Визуализация многоволновой дифракции рентгеновских лучей в кристаллах

В. Г. Кон

(дата: 29-10-2011, обобщение предыдущих записей)

1. Проектирование трехмерной точки на двумерную плоскость из точки зрения

Поместим начало координат внутри трехмерного объекта и будем считать что проекция строится в плоскости, которая тоже проходит через это начало координат. Точка зрения находится очень далеко от начала координат и удобно задавать направление в точку рения с помощью трехмерного ненормированного вектора с координатами (v_x, v_y, v_z), а расстояние до точки зрения задавать отдельно в виде десятичного логарифма u, так что реальное расстояние $R = 10^u$. На первом этапе расчетов следует отнормировать вектор $\mathbf{v}$, вычислив его модуль $o = (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)^{1/2}$ и поделив все компоненты на этот модуль. Далее будем считать, что нормировка выполнена.

Произвольная точка на объекте $\mathbf{P} = (x, y, z)$ в результате проектирования переводится в точку проекции $\mathbf{p} = (x_1, y_1)$ на плоскости графика. Проектирование выполняется таким образом, что ось z трехмерного пространства переходит в ось y проекции. Алгоритм преобразования записывается следующим образом: сначала вычисляются вспомогательные параметры

$$v_p = (v_x^2 + v_y^2)^{1/2}, \quad h = zv_z - yv_y - xv_x, \quad r = [v_p(1 - h/R)]^{-1}, \tag{1}$$

и затем используются формулы

$$x_1 = r(xv_y - yv_x), \quad y_1 = r(z - v_z h). \tag{2}$$

Рассмотрим несколько частных случаев. Пусть все точки лежат на одной высоте (z постоянно) и на линии, перпендикулярной направлению проектирования, то есть выполняется условие $yv_y + xv_x = 0$. Тогда при проектировании в параллельных лучах ($R \to \infty$) все точки проекции будут иметь постоянную вертикальную координату y_1 и переменную горизонтальную координату x_1. С другой стороны, все точки на одной высоте, расположенные вдоль проекции направления проектирования будут иметь проекции с переменной вертикальной координатой y_1, но с постоянной горизонтальной координатой x_1. Если центральный луч из начала координат в направлении проектирования имеет положительные координаты, то точки вдоль оси x будут двигаться направо, а точки вдоль оси y – налево. При этом точки с минимальными x и y координатами будут ближе к наблюдателю независимо от z координаты. При правильном упорядочении точек можно легко учесть видимость или невидимость определенных деталей.

2. Визуализация геометрии многоволновой дифракции (anima3d)

Визуализация геометрии лучей при многоволновой дифракции в кристалле предполагает изображение кристалла и направлений пучков относительно его поверхности. Желательно выразить координаты кристалла и пучков в трехмерных декартовых координатах, после чего изображение можно провести в аксонометрической проекции из различных точек зрения. За ось z декартовой системы разумно взять анти-нормаль к поверхности, то есть вектор $\mathbf{z} = -\mathbf{h}_3(h_{33})^{-1/2}$. Ось x , как и раньше, пусть идет вдоль проекции падающего пучка на поверхность, то есть $\mathbf{x} = (K\cos\theta_0)^{-1}(\mathbf{k}_0 + \mathbf{z}K\sin\theta_0)$. Ось y выбирается стандартно как $\mathbf{y} = [\mathbf{z}\times\mathbf{x}] = (K\cos\theta_0)^{-1}[\mathbf{z}\times\mathbf{k}_0]$. Итак, в этой системе координат входная поверхность кристалла имеет $z = 0$, ее можно описать прямоугольником по 4-м точкам $(a, , 0)$, $(b, c, 0)$, $(b, d, 0)$, $(a, d, 0)$, она видна и рисуется после падающего пучка, но раньше отраженных. Толщину пластинки можно задать двумя боковыми гранями (a, c, t), $(a, c, 0)$, $(b, c, 0)$, (b, c, t) и (a, c, t), $(a, c, 0)$, $(a, d, 0)$, (a, d, t). Таким образом на это требуется 5 параметров: a, b, c, d, t. Из них a, c, t – должны иметь отрицательные значения.

