1.6.2 Интегральная интенсивность и фактор Лоренца

Следует напомнить, хотя это уже отмечалось в предыдущем разделе, что рассматриваемая теория, а, следовательно, и полученное выражение (25) для интенсивности рассеяния, относится к идеальному случаю плоской волны, т.е. к пучку абсолютно параллельных лучей, и к идеальному кристаллу не имеющему дефектов. К сожалению, на практике такого не встречается. Падающий на кристалл пучок состоит из слегка расходящихся, а иногда и сходящихся, рентгеновских лучей. Реальные кристаллы содержат точечные, линейные и плоские дефекты кристаллической решетки распределенные по объему. Такой кристалл можно рассматривать, как состоящий из совершенных областей (вдали от дефектов) и сильно искаженных областей (расположенных в непосредственной близости к дефектам).

У. Дарвин в начале 20-х годов предложил для описания процессов дифракции рассматривать реальные кристаллы, как состоящие из совершенных блоков (мозаики), но слегка разориентированных относительно друг друга. Размер блоков мозаики зависит от размера совершенных областей в реальном кристалле, т.е. от среднего расстояния между дефектами, а углы разориентации блоков зависят от типов и концентрации дефектов, содержащихся в кристалле. Такое строение реального кристалла приводит к тому, что отражающая кристаллографическая плоскость (hkl) состоит из разориентированных кусков, наподобие неровно вымощенной брусчаткой дороги.

Вследствие такого строения отражающей плоскости условие Вульфа-Брэгга для падающего на кристалл луча может выполняться не при единственном угле Θ, а в некотором диапазоне углов $\Delta\Theta$, зависящем от угла разориентации блоков мозаики. Это означает, что для измерения полной интенсивности отражения плоскостью (hkl) всех элементарных ячеек кристалла, необходимо измерить эту интенсивность во всех углах из интервала $\Delta\Theta$, то есть провести интегрирование интенсивности отражения в интервале $\Delta\Theta$. Отсюда возникает понятие интегральной интенсивности, а заодно и сканирования, которое означает просмотр интервала углов дифракции $\Delta\Theta$.

Что касается интегрирования отражения по интервалу $\Delta\Theta$, то оно достигается поворотом (сканированием) исследуемого кристалла около положения Θ_{hkl} . Поскольку при сканировании регистрируется отражение от одной и той же системы плоскостей (hkl), то абсолютная величина соответствующего вектора обратной решетки ~H остается одной и той же. При наглядном изображении процесса дифракции с помощью сферы Эвальда рассматриваемое сканирование можно изобразить как поворот конца вектора H вокруг нулевого узла обратной решетки на угол $\Delta\Theta$. Конец вектора H при этом будет пересекать сферу Эвальда. Если рассматривать сферу единичного радиуса (т.е. задать радиус сферы Эвальда R = 1), то узел обратной решетки исследуемого кристалла будет занимать объем обратного пространства, равный λ^3/V (т.е. объем узла обратно пропорционален объему V элементарной ячейки кристалла). Следовательно, поворот вектора H при описанном сканировании приведет к тому, что вместе с его концом сфера Эвальда будет пересекаться узлом обратной решетки имеющим некоторый объём. Естественно, чтобы получить полную интенсивность отражения, необходимо., чтобы весь объем узла обратной решетки побывал на поверхности сферы. Это условие означает, что для измерения интегральной интенсивности отражения даже для идеального немозаичного кристалла необходимо выполнить сканирование, чтобы в отражающем положении, т.е. на поверхности сферы Эвальда, побывала каждая точка объема узла hkl. Если все узлы имеют одинаковые размеры, то из изображения их на сфере Эвальда ясно, что угол сканирования $\Delta\Theta$ для интегрального отражения узлом будет зависеть от длины вектора H и от места сферы, в котором должно происходить пересечение при сканировании. Например, узлы, находящиеся вблизи нулевого узла будут пересекать сферу быстро и почти перпендикулярно к ее поверхности. Узлы, удаленные от нулевого, пересекут сферу почти по касательной и могут при сканировании очень долго находиться на поверхности сферы. Таким образом, регистрируемая интегральная интенсивность зависит не только от отражающей способности плоскости (hkl) или величины структурного фактора F^2_{hkl}, но и от места пересечения узла со сферой Эвальда. Этот факт учитывается введением в выражение для интегральной интенсивности геометрического множителя, называемого фактором Лоренца. Рассмотрим зависимость фактора Лоренца от угла рассеяния Θ. Пусть обратная решетка вращается с угловой скоростью w вокруг вертикальной оси, перпендикулярной плоскости дифракции (плоскости, в которой лежат первичный и дифрагированный лучи) и проходящей через точку O (**Рис. 13**). При таком вращении в какой-то момент узел обратной решетки P' пересечет сферу Эвальда в точке P. Соединим точку P с концами диаметра экваториального сечения сферы Эвальда - точками N и O. Обратим внимание, что OP - вектор обратной решетки r* = H* = $1/d_{hkl}$. Вектор линейной скорости узла P' в точке P, равный ωH^* , направлен по касательной к окружности радиуса OP' и совпадает по направлению с отрезком NP ($V_{лин}$ = KP = w H*; KA - перпендикуляр к NP). AD - высота равнобедренного треугольника OAP параллельна KP, а угол KPA = Θ. Тогда V_n - компонента $V_{лин}$ вдоль AP (радиус сферы Эвальда) = $\omega H^* \cos\Theta = \omega \cos\Theta * 1/d_{hkl}$.

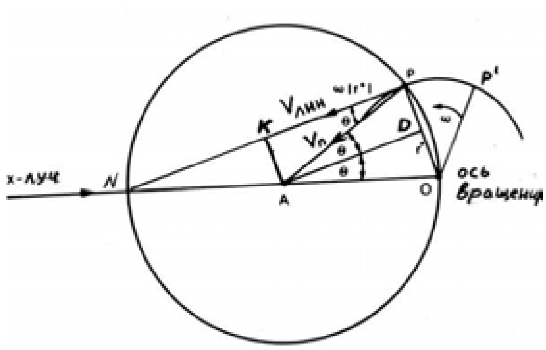

Рис. 13. Схема, иллюстрирующая необходимость введения поправки Лоренца для кристалла, вращающегося вокруг оси, перпендикулярной к плоскости, в которой лежат первичный и дифрагированный лучи.

Преобразуем дальше это уравнение, имея в виду, что $1/d_{hkl} = 2\,Sin\Theta/\lambda$:

$V_n = (\omega/l)\,2Sin\Theta\,Cos\Theta = (\omega/l)Sin2\Theta$.

Время нахождения узла обратной решётки в отражающем положении обратно пропорционально $V_{лин}$ и, соответственно, V_n. Таким образом, вся интенсивность I, связанная с узлом обратной решётки, проходящим через сферу отражения, будет пропорциональна величине: $I \sim \lambda/(\omega\ Sin2\Theta)$. Угловая часть этой величины, равная $1/Sin2\Theta$, называется фактором Лоренца. Математически факторы Лоренца (L) и поляризационный (P), связанные лишь с углом Θ, обычно объединяют в одну формулу:

$$LP = (1 + Cos^2 2\Theta)/2Sin2\Theta \qquad (26).$$