положения линий – геометрия решетки (расстояния, углы)
$\lambda = 2\,d \sin\theta$ + макронапряжения
интенсивность – координаты атомов, текстура
(+ крупная блочность (>200 нм))
ширина – несовершенство кристалла

Интенсивности линий

$$F(\theta) = \sum_j f_j(\theta) \cdot \exp\left(2\pi i \cdot (hx_j + ky_j + lz_j)\right)$$

$$I(\theta) = A(\theta) \cdot |F(\theta)|^2$$

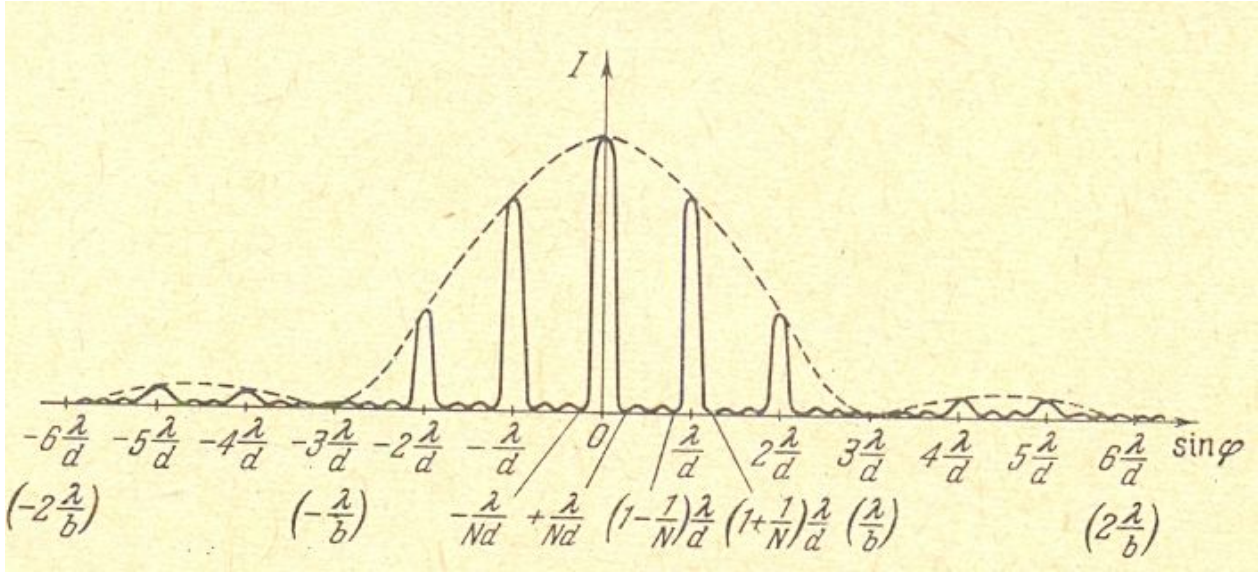
Ширина линий

$$\beta = \frac{\lambda}{L \cdot \cos\theta}$$ формула Шерера

$$\beta = 2\frac{\Delta d}{d} \cdot \mathrm{tg}\,\theta$$

Оптическая дифракционная решетка
Из И.В.Савельев. «Курс общей

$$I_{\text{реш}} = I_0 \frac{\sin^2(\pi b \sin\varphi/\lambda)}{(\pi b \sin\varphi/\lambda)^2} \frac{\sin^2(N\pi d \sin\varphi/\lambda)}{\sin^2(\pi d \sin\varphi/\lambda)}$$



$$d \sin\varphi = \pm \frac{k'}{N} \lambda$$

$Nd = L$

Анализ профиля пика

малые размеры ОКР $$\beta = \frac{\lambda}{L \cdot \cos\theta}$$

микронапряжения $$\beta = 2\frac{\Delta d}{d} \cdot \mathrm{tg}\,\theta$$

НО!

$$h(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(g(x-y) \int_{-\infty}^{+\infty} f_{ОКР}(y) \cdot f_{мн}(y-z)\,dz \right) dy = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x-y) \cdot f(y)\,dy$$

$$B = (\int h(x)dx) / I_B \quad b = (\int g(x)dx) / I_b \quad \beta = (\int f(x)dx) / I_\beta$$

g(x), f(x): exp $(-\alpha x^2)$ (1, ф-я Гаусса) $(1 + \alpha x^2)^{-1}$ (2, ф-я Лоренца) $(1 + \alpha x^2)^{-2}$ (3)

$g(x)$	$f(x)$	$B(b,\beta)$
1	1	$B^2 = b^2 + \beta^2$
2	2	$B = b + \beta$
2	3	$\beta = 0.5(1 - b / B + \sqrt{1 - b / B})$

Функция псевдо – Войта: (функция Войта – свертка (1) и (2)