Падающий пучок имеет направление $\mathbf{k}_0/K = (\cos\theta_0, 0, -\sin\theta_0)$,так что задавая длину вектора над a_0 и под b_0 поверхностью имеем две точки $(a_0\cos\theta_0, 0, -a_0\sin\theta_0)$, $(b_0\cos\theta_0, 0, -b_0\sin\theta_0)$. Нормаль к поверхности имеет направление (0, 0, 1) и длины под a_3 и над b_3. При этом, в соответствии с направлениями векторов для верхних точек длины a_0, b_3 отрицательные Направление отраженных пучков $\mathbf{k}_{1,2}/K = \mathbf{X}_{1,2}\cos\theta_{1,2} + \mathbf{z}\sin\theta_{1,2}$. Если отсчитывать азимутальный угол от оси x к оси y, то сразу получаем по одной точке для каждого отраженного пучка (вторая точка в начале координат)

$$(a_1\cos\theta_1\cos\varphi_1,\ a_1\cos\theta_1\sin\varphi_1,\ a_1\sin\theta_1),\quad (a_2\cos\theta_2\cos\varphi_2,\ a_2\cos\theta_2\sin\varphi_2,\ a_2\sin\theta_2). \tag{3}$$

Осталось определить координаты вектора нормали к плоскости рассеяния. Нормаль можно определить как единичный вектор, параллельный $\mathbf{N} = [\mathbf{k}_0\times\mathbf{k}_1]$, модуль которого равен $K^2\sin 2\theta_1$. Подставляя выражения $\mathbf{k}_0$ и $\mathbf{k}_1$ через $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$, $\mathbf{z}$ и перемножая получаем

$$\mathbf{n} = (\sin 2\theta_1)^{-1}(\mathbf{x}e_x - \mathbf{y}e_y + \mathbf{z}e_z) \tag{4}$$

где

$$e_x = \sin\theta_0\cos\theta_1\sin\varphi_1,\ e_y = \sin\theta_0\cos\theta_1\cos\varphi_1 + \cos\theta_0\sin\theta_1,\ e_z = \cos\theta_0\cos\theta_1\sin\varphi_1 \tag{5}$$

Задавая длину нормали a_4 легко получаем точку.

Итак координаты всех точек вычисляются по заданным длинам и углам, после чего их можно спроектировать на плоскость рисунка и нарисовать. Программа получает на входе длины и углы, а на выходе – рисунок. Сначала рисуются нижние отрезки, затем кристалл и потом верхние отрезки. Для наглядности полезно также изобразить проекции векторов $\mathbf{k}_0$, $\mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_2$ на плоскость поверхности кристалла и проектирующие лучи. Соответственно получаем новые точки

$$(a_0\cos\theta_0,\ 0,\ 0), (a_1\cos\theta_1\cos\varphi_1,\ a_1\cos\theta_1\sin\varphi_1,\ 0), (a_2\cos\theta_2\cos\varphi_2,\ a_2\cos\theta_2\sin\varphi_2,\ 0) \tag{6}$$

В программу **anima3d.acl** задаются углы t0 $= \theta_0$, t1 $= \theta_1$, t2 $= \theta_2$, f1 $= \varphi_1$, f2 $= \varphi_2$, t3 $= \theta_1$ в градусах и длины $a, b, c, d, t, a0, b0, a1, a2, a3, b3, a4$ а также масштабный множитель g, длины задаются так, что $a0, b3, a, c, t < 0$. Углы необходимо вычислять для конкретного кристалла и конкретных индексов дифракции, а также нормали к поверхности. Это лучше всего делать по отдельной программе, см. следующий раздел. Длины могут быть произвольными и задаются просто из соображений лучшей видности картинки. В принципе можно накапливать базу данных входных параметров для различных случаев в отдельном файле и организовать выбор варианта.

3. Геометрические параметры для компланарного случая

В этом разделе получены формулы для расчета углов. Рассмотрим сначала компланарный случай на двух векторах обратной решетки $\mathbf{h}_1$, $\mathbf{h}_2$ и с вектором падающей волны $\mathbf{k}_0 = \alpha\mathbf{h}_1 + \beta\mathbf{h}_2$. Из условий Брэгга получаем систему уравнений

$$\begin{aligned} \alpha h_{11} + \beta h_{12} &= -h_{11}/2 \\ \alpha h_{12} + \beta h_{22} &= -h_{22}/2 \end{aligned} \tag{7}$$

где $h_{ij} = (\mathbf{h}_i \cdot \mathbf{h}_j)$. Решая систему, получаем

$$\alpha = \frac{h_{22}(h_{12} - h_{11})}{2(h_{11}h_{22} - h_{12}^2)}, \quad \beta = \frac{h_{11}(h_{12} - h_{22})}{2(h_{11}h_{22} - h_{12}^2)} \tag{8}$$

