$13^\circ 15'$

На рентгенограмме нужно нанести оси координат. Ось X проводят через центральное пятно перпендикулярно к тени проволочки, конец оси направлен вверх. Ось Y проводят также через центр рентгенограммы перпендикулярно к оси X , конец оси направлен вправо. После этого рентгенограмму копируют на кальку, перенося на нее только **центры** пятен и направления осей координат. Особенно тщательно должен быть скопирован центр

первичного пятна. Затем кальку накладывают на сетку Вульфа, совмещая центр первичного пятна с центром сетки. С помощью циркуля проводят круг диаметром, равным диаметру сетки. На круге ставят точки X и Y , отвечающие пересечению осей координат с кругом проекции (рис. 4).

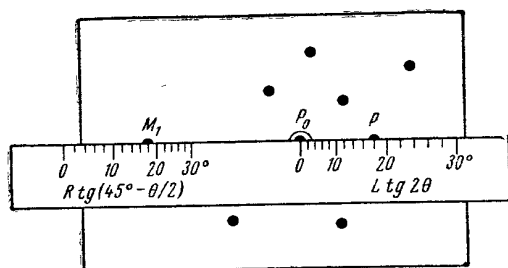


Рис. 3.33. Построение проекции плоскости по пятну рентгенограммы при помощи гномо-
реографической линейки

Каждому пятну B на пленке может быть сопоставлена точка M на стереографической проекции.

$$KM = m = R \operatorname{tg}(45^\circ - \theta/2).$$

Радиус сферы выбирают равным 100 мм, что соответствует радиусу стандартных сеток Вульфа, представляющих собой номограмму стереографических проекций параллелей и меридианов сферы.

$L(=r)$ в РКСО равен 40.5мм.

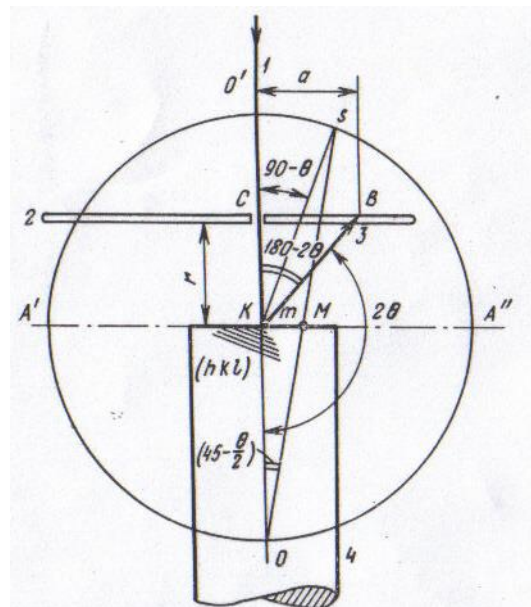


Рис. 13. Схема построения стереографической проекции.

1 – падающий луч; 2 – рентгеновская пленка; 3 – отраженный луч; 4 – ориентируемый слиток.

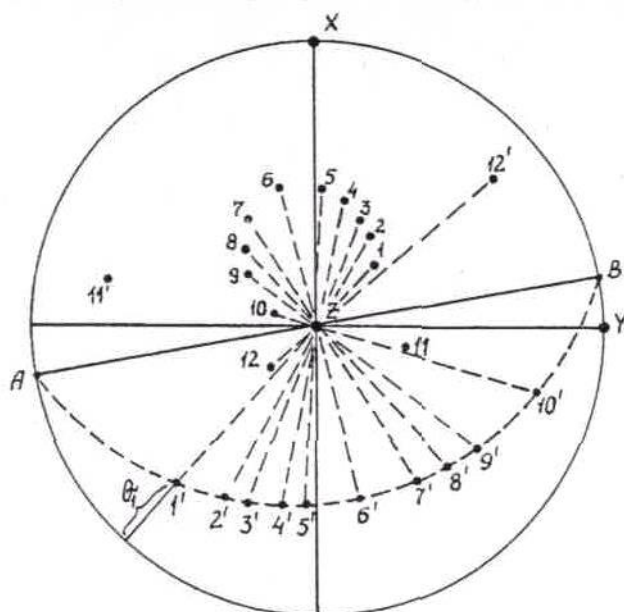


Рис. 4.

Гномостереографическая проекция, построенная по лауэграмме, помещенной на рис. 2

Далее приступают к построению гномостереографической проекции. При построении этой проекции пользуются схемой (см. рис.3) показывающей связь между дифракционным пятном S на рентгенограмме и гномостереографической проекцией плоскости (hkl), от которой получилось данное отражение. Так как луч падающий, луч отраженный s и нормаль к отражающей плоскости N лежат в одной плоскости, то на стереографической проекции выходы указанных направлений должны лежать на одной прямой. Причем если первичный луч перпендикулярен к плоскости проекции (или, что то же самое, плоскости фотопленки), то проекция этого направления совпадает с центром проекции, а выходы отраженного луча и нормали расположатся *по разные стороны* от центра проекции. Зная это, помещают дифракционное пятно, для которого ищется гномостереографическая проекция отвечающей ему кристаллографической плоскости, на экватор сетки Вульфа (центр проекции нужно очень точно совместить с центром сетки Вульфа). От края круга, противоположного дифракционному пятну, отсчитывают вычисленный для этого пятна угол Θ и наносят точку, которая и будет отвечать гномостереографической проекции кристаллографической плоскости (hkl). Затем кальку поворачивают вокруг центра проекции до совпадения следующего пятна с экватором сетки, и для него опять находят соответствующую точку гномостереографической проекции и т.д.

Около каждой точки проекции ставят номер пятна, по которому эта точка построена, добавляя к нему сверху штрих (чтобы не путать

с пятнами рентгенограммы). Точки проекции, отвечающие дифракционным пятнам с наибольшим почернением на рентгенограмме, отмечают кружками тем большего размера, чем больше почернение пятна.

Правильность построения проекции можно проверить следующим образом: проекцию поворачивают таким образом, чтобы точки, отвечающие проекциям пятен выбранного зонального эллипса, легли на один меридиан сетки Вульфа. Если некоторые из точек смещаются относительно соответствующего меридиана более чем на 2° (точность построения проекции 1°), то эти точки найдены неправильно и их построение следует проверить.

Выходы меридиана на круг проекции отмечают точками *A* и *B* (рис. 4). Затем производят графический поворот кристалла вокруг оси, проходящей через точки *A* и *B*. При таком повороте точки проекции, отвечающие рассматриваемому эллипсу, перемещаются на основной круг проекции, что отвечает перемещению оси данной кристаллографической зоны в центр проекции. Остальные точки, не лежащие на рассматриваемом меридиане, так же перемещаются по параллелям в ту же сторону и на то же самое число градусов. Для проекции, построенной по рентгенограмме, приведенной на рис. 2, такой поворот составляет 25° (рис. 5).

Рис. 5. Поворот и индигирование проекции, помещенной на рис. 4

Повернутую проекцию совмещают с одной из стандартных стереографических проекций, заранее построенных для ориентировок кубического кристалла $[100]$, $[110]$, $[111]$, $[112]$, $[123]$. Для проекции, приведенной на рис. 5, совпадение найдено для ориентировки $[110]$.

Центр проекции совмещают с центром стандартной проекции, после этого кальку с проекцией вращают, пытаясь найти совпадение точек, лежащих на большом круге, с точками стандартной проекции.

Если такое совпадение не удастся найти на одной из стандартных проекций, то пытаются сделать это с другой. Может случиться так, что ни одна из стандартных проекций не даст удовлетворительного совпадения (расхождение точек не должно превышать $2-4^\circ$). Это значит, что для рассматриваемой кристаллографической зоны нет заранее построенной стандартной проекции и всю операцию нужно проводить с другим зональным эллипсом.

Если найдено удовлетворительное совпадение на большом круге, то надо проверить, как совпадают точки проекции внутри этого круга. Следует заметить, что на стандартных проекциях точки,

отвечающие различным кристаллографическим плоскостям, отмечены кружками разных диаметров, причем наибольший диаметр кружков отвечает наиболее интенсивным отражениям от соответствующих плоскостей.

Таким образом, при поисках совпадений следует учитывать также интенсивности пятен рентгенограммы. Если совпадение проекции со стандартной проекцией удовлетворительно, но для некоторых точек проекции, отвечающих слабым дифракционным пятнам, не находится точек стандартной проекции, то это означает, что соответствующие кристаллографические направления на проекцию не нанесены. После того, как найдено совпадение повернутой проекции со стандартной проекцией, каждой точке проекции приписывают индексы соответствующей кристаллографической плоскости (см. рис. 5). На той же полюсной фигуре находят выходы главных кристаллографических направлений $[100]$, $[010]$, $[001]$, а также выходы осей типа $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, расположенные не далее 40° от центра проекции.

После этого производят обратный поворот гномостереографической проекции вокруг той же оси AB в исходное положение. При этом отмеченные на проекции выходы главных направлений типа $\langle 100 \rangle$, а также важных направлений типа $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ переместятся в положение, отвечающее ориентации изучаемого монокристалла (эти перемещения отмечены на рис. 5 стрелками).

На полученной теперь проекции имеются выходы внутренних осей $[100]$, $[010]$ и $[001]$ исследуемого монокристалла. Нужно промерить углы между этими осями и внешними координатными осями X , Y , Z . Промер углов ведут, помещая оси X и Y в полюса сетки Вульфа и подсчитывая число градусов по меридианам до соответствующей оси $[100]$, $[010]$ и $[001]$. Углы между этими осями и осью Z (находящейся в центре проекции) промеряют, переводя поочередно внутренние оси на вертикальный меридиан и подсчитывая по этому меридиану число градусов от оси до центра проекции.

Для примера в табл. 2 приведены значения углов, измеренные по проекции на рис. 5.

Таблица 2

Значения углов между внутренними и внешними осями координат

Внешняя ось	Внутренняя ось		
	$[100]$	$[010]$	$[001]$

X	64°	85°	152°
Y	50°	138°	78°
Z	50°	49°	64°

Правильность определения углов проверяют нахождением сумм квадратов направляющих косинусов. По колонкам и строкам эти суммы должны быть равны единице.

В выполняемой работе ставится задача ориентировки одного из важнейших кристаллографических направлений типа $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ или $\langle 111 \rangle$ вдоль первичного пучка. Выбор нужного направления производится исходя из соображений, что угол между осью Z и выбираемым направлением должен быть небольшим (поворот вокруг оси Y не должен быть больше 15-20°). Угол поворота вокруг оси X не ограничен.

После того, как необходимое направление выбрано, совмещают выходы оси Y с полюсами сетки Вульфа и производят графический поворот кристалла вокруг оси Y до попадания точки проекции выбранного направления на плоскость ZY (на линию вертикального меридиана сетки Вульфа). Затем совмещают выходы оси X с полюсами сетки Вульфа и определяют угол поворота, необходимый для совмещения выбранного направления после поворота вокруг оси Y с выходом оси Z (совпадающей с направлением первичного пучка), находящейся в центре проекции. При определении углов поворота кристалла нужно учитывать направление поворота, которое определяется от наблюдателя, смотрящего вдоль оси X и Y со стороны ее положительного направления. Если рассматриваемое главное направление перемещается при графическом повороте по параллели сетки Вульфа **слева направо** (положительное направление соответствующей оси находится наверху), то это значит, что поворот кристалла производится **по часовой стрелке**. Если точка проекции движется налево, то кристалл поворачивается **против часовой стрелки**.

Для примера приводятся углы и направления поворота кристалла, определенные для проекции на рис. 5. (с направлением оси Z совмещается ось $[111]$). Найденные углы поворота заносят в табл. 3.

Таблица 3

Углы поворота кристалла

Внутренняя ось	Внешняя ось		Направление поворота
	X	Y	

[111]	10°	-	Против часовой стрелки
[111]	-	4°	Против часовой стрелки

После нахождения углов и направлений поворота производят поворот кристалла в камере. Для этого камеру располагают диафрагмой к себе (при этом конец оси X смотрит вверх, конец оси Y – направо и конец оси Z – от наблюдателя).

После этого, глядя на большую дугу гониометрической головки справа, проводят поворот по этой дуге (поворот вокруг оси Y) на нужное число градусов и в нужном направлении. Затем, глядя на гониометрическую головку сверху, проводят поворот вокруг оси головки (поворот вокруг оси X), число градусов отсчитывают по лимбу (от записанного углового положения указателя при съемке неориентированного кристалла).

Установив снова камеру перед рентгеновской трубкой, производят съемку повернутого кристалла. Симметрия полученной лауэ-граммы должна соответствовать симметрии важного направления, выведенного в центр проекции.

Расчет и индцирование эпиграммы

Камера РКСО позволяет также получать рентгенограммы, снятые на отражение (эпиграммы).

Для изучения металлических монокристаллов и особенно монокристаллов тугоплавких металлов (Mo, W, Nb, Ta и др.) съемка на отражение имеет большее значение, чем съемка на просвет.

Схема съемки показана на рис. 6.

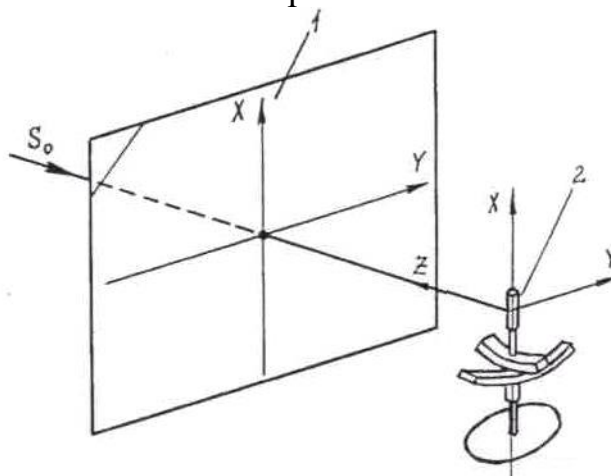


Рис.6. Схема съемки эпиграмм

Пучок рентгеновских лучей \bar{S}_0 проходит через диафрагму в кассете 1, освещая образец 2, который устанавливается на гониометрической головке. В отличие от съемки лауэграмм большую дугу гониометрической головки располагают *параллельно* кассете с фотопленкой. Декартова система координат XYZ выбирается таким образом, что ось X совпадает с вертикальной осью вращения гониометрической головки, ось Y параллельна плоскости кассеты, ось Z противоположна направлению первичного пучка рентгеновских лучей. Отсчет углов поворота вокруг оси X проводят по круговому лимбу, вокруг оси Y – по малой дуге гониометрической головки, а вокруг оси Z – по большой дуге гониометрической головки.

Существуют несколько способов расчета эпиграмм: по сетке Вульфа и стандартным стереографическим проекциям, по сетке Гренингера, методом проб и ошибок.

В данной работе используется метод с применением сетки Вульфа и стандартных стереографических проекций для кубических кристаллов.

Для расчета эпиграмму располагают так, чтобы тень от проволоочки находилась в верхнем правом углу. На рентгенограмме выбирают несколько наиболее ярких пятен, находящихся на нескольких гиперболах. Затем промеряют расстояние от центра светлого круга, являющегося тенью диафрагмы, через которую проходил первичный пучок, до выбранных и пронумерованных рефлексов.

При построении гномостереографической проекции необходимо учитывать, что нормаль N_{hkl} отражающей плоскости (hkl) является биссектрисой угла между первичным пучком s_0 и отраженным лучом s_{hkl} (рис. 7).

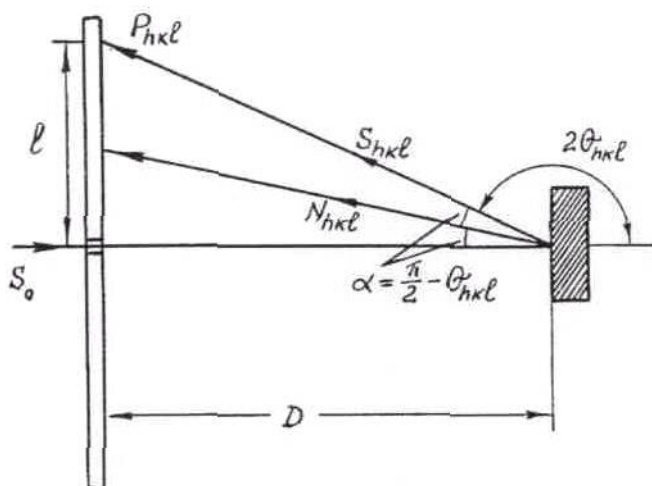


Рис. 7. Схема, поясняющая расчет эпиграммы

Угол $\alpha = \pi/2 - \Theta_{hkl}$ для каждого из выбранных рефлексов находится из соотношения:

$$\alpha = 1/2 \cdot \arctg(l/D), \quad (2)$$

где D – расстояние образец – пленка. Значения α находят пользуясь табл. 1.

Связь между дифракционным пятном P_{hkl} на эпиграмме и точкой N_{hkl} , являющейся выходом нормали к отражающей плоскости на гномостереографической проекции показана на рис. 8. Для построения гномостереографической проекции плоскости (hkl) необходимо отложить угол α по сетке Вульфа от ее центра в направлении пятна P_{hkl} . Такое построение необходимо провести для всех выбранных дифракционных пятен P_{hkl} .

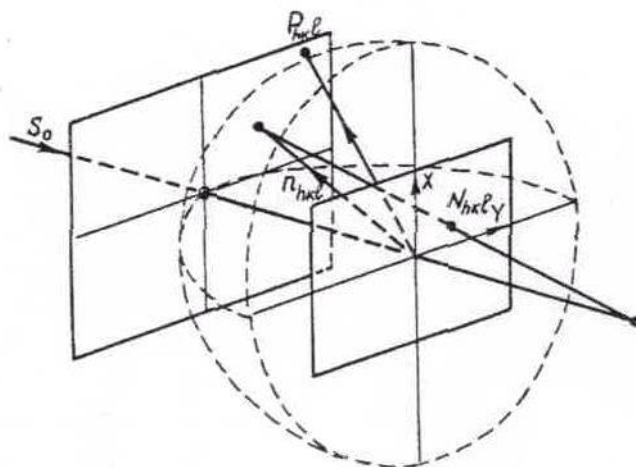


Рис. 8. Связь между дифракционным пятном P_{hkl} на эпиграмме и точкой N_{hkl}

Для индирования рентгенограммы выбирают одно из самых темных пятен (рефлекс 4 на рис. 9), принадлежащих отражению от плоскостей с малыми индексами (hkl), что определяют по "слепой" области вокруг него, т.е. отсутствию рефлексов от других плоскостей, в этом пятне должно пересекаться много зональных кривых (гипербол).

Нормаль к выбранной плоскости \mathbf{n}_{hkl} поворачивают на вычисленный для выбранного пятна угол α до ее совпадения с осью Z. На стереографической проекции это проявляется в том, что гномостереографическая проекция \mathbf{N}_{hkl} смещается по экватору сетки Вульфа до совпадения со стереографической проекцией оси Z, т.е. с центром проекции.

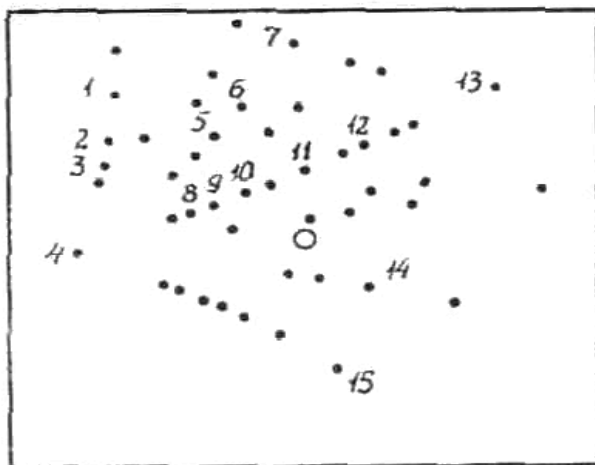


Рис. 9. Схема эпиграммы

На этот же угол α смещают по параллелям все остальные гномостереографические проекции.

Для индирования эпиграмм используют специальные стандартные стереографические проекции диаметром 10 см, которые являются более подробными изображениями *центральных* частей обычных стандартных проекций диаметром 20 см, т.е. на этих сетках дополнительно изображены проекции нормалей с большими индексами. Такие проекции построены отдельно для ОЦК и ГЦК кристаллов направлений $[100]$, $[110]$, $[111]$.

Полученную повернутую гномостереографическую проекцию совмещают с одной из указанных выше проекций (учитывая структуру исследуемого кристалла – ОЦК или ГЦК).

Вращением вокруг центра одной из стандартных проекций добиваются одновременного совмещения полученных \mathbf{N}_{hkl} со

стандартными, после чего им приписывают соответствующие индексы. На проекции отмечаются также направления типа $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$.

Затем полученную проекцию накладывают на одну из обычных (диаметром 20 см) стандартных стереографических проекций, по которой отмечают выходы всех нормалей типа $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$. Путем поворота на угол α_i в обратном направлении определяют стереографические проекции направлений типа $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ для исходного положения монокристалла.

После этого приступают к определению установочных углов для ориентирования монокристалла. *Частичная* ориентировка монокристалла заключается в повороте монокристалла вокруг двух осей до совпадения какого-либо направления $[hkl]$ с одной из осей лабораторной системы координат XYZ . *Полная* ориентировка монокристалла состоит в повороте его вокруг трех осей гониометрической головки до совпадения двух выбранных ортогональных направлений $[h_1k_1l_1]$ и $[h_2k_2l_2]$ (например, $[100]$ и $[010]$) с осями лабораторной системы XYZ .

Полная ориентировка монокристалла

При определении углов поворота на гониометрической головке необходимо всегда начинать определение угла поворота на стереографической проекции с поворота по малой дуге (в данном случае вокруг оси Y), затем по большой дуге (вокруг оси Z) и в последнюю очередь по круговому лимбу (вокруг оси X). При такой последовательности поворотов каждый предыдущий поворот не будет вызывать изменения положения на стереографической проекции осей последующих поворотов.

Для выполнения полной ориентации монокристалла с совпадением осей $[100]$, $[010]$ и $[001]$ с осями X , Y , Z определяем первый угол поворота φ_1 вокруг оси Y до выхода проекции оси $[100]$ на большой круг (рис. 10).

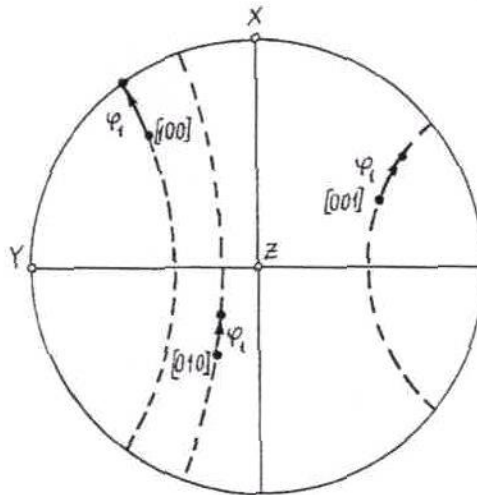


Рис. 10. Поворот проекции вокруг оси Y

При этом проекции осей $[010]$ и $[001]$ займут новые положения (указаны стрелками). Второй угол поворота φ_2 вокруг оси Z приводит к совмещению оси $[100]$ с осью X , а оси $[010]$ и $[001]$ расположатся на экваторе ZY (рис.11).

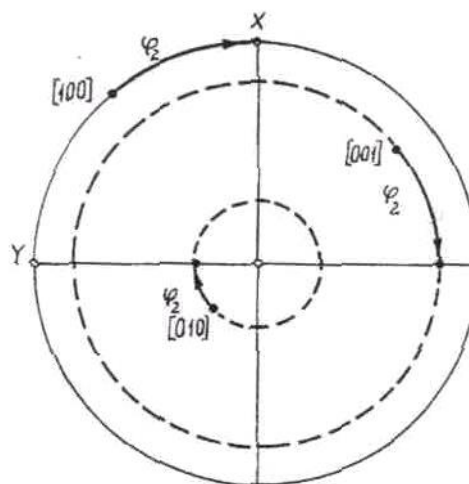


Рис. 11. Поворот проекции вокруг оси Z

Третий угол поворота φ_3 вокруг оси X приводит к совмещению $[010]$ с осью Y и $[001]$ с осью Z , оставляя неподвижной ось $[100]$, совпадающую с осью X (рис.12).

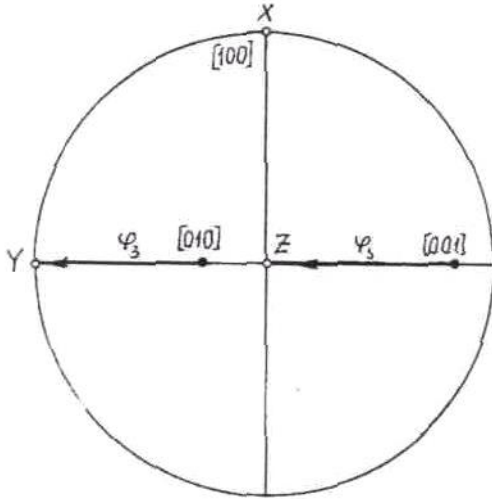


Рис. 12. Поворот проекции вокруг оси X

Таким образом, поворотами на углы φ_1 , φ_2 , φ_3 вокруг осей Y, Z, X проведена полная ориентация монокристалла.

Возможен иной подход, связанный с использованием матричных представлений.

Будем понимать под полной ориентацией кристалла в общем случае такое расположение кристалла, когда с осями X, Y, Z внешней (лабораторной) системы координат совпадают три произвольных ортогональных внутренних кристаллографических направления $[h_1k_1l_1]$, $[h_2k_2l_2]$ и $[h_3k_3l_3]$ (нормали к плоскостям с соответствующими индексами). Связь между координатами единичного вектора \mathbf{n}_{hkl} к плоскости (hkl) в лабораторной системе координат XYZ и во внутренней системе ($[100]$, $[010]$, $[001]$) осуществляется с помощью ориентационной матрицы **U**:

$$\mathbf{n}_{XYZ} = \mathbf{U} \mathbf{n}_{hkl}. \quad (3)$$

Ориентационная матрица осуществляет переход от внутренних осей к внешним.

Более подробно соотношение (3) записывается в виде

$$\begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h/(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2} \\ k/(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2} \\ l/(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Из соотношения (4) следует, что вектор $[100]$ переходит в вектор с координатами u_{11} , u_{21} , u_{31} , вектор $[010]$ – в вектор с координатами u_{12} , u_{22} , u_{32} , а вектор $[001]$ – в вектор с координатами u_{13} , u_{23} , u_{33} . Поэтому матрицу удобно рассматривать состоящей из векторов-столбцов

$$\mathbf{U} = |\tilde{\mathbf{u}}_{*1} \quad \tilde{\mathbf{u}}_{*2} \quad \tilde{\mathbf{u}}_{*3}| = \begin{vmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} \\ \tilde{\mathbf{u}}_{*1} & \tilde{\mathbf{u}}_{*2} & \tilde{\mathbf{u}}_{*3} \end{vmatrix}. \quad (5)$$

Таким образом, если известны координаты вектора \mathbf{n}_{hkl} , то из соотношения (3) можно вычислить координаты вектора \mathbf{n}_{hkl} . При этом считаем, что матрица \mathbf{U} описывает поворот внутренней системы координат до совмещения ее с внешней системой при неизменной ориентации вектора \mathbf{n}_{hkl} ("пассивная" интерпретация).

"Активный" поворот кристалла отвечает повороту вектора \mathbf{n}_{hkl} в неподвижной системе координат и описывается обратной матрицей $\mathbf{U}^{-1} = \tilde{\mathbf{U}}$.

При этом матрица $\tilde{\mathbf{U}}$ задает переход от лабораторной системы в кристаллографическую систему координат:

$$\begin{vmatrix} h/(h^2+k^2+l^2) \\ k/(h^2+k^2+l^2) \\ l/(h^2+k^2+l^2) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} u_{11} & u_{21} & u_{31} \\ u_{12} & u_{22} & u_{32} \\ u_{13} & u_{23} & u_{33} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{vmatrix}. \quad (6)$$

Матрицу $\tilde{\mathbf{U}}$ можно записать в виде $(\tilde{\mathbf{u}}_{*1}, \tilde{\mathbf{u}}_{*2}, \tilde{\mathbf{u}}_{*3})$, где компонентами $\tilde{\mathbf{u}}_{*i}$ являются кристаллографические координаты для направлений, совпадающих с осями лабораторной системы координат. Матрицы-столбцы $\tilde{\mathbf{u}}_{*1}, \tilde{\mathbf{u}}_{*2}, \tilde{\mathbf{u}}_{*3}$, с другой стороны, являются матрицами-строками $\mathbf{u}_{*1}, \mathbf{u}_{*2}, \mathbf{u}_{*3}$, образующими ориентационную матрицу $\mathbf{U} = (\mathbf{u}_{*1}, \mathbf{u}_{*2}, \mathbf{u}_{*3})$.

Если известны ориентационные матрицы \mathbf{U}_1 и \mathbf{U}_2 для исходного и конечного положения кристалла, то поворот кристалла из исходного положения в конечное описывается матрицей

$$\mathbf{A} = (\tilde{\mathbf{U}}_2)^{-1} \tilde{\mathbf{U}}_1 = \mathbf{U}_2 \tilde{\mathbf{U}}_1. \quad (7)$$

Соотношение (7) иллюстрируется рис.13, который следует понимать таким образом. $X'Y'Z'$ отвечает исходному положению внутренних осей, а $X''Y''Z''$ – их конечному положению. Переход к лабораторной системе координат в первом случае описывается матрицей $\tilde{\mathbf{U}}_1$, а во втором случае – матрицей $\tilde{\mathbf{U}}_2$. Переход от начального к конечному положению кристаллографических осей описывается матрицей $\mathbf{A} = \mathbf{U}_2 \tilde{\mathbf{U}}_1$.

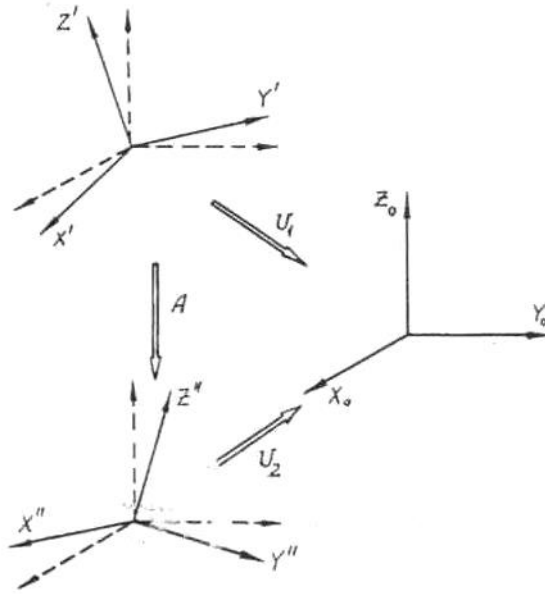


Рис. 13. Схема, поясняющая соотношение (7)

Полную ориентацию кристалла получают тремя поворотами: по дугам гониометрической головки и вокруг ее оси (отсчет по круговому лимбу). Последовательность поворота: вокруг оси Y (малая дуга) на угол φ_1 , вокруг оси Z (большая дуга) на угол φ_2 и вокруг оси X (лимб) на угол φ_3 . Углы поворота определяют из матрицы

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_X(\varphi_3) \cdot \mathbf{A}_Z(\varphi_2) \cdot \mathbf{A}_Y(\varphi_1). \quad (8)$$

Соответствующие матрицы имеют вид

$$\mathbf{A}_Y(\varphi_1) = \begin{vmatrix} \cos \varphi_1 & 0 & \sin \varphi_1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \varphi_1 & 0 & \cos \varphi_1 \end{vmatrix}, \quad (9)$$

$$\mathbf{A}_Z(\varphi_2) = \begin{vmatrix} \cos \varphi_2 & -\sin \varphi_2 & 0 \\ \sin \varphi_2 & \cos \varphi_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad (10)$$

$$\mathbf{A}_X(\varphi_3) = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi_3 & -\sin \varphi_3 \\ 0 & \sin \varphi_3 & \cos \varphi_3 \end{vmatrix}. \quad (11)$$

Результат произведения этих трех матриц:

$$\mathbf{A} = \begin{vmatrix} \cos \varphi_1 \cdot \cos \varphi_2 & -\sin \varphi_2 & \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \\ \cos \varphi_3 \sin \varphi_2 \cos \varphi_1 + \sin \varphi_1 \sin \varphi_3 & \cos \varphi_2 \cos \varphi_3 & \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \varphi_3 - \cos \varphi_1 \sin \varphi_3 \\ \sin \varphi_3 \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \varphi_3 & \cos \varphi_2 \sin \varphi_3 & \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \sin \varphi_3 + \cos \varphi_1 \cos \varphi_3 \end{vmatrix}.$$

Компонента a_{12} этой матрицы определяет угол φ_2 : $a_{12} = -\sin \varphi_2 = \sin(-\varphi_2)$. В то же время $a_{32}/a_{22} = \operatorname{tg} \varphi_3$ (при $a_{22} \neq 0$) и $a_{13}/a_{11} = \operatorname{tg} \varphi_1$ (при $a_{11} \neq 0$).

Отрицательное значение угла φ_i означает вращение вокруг соответствующей оси по часовой стрелке. При положительных значениях φ_i производят поворот против часовой стрелки (смотрим с конца соответствующей оси).

Порядок расчета рассмотрим на конкретном примере. После индентирования эпитагмы были выбраны главные кристаллографические направления $[100]$, $[010]$, $[001]$.

Результаты измерения углов между внутренними и лабораторными осями координат представлены в табл. 1.4. Под значениями углов приведены соответствующие величины косинусов.

Таблица 1.4

Углы между внутренними и лабораторными осями координат

Внутренняя ось	Лабораторная ось		
	X	Y	Z
$[100]$	$36,5^\circ$ 0,804	125° -0,574	79° 0,19
$[010]$	57° 0,545	35° 0,819	80° 0,174
$[001]$	103° -0,225	$93,5^\circ$ -0,061	$13,5^\circ$ 0,972

Отсюда получаем первую ориентационную матрицу

$$\mathbf{U}_1 = \begin{vmatrix} 0,804 & 0,545 & -0,225 \\ -0,574 & 0,819 & -0,061 \\ 0,190 & 0,174 & 0,972 \end{vmatrix}.$$

Предположим, что с осью Z надо совместить направление $[\bar{1}\bar{1}4]$, а с осью X – направление $[110]$. Третье ортогональное направление находим из векторного произведения:

$$[\bar{\mathbf{u}}_{1\bar{1}4} \times \bar{\mathbf{u}}_{110}] = \begin{vmatrix} \bar{\mathbf{i}} & \bar{\mathbf{j}} & \bar{\mathbf{k}} \\ 1 & -1 & 4 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix},$$

откуда $i = -4, j = 4, k = 2$, т.е. искомое направление имеет индексы $[\bar{2}21]$.

Проведем нормировку указанных направлений. Это позволит составить вторую ориентационную матрицу

$$\mathbf{U}_2 = \begin{vmatrix} 0,707 & 0,707 & 0 \\ -0,667 & 0,667 & 0,333 \\ 0,236 & -0,236 & 0,942 \end{vmatrix}.$$

Вычислим матрицу поворота осей

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \begin{vmatrix} 0,707 & 0,707 & 0 \\ -0,667 & 0,667 & 0,333 \\ 0,236 & -0,236 & 0,942 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} 0,804 & -0,574 & 0,190 \\ 0,545 & 0,819 & 0,174 \\ -0,225 & -0,061 & 0,973 \end{vmatrix} = \\ &= \begin{vmatrix} 0,954 & 0,173 & 0,258 \\ -0,248 & 0,908 & 0,312 \\ -0,150 & -0,386 & 0,921 \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

Тогда $a_{12} = -\sin\varphi_2 = -0,173$, $\varphi_2 = -10^\circ$ (поворот по часовой стрелке); $a_{13}/a_{11} = \operatorname{tg}\varphi_1 = 0,270$, $\varphi_1 = 15^\circ$ (поворот против часовой стрелки); $a_{32}/a_{22} = \operatorname{tg}\varphi_3 = -0,427$, $\varphi_3 = -23^\circ$ (поворот по часовой стрелке).

Особенности рентгеновской дифрактометрии монокристаллов рассмотрены в Приложении.

Порядок выполнения работы

1. Установить камеру РКСО на пучке рентгеновских лучей.
2. На гониометрической головке укрепить кристалл. Поставить и закрепить столик гониометрической головки так, чтобы нулевые штрихи находились против цифры 60. Поставить плоскость большой дуги головки параллельно первичному пучку рентгеновских лучей.
3. Снять лауэграмму кристалла (экспозиция 10 мин, напряжение 45 кВ, анодный ток 10 мА). Провести фотообработку рентгенограммы, промыть ее 15 мин, просушить. Снимок показать преподавателю. При отсутствии четко выраженных зональных эллипсов на рентгенограмме повернуть кристалл на головке (с разрешения преподавателя или лаборанта!) и съемку повторить.
4. Снять эпиграмму (экспозиция 1 ч, анодный ток 10 мА). Произвести фотообработку рентгенограммы, промыть ее 15 мин, просушить.
5. Провести расчет рентгенограммы и построить гномостереографическую проекцию по лауэграмме.

6. С использованием стандартных стереографических проекций определить индексы пятен и ориентировку кристалла, т.е. углы между лабораторными координатными осями X , Y , Z и главными кристаллографическими направлениями $[100]$, $[010]$, $[001]$. Результаты занести в таблицу:

Лабораторная ось	Внутренняя ось		
	$[100]$	$[010]$	$[001]$
X			
Y			
Z			

7. Измерить углы поворота важного направления (типа $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$), расположенного вблизи центра проекции, вокруг осей X и Y . Результаты привести в таблице:

Направление, выведенное в центр проекции	Угол поворота вокруг оси X	Угол поворота вокруг оси Y	Направление поворота

8. По данным расчета повернуть кристалл и получить ориентированный снимок.

9. Рассчитать и проиндцировать эпиграмму кристалла.

10. Определить углы между внутренними осями кристалла ($[100]$, $[010]$ и $[001]$) и внешними осями X , Y , Z . Результаты занести в таблицу, приведенную в п.6.

11. Для полной ориентации кристалла определить графическим и матричным методами углы поворота φ_1 , φ_2 , φ_3 , определить эйлеровские углы поворота.

Содержание отчета

Отчет должен содержать все полученные рентгенограммы, кальки с проекциями, таблицами и углами поворота.

Контрольные вопросы

Входной контроль

Принцип метода Лауэ.

Используемое рентгеновское излучение и устройство камеры.

Образец, применяемый в методе Лауэ.

Кристаллографические проекции.

Задачи, решаемые с помощью сетки Вульфа.

Выходной контроль

Кристаллографические проекции.

Задачи, решаемые с помощью сетки Вульфа.

Метод Лауэ. Лауэграммы, эпиграммы. Объяснение расположения пятен по зональным кривым.

Эффективные области в методе Лауэ. Поле индексов.

Построение гномонической проекции по ориентированной лауэграмме.

Ориентирование неограниченных кубических кристаллов по лауэграммам с помощью стандартных стереографических проекций.

Определение ориентации кристаллов с неизвестной симметрией.

Типы симметрии рентгенограмм.

Задачи и упражнения

Изобразите кристаллографическую зону в прямом и обратном комплексах.

Изобразите кристаллографическую зону в линейной, гномонической, стереографической и гномостереографической проекциях.

Изобразите кристаллографическую зону в обратной решетке.

Получите аналитическое выражение для координат (X, Y) стереографической проекции направления $[mnp]$.

Как изображается на стереографической проекции поворот вокруг осей 1, 2, 3, 4 направления A).

Постройте несколькими способами малый круг на стереографической проекции.

Постройте стандартные стереографические проекции для направлений $[100]$, $[110]$ и $[111]$ кубического кристалла.

Как расположены в обратной решетке узлы, соответствующие отражениям разного порядка?

Покажите, что отражения разного порядка от плоскости в методе Лауэ имеют одно и то же направление.

Каков будет вид лауэграммы, если одна из важных кристаллографических плоскостей параллельна первичному пучку?

Как располагаются точки гномонической проекции пятен лауэграммы, принадлежащие одному зональному эллипсу?

Как изображаются узлы обратной решетки при использовании сферы единичного радиуса для интерпретации метода Лауэ?

Как располагаются в пространстве лучи, отраженные от плоскостей, принадлежащих одной кристаллографической зоне?

Как объясняется возникновение зонального эллипса при использовании в методе Лауэ сферы единичного радиуса?

Как изображаются узлы обратной решетки несовершенного кристалла, состоящего из отдельных совершенных, но слегка развернутых блоков? В каких направлениях размываются узлы обратной решетки?

Как изображаются узлы обратной решетки совершенного монокристалла после приложения неоднородного поля упругих напряжений?

Почему при расчете установочных углов монокристалла рекомендуется сначала определять угол поворота по малой дуге, а затем по большой, но не наоборот?

Какой вид имеют пятна лауэграммы от изогнутого кристалла и от сростка?

Лауэграмма алюминия (период $a = 0,4049$ нм) получена в камере РКСО ($D = 40,5$ мм) при напряжении 50 кВ. Отражение (113) находится на расстоянии $l_1 = 11,8$ мм от следа первичного пучка; отражение (211) находится на расстоянии $l_2 = 17$ мм. Определить, какие наблюдаются порядки отражения, и до какой величины нужно снизить напряжение, чтобы исчезло одно из пятен.

Практические навыки студента

Студент приобретает навыки выбора условий съемки рентгенограмм от монокристаллов по методу Лауэ, съемки

лауэграмм и эпиграмм и определения по ним ориентировки кристалла, получения ориентированных рентгенограмм.

Рекомендуемая литература

Русаков А.А. Рентгенография металлов. М., Атомиздат, 1977, гл. 9.

Русаков А.А., Яльцев В.Н., Скрытный В.И. Основы рентгенографии металлов. Ч. III. М.: МИФИ, 1998, гл. 9.

Горелик С.С., Скаков Ю.А., Расторгуев Л.Н. Рентгенографический и электронно-оптический анализ. Москва. МИСИС. 1994, раб.10.

Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.Р., Расторгуев Л.М. М.: Металлургия, 1982, гл. 9.

Приложение. Особенности дифрактометрии монокристаллов

Особенности монокристалльной дифрактометрии связаны с необходимостью замены двумерного детектора-пленки точечным детектором-счетчиком.

В соответствии с геометрической интерпретацией интерференционного уравнения точечному окну счетчика соответствует исследуемая (сканируемая) точка на сфере отражения. Условие дифракции заключается в том, что узел обратной решетки приводится на сферу отражения, а условие регистрации – в том, что сканируемая точка совмещается с этим узлом или, что то же самое, дифракционный вектор совмещается с вектором $\mathbf{H}_{hkl} \equiv \mathbf{h}$ узла обратной решетки.

В случае съемки экваториального типа первичный и дифракционный пучки находятся в одной экваториальной плоскости для всех отражений. В четырехкружном дифрактометре (рис. П.1) эйлеровская головка кристалла путем поворотов на углы χ и ϕ позволяет осуществлять выведение произвольного вектора \mathbf{h} в экваториальную (в данном случае – горизонтальную) плоскость, а поворотом на ω вокруг главной оси дифрактометра вектор \mathbf{h} выводится в отражающее положение.

Повороты на эйлеровские углы ω , χ , ϕ в матричном виде записываются как произведение матриц:

$$\mathbf{S} = \mathbf{R}(\phi)\mathbf{R}(\chi)\mathbf{R}(\omega) =$$

$$= \begin{vmatrix} \cos\phi\cos\omega - \sin\phi\sin\omega\cos\chi & \cos\phi\sin\omega + \sin\phi\cos\omega\cos\chi & \sin\phi\sin\chi \\ -\sin\phi\cos\omega - \cos\phi\sin\omega\cos\chi & -\sin\phi\sin\omega + \cos\phi\cos\omega\cos\chi & \cos\phi\sin\chi \\ \sin\chi\sin\omega & -\sin\chi\cos\omega & \cos\chi \end{vmatrix},$$

$$\text{где } \mathbf{R}(\omega) = \begin{vmatrix} \cos\omega & \sin\omega & 0 \\ -\sin\omega & \cos\omega & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \mathbf{R}(\chi) = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\chi & \sin\chi \\ 0 & -\sin\chi & \cos\chi \end{vmatrix}, \mathbf{R}(\phi) = \begin{vmatrix} \cos\phi & \sin\phi & 0 \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}.$$

Теперь связь \mathbf{E}_C и \mathbf{E}_D задается соотношением:

$$\mathbf{E}_C = \mathbf{S}\mathbf{E}_D.$$

Вектор \mathbf{h} можно представить в системе координат \mathbf{E}_C и \mathbf{E}_D :

$$\mathbf{h}_C = \tilde{\mathbf{S}}^{-1} \mathbf{h}_D = \mathbf{S} \mathbf{h}_D.$$

В отражающем положении $\mathbf{h}_D = \begin{vmatrix} 0 \\ \mathbf{h} \\ 0 \end{vmatrix}$, откуда:

$$\mathbf{h}_C = |\mathbf{h}| \cdot \begin{vmatrix} \cos\phi\sin\omega + \sin\phi\cos\chi\cos\omega \\ -\sin\phi\sin\omega + \cos\phi\cos\chi\cos\omega \\ -\sin\chi\cos\omega \end{vmatrix}.$$

Знание компонентов \mathbf{h}_C позволяет определить установочные углы ω , ϕ , χ . Переход от \mathbf{h} к \mathbf{h}_C осуществляется матрицей \mathbf{UB} :

$$\mathbf{h}_C = \mathbf{UBh},$$

\mathbf{U} — ориентационная матрица, матрица \mathbf{B} определяет метрику кристалла, так что $\tilde{\mathbf{B}}\mathbf{B} = \mathbf{G}^{-1}$, где \mathbf{G}^{-1} — обратная метрическая матрица с компонентами $g_{ij}^{-1} = \vec{\mathbf{b}}_i \vec{\mathbf{b}}_j$ ($\vec{\mathbf{b}}_i, \vec{\mathbf{b}}_j$ — базисные векторы обратной решетки).

Содержание

Введение.....	2
Основы метода Лауэ.....	2
Цель работы.....	3
Приборы и оборудование.....	3
Содержание работы.....	5
Получение лауэграммы.....	5
Расчет и индигирование лауэграммы.....	7
Расчет и индигирование эпиграммы.....	14
Полная ориентировка монокристалла.....	17
Порядок выполнения работы.....	23
Содержание отчета.....	24
Контрольные вопросы.....	25
<i>Входной контроль</i>	25
<i>Выходной контроль</i>	25
Задачи и упражнения.....	25
Практические навыки студента по выполняемой работе.....	26
Рекомендуемая литература.....	27
Приложение. Особенности дифрактометрии монокристаллов	27