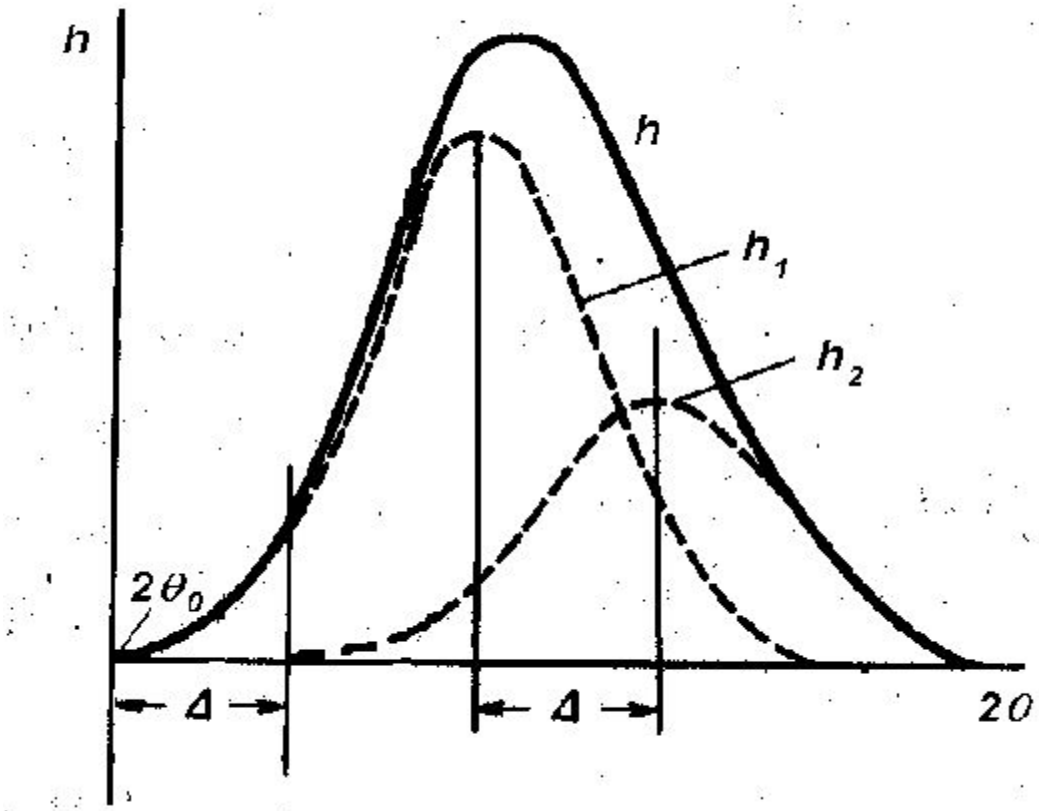
$$I^{лин}(\theta) = I_0\left(\eta \frac{2}{\pi \cdot H_k}\left[1 + 4\left(\frac{2\theta - 2\theta_0}{H_k}\right)^2\right]^{-1} + (1-\eta)\frac{2\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} H_k}\exp\left[-4\ln 2 \cdot \left(\frac{2\theta - 2\theta_0}{H_k}\right)^2\right]\right)$$

$$\eta = 1.36603 \cdot \left(\frac{H_L}{H_k}\right) - 0.47719 \cdot \left(\frac{H_L}{H_k}\right)^2 + 0.11116\left(\frac{H_L}{H_k}\right)^3$$

$$H_k = \left(H_G^5 + 2.69269 H_G^4 H_L + 2.42843 H_G^3 H_L^2 + 4.47163 H_G^2 H_L^3 + 0.07842 H_G H_L^4 + H_L^5\right)^{1/5}$$

$$H_G = \sqrt{8\ln 2\left(U \operatorname{tg}^2\theta_0 + V \operatorname{tg}\theta_0 + W\right)}\,; \quad H_L = \left(X + X_a \cos\varphi_{hkl}\right)\sec\theta_0 + \left(Y + Y_a \cos\varphi_{hkl}\right)\operatorname{tg}\theta_0$$

Разделение линий дублета



$2\theta_0 + \Delta \le 2\theta < 2\theta_0 + 2\Delta$: $h_2(2\theta) = 0.5 \cdot h(2\theta - \Delta)$ и $h_1(2\theta) = h(2\theta) - h_2(2\theta)$

$2\theta \ge 2\theta_0 + 2\Delta$: $h_2(2\theta) = 0.5 \cdot h_1(2\theta - \Delta)$, а $h_1(2\theta)$ и $h_1(2\theta) = h(2\theta) - h_2(2\theta)$

Фурье анализ профиля пика

$$f(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\left(F_n^r\cdot\cos\left(n\cdot\frac{\pi}{D}x\right)+F_n^i\cdot\sin\left(n\cdot\frac{\pi}{D}x\right)\right)$$

то же для h и g

$$H_n^r=\frac{1}{2D}\int_{-D}^{D}h(x)\cdot\cos\left(n\cdot\frac{\pi}{D}x\right)dx \qquad H_n^i=\frac{1}{2D}\int_{-D}^{D}h(x)\cdot\sin\left(n\cdot\frac{\pi}{D}x\right)dx$$

$$H_n^r+iH_n^i=(G_n^r+iG_n^i)\cdot(F_n^r+iF_n^i)$$

$$\boxed{\begin{aligned}F_n^r&=A_n=(H_n^r\cdot G_n^r+H_n^i\cdot G_n^i)/((G_n^r)^2+(G_n^i)^2)\\F_n^i&=B_n=(H_n^i\cdot G_n^r-H_n^r\cdot G_n^i)/((G_n^r)^2+(G_n^i)^2)\end{aligned}}$$

Разделение вкладов малых ОКР и микронапряжений

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f_{бл}(x-y) \cdot f_{мн}(y)dy$$

для $f_{бл}(\theta)$ и $f_{мн}(\theta) \rightarrow \exp(-\alpha x^2)$

$((\beta \cdot \cos\theta)/\lambda)^2$ от $(\sin\theta/\lambda)^2$: $((\beta \cdot \cos\theta)/\lambda)^2$ при $(\sin\theta/\lambda)^2 = 0 \rightarrow 1/L^2$; наклон $\rightarrow (\Delta d/d)^2$

Для Фурье анализа профиля пика :

для $x = 4\pi \cdot \sin\theta \cdot d_0/\lambda$ (d_0 - межплоскостное расстояние для отражения 1-го порядка):

$$A_n = A_n^{бл} \cdot A_n^{мн} \qquad A_n^{мн} = \cos(2\pi \cdot l \cdot Z_n)$$

где l - порядок отражения, $Z_n = n \cdot \Delta d/d$

для малых Z_n: $\ln A_n = \ln A_n^{бл} - 2\pi^2 l^2 Z_n^2$

$$(dA_n^{бл}(n)/dn)_{n=0} = -d/L$$

1. Наклон $\ln A_n$ от $l^2 \rightarrow Z_n \rightarrow \Delta d/d$ и $A_n^{бл}$

2. Наклон $A_n^{бл}(n)$ при $n = 0 \rightarrow L$

Распределение ОКР по размерам, точность определения *L*

$$I = \int_0^\infty I_{реш}(2\theta, L) \cdot \rho(L) \cdot dL$$

относительная точность определения *L* ≈ *10%*

Литература.

1. Я.С. Уманский. Рентгенография металлов. М, Металлургия, 1967.
2. С.С. Горелик, Ю.А. Скаков, Л.Н. Расторгуев. Рентгенографический и электронноптический анализ. М, МИСИС, 1994, стр. 117 - 186.
3. Л.М. Ковба. Рентгенография в неорганической химии. М, МГУ, 1992, стр. 228 -244.

Анализ макронапряжений.

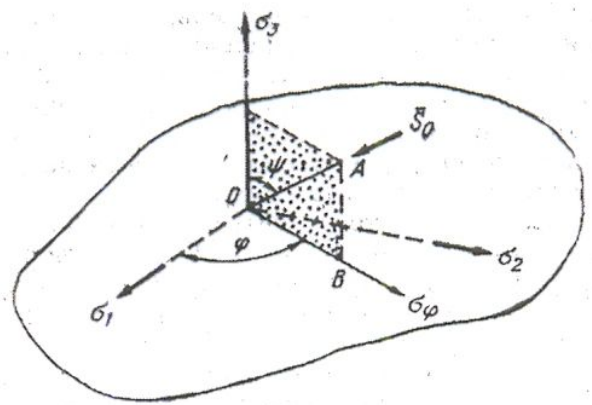
$$\sigma_\varphi = \sigma_1 \cos^2 \varphi + \sigma_2 \sin^2 \varphi$$

σ_1 и σ_2 - компоненты тензора напряжений в плоскости образца, φ - азимутальный угол между падающим пучком и σ_1.

$$\varepsilon_{\varphi,\psi} = \Delta d/d = (1+\nu)/E \cdot \sigma_\varphi \cdot \sin^2 \psi + \varepsilon_\perp$$

ν - коэффициент Пуассона, E - модуль Юнга, ψ - угол падения луча на поверхность (угол "2θ").

$90^\circ - \frac{2\theta}{2}$



$$\sigma_\varphi = \frac{E}{1+\nu}\frac{\dfrac{d_{\varphi,\psi 2}-d_0}{d_0}-\dfrac{d_{\varphi,\psi 1}-d_0}{d_0}}{\sin^2\psi_2-\sin^2\psi_1} = \frac{E}{1+\nu}\frac{1}{d_0}\frac{d_{\varphi,\psi 2}-d_{\varphi,\psi 1}}{\sin^2\psi_2-\sin^2\psi_1}$$

d_0 часто берется как d при $\psi = 90°$ - "2θ"/2

-RRC

Определение σ_1, σ_2 и φ: съемка при $\varphi+\alpha$ и $\varphi-\alpha$

$$\sigma_1 = \sigma_\phi + 1/2\left(\sigma_{\phi-\alpha} - \sigma_{\phi+\alpha}\right)\tan\phi / \sin 2\alpha$$

$$\sigma_2 = \sigma_\phi - 1/2\left(\sigma_{\phi-\alpha} - \sigma_{\phi+\alpha}\right)\cot\phi / \sin 2\alpha$$

$$\tan 2\phi = \frac{\sigma_{\phi-\alpha} - \sigma_{\phi+\alpha}}{2\sigma_\phi - \sigma_{\phi-\alpha} - \sigma_{\phi+\alpha}}$$