Пусть нам также задан единичный вектор нормали к поверхности кристалла, направленный в глубь кристалла $\mathbf{Z}$. Три вектора $\mathbf{k}_0$, $\mathbf{h}_1$, $\mathbf{h}_2$ лежат в одной плоскости, но вектор $\mathbf{Z}$ в общем случае не лежит в этой плоскости. Обозначим единичный вектор $\mathbf{Z} = \mathbf{h}_3 h_{33}^{-1/2}$, то есть выразим его в базисе обратной решетки, пусть и возможно с нецелыми индексами. Очень легко определить углы между волновыми векторами и поверхностью кристалла через скалярное произведение. Сразу получаем

$$\begin{aligned} \sin\theta_0 &= \frac{\mathbf{k}_0\mathbf{Z}}{K} = \frac{\alpha h_{13} + \beta h_{23}}{K h_{33}^{1/2}} = \frac{k_{0h}}{K h_{33}^{1/2}}, \\ \sin\theta_1 &= -\frac{\mathbf{k}_1\mathbf{Z}}{K} = -\frac{(\alpha+1) h_{13} + \beta h_{23}}{K h_{33}^{1/2}} = -\frac{k_{1h}}{K h_{33}^{1/2}}, \\ \sin\theta_2 &= -\frac{\mathbf{k}_2\mathbf{Z}}{K} = -\frac{\alpha h_{13} + (\beta+1) h_{23}}{K h_{33}^{1/2}} = -\frac{k_{2h}}{K h_{33}^{1/2}} \end{aligned} \tag{9}$$

Здесь предполагается в явном виде, что нормаль составляет острый угол с вектором $\mathbf{k}_0$, но тупые углы с векторами $\mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_2$ и введено обозначение $k_{jh} = \mathbf{k}_j\mathbf{h}_3$.

Для расчета азимутальных углов нужно выбрать ось x. Ее удобно выбрать таким образом, чтобы вектор $\mathbf{k}_0$ имел нулевой азимутальный угол, то есть единичный вектор $\mathbf{X}$ был перпендикулярен $\mathbf{Z}$ и $[\mathbf{k}_0 \times \mathbf{Z}]$. Ненормированный вектор

$$\mathbf{X}' = [\mathbf{Z} \times [\mathbf{k}_0 \times \mathbf{Z}]] = \mathbf{k}_0 - \mathbf{Z}(\mathbf{k}_0\mathbf{Z}), \quad (\mathbf{X}'\mathbf{X}')^{1/2} = K\cos\theta_0 \tag{10}$$

Окончательно

$$\mathbf{X} = \frac{\mathbf{k}_0 - \mathbf{h}_3 h_{33}^{-1/2} K \sin\theta_0}{K\cos\theta_0} \tag{11}$$

Тогда азимутальные углы можно определить через скалярные произведения вектора $\mathbf{X}$ и проекций векторов $\mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_2$ на плоскость, перпендикулярную оси z. Фактически можно ввести аналогичные единичные векторы

$$\mathbf{X}_{1,2} = \frac{\mathbf{k}_{1,2} + \mathbf{h}_3 h_{33}^{-1/2} K \sin\theta_{1,2}}{K\cos\theta_{1,2}} \tag{12}$$

Тогда

$$\cos\varphi_{1,2} = (\mathbf{X}\mathbf{X}_{1,2}) = \frac{(\mathbf{k}_0\mathbf{k}_{1,2}) + ((\mathbf{k}_0\mathbf{h}_3)\sin\theta_{1,2} - (\mathbf{k}_{1,2}\mathbf{h}_3)\sin\theta_0) h_{33}^{-1/2} K - K^2 \sin\theta_0 \sin\theta_{1,2}}{K^2\cos\theta_0\cos\theta_{1,2}} \tag{13}$$

Введем дополнительно параметры $k_{ij} = \mathbf{k}_i\mathbf{k}_j$. Тогда имеем

$$\begin{aligned}
\cos\varphi_1 &= \frac{k_{01} + k_{0h} K h_{33}^{-1/2} \sin\theta_1 - k_{1h} K h_{33}^{-1/2} \sin\theta_0 - K^2 \sin\theta_0 \sin\theta_1}{K^2\cos\theta_0\cos\theta_1}, \\
\cos\varphi_2 &= \frac{k_{02} + k_{0h} K h_{33}^{-1/2} \sin\theta_2 - k_{2h} K h_{33}^{-1/2} \sin\theta_0 - K^2 \sin\theta_0 \sin\theta_2}{K^2\cos\theta_0\cos\theta_2}
\end{aligned} \tag{14}$$

При этом

$$\begin{aligned}
k_{01} &= \alpha(\alpha+1)h_{11} + \beta(2\alpha+1)h_{12} + \beta^2 h_{22}, \\
k_{02} &= \alpha^2 h_{11} + \alpha(2\beta+1)h_{12} + \beta(\beta+1)h_{22}, \\
k_{0h} &= \alpha h_{13} + \beta h_{23} \\
k_{1h} &= (\alpha+1)h_{13} + \beta h_{23},, \quad k_{2h} = \alpha h_{13} + (\beta+1)h_{23}
\end{aligned} \tag{15}$$

Формулы для косинусов можно записать в более простой форме, используя выражение k_{jh} через $\sin\theta_j$

$$\cos\varphi_1 = \frac{k_{01} + K^2 \sin\theta_0 \sin\theta_1}{K^2\cos\theta_0\cos\theta_1}, \quad \cos\varphi_2 = \frac{k_{02} + K^2 \sin\theta_0 \sin\theta_2}{K^2\cos\theta_0\cos\theta_2} \tag{16}$$

По условию задачи, все углы θ_j должны быть положительными. Выберем направление отсчета азимутальных углов таким образом, что угол φ_1 всегда был положительным. Что же касается угла φ_2, то косинус не определяет его знак однозначно. Для выбора знака используем формулу для угла между векторами $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$

$$\cos\varphi_k = \frac{k_{12}}{K^2} \tag{17}$$

где

$$k_{12} = \alpha(\alpha+1)h_{11} + [2\alpha\beta + \alpha + \beta + 1]h_{12} + \beta(\beta+1)h_{22} \tag{18}$$

С другой стороны, можно записать

$$\mathbf{k}_1/K = \mathbf{X}_1\cos\theta_1 - \mathbf{Z}\sin\theta_1, \quad \mathbf{k}_2/K = \mathbf{X}_2\cos\theta_2 - \mathbf{Z}\sin\theta_2 \tag{19}$$

и значит
$$\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2/K^2 = \cos\varphi_{12}\cos\theta_1\cos\theta_2 + \sin\theta_1\sin\theta_2 \tag{20}$$
откуда получаем
$$\cos\varphi_k = \sin\theta_1\sin\theta_2 + \cos\theta_1\cos\theta_2\cos\varphi_{12} \tag{21}$$
Здесь $\varphi_{12} = \varphi_1 - \varphi_2$. Это тождество может выполниться только при определенном знаке φ_2 и его можно использовать для выбора знака.

Интересно также определить угол между плоскостью рассеяния и плоскостью поверхности кристалла. В компланарном случае нормаль к плоскости рассеяния можно определить как $\mathbf{N} = [\mathbf{h}_1 \times \mathbf{h}_2]$, а ее модуль равен $(h_{11}h_{22})^{1/2}\sin\varphi$, при том, что $\cos\varphi = h_{12}(h_{11}h_{22})^{-1/2}$. Соответственно искомый угол ψ определяется по формуле
$$\cos\psi = \frac{[\mathbf{h}_1 \times \mathbf{h}_2]\cdot\mathbf{h}_3}{(h_{11}h_{22}h_{33})^{1/2}\sin\varphi} \tag{22}$$
Вычислим вектор
$$\begin{aligned}[\mathbf{h}_1 \times \mathbf{h}_2] &= (h_1k_2 - h_2k_1)[\mathbf{A}\times\mathbf{B}] + (h_1l_2 - h_2l_1)[\mathbf{A}\times\mathbf{C}] + (k_1l_2 - k_2l_1)[\mathbf{B}\times\mathbf{C}] \\ &= (V_h/2\pi)\{(h_1k_2 - h_2k_1)\mathbf{c} - (h_1l_2 - h_2l_1)\mathbf{b} + (k_1l_2 - k_2l_1)\mathbf{a}\} \end{aligned} \tag{23}$$
В результате
$$[\mathbf{h}_1 \times \mathbf{h}_2]\cdot\mathbf{h}_3 = V_hA^{-3}\{l_3(h_1k_2 - h_2k_1) - k_3(h_1l_2 - h_2l_1) + h_3(k_1l_2 - k_2l_1)\} \tag{24}$$
В частном случае гексагональной решетки лангатата (см. ниже)
$$V_h = \frac{(2\pi)^3}{V} = \frac{2(2\pi)^3}{a^2c\sqrt{3}}, \quad A = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}, \quad g = \frac{3a^2}{4c^2} \tag{25}$$
имеем
$$[\mathbf{h}_1 \times \mathbf{h}_2]\cdot\mathbf{h}_3 = (3g/4)^{1/2}\{l_3(h_1k_2 - h_2k_1) - k_3(h_1l_2 - h_2l_1) + h_3(k_1l_2 - k_2l_1)\} \tag{26}$$
и угол ψ может быть вычислен непосредственно. Углы Брэгга равны (для лангатата)
$$\theta_k = \arcsin\left(\frac{\lambda}{a\sqrt{3}}h_{kk}^{1/2}\right) \tag{27}$$

Программа по заданным параметрам выдает рассчитанные значения углов θ_0, θ_1, θ_2, а также φ_1, φ_2, ψ и углы Брэгга θ_1, θ_2.

4. Кристалл лангатата

Расчеты геометрии многоволновой дифракции удобно проводить в системе координат, связанной с обратной решеткой кристