

**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

$$F(\theta) = \sum_j f_j(\theta) \cdot \exp(2\pi i \cdot (hx_j + ky_j + lz_j))$$
$$I(\theta) = A(\theta) \cdot |F(\theta)|^2$$

### Ширина линий

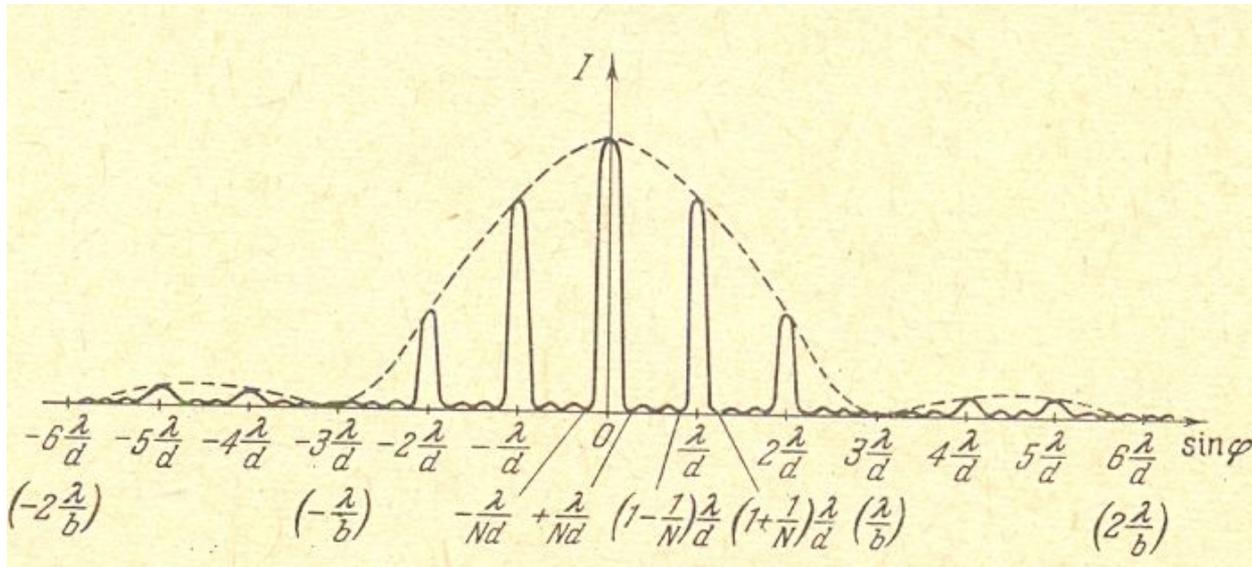
$$\beta = \frac{\lambda}{L \cdot \cos \theta} \quad \text{формула Шерера}$$

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

# 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

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

**НО!**

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

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

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

| $g(x)$ | $f(x)$ | $B(b, \beta)$                               |
|--------|--------|---|
| 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))

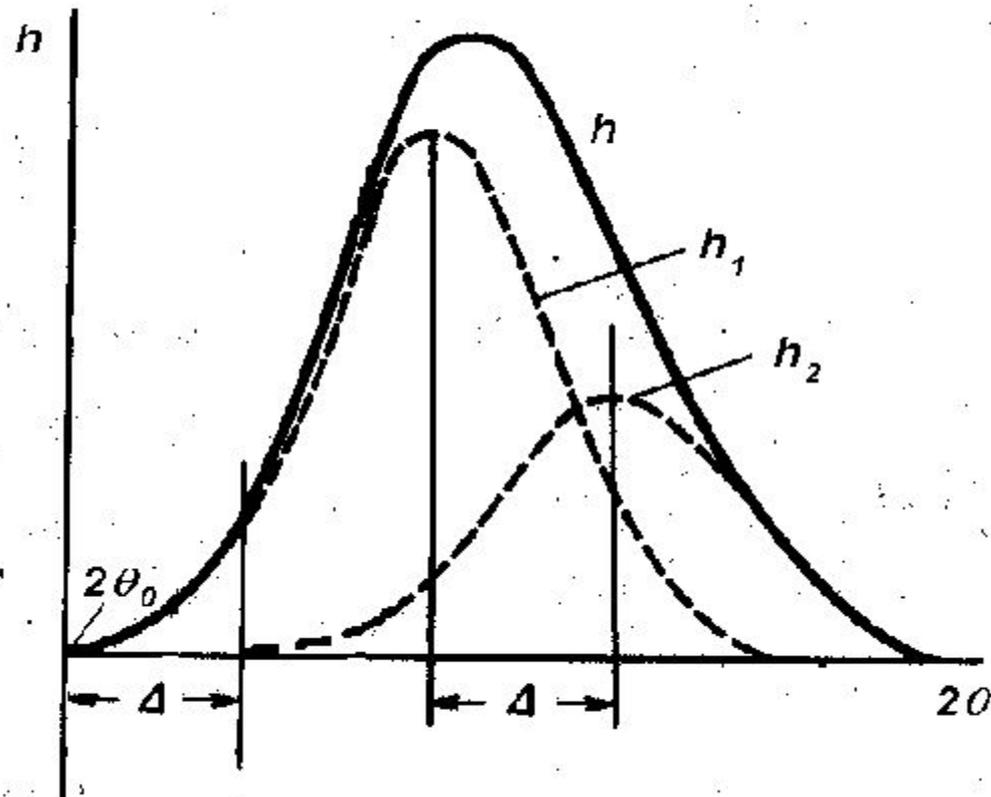
$$I^{mu}(\theta) = I_0 \left( \eta \frac{2}{\pi \cdot H_k} \left[ 1 + 4 \left( \frac{2\theta - 2\theta_0}{H_k} \right)^2 \right]^{-1} + (1 - \eta) \frac{2\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} H_k} \exp \left[ -4 \ln 2 \cdot \left( \frac{2\theta - 2\theta_0}{H_k} \right)^2 \right] \right)$$

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

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

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

## Разделение линий дублета



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

$2\theta \geq 2\theta_0 + 2\Delta$ :  $h_2(2\theta) = 0.5 \cdot h_1(2\theta - \Delta)$ , 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  $g$

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

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

$$F_n^r = A_n = (H_n^r \cdot G_n^r + H_n^i \cdot G_n^i) / ((G_n^r)^2 + (G_n^i)^2)$$

$$F_n^i = B_n = (H_n^i \cdot G_n^r - H_n^r \cdot G_n^i) / ((G_n^r)^2 + (G_n^i)^2)$$

# Разделение вкладов малых ОКР и микронапряжений

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

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

$((\beta \cdot \cos \theta)/\lambda)^2$  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):

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

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

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

$$(dA_n^{\text{бл}}(n) / dn)_{n=0} = -d / L$$

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

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

# Распределение ОКР по размерам, точность определения $L$

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

относительная точность определения  $L \approx 10\%$

## Литература.

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

## Анализ макронапряжений.

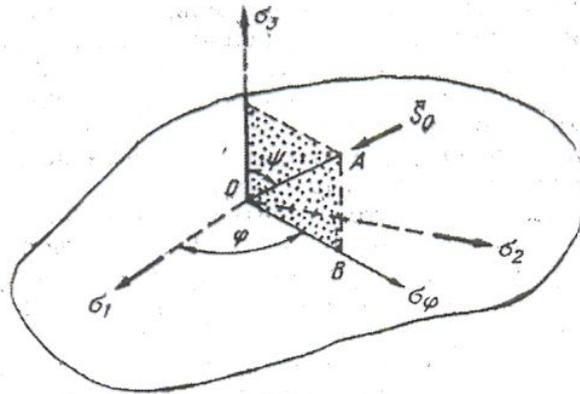
$$\sigma_\varphi = \sigma_1 \cos^2 \varphi + \sigma_2 \sin^2 \varphi$$

$\sigma_1$  и  $\sigma_2$  - компоненты тензора напряжений в плоскости образца,  $\varphi$  - азимутальный угол между падающим пучком и  $\sigma_1$ .

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

$\nu$  - коэффициент Пуассона,  $E$  - модуль Юнга,  $\psi$  - угол падения луча на поверхность (угол

$$90^\circ - \frac{\psi(\theta'')}{2}$$



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

$d_0$  часто берется как  $d$  при  $\psi = 90^\circ - "2\theta"/2$   
ABC

Определение  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  и  $\phi$ : съемка при  $\phi + \alpha$  и  $\phi - \alpha$

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

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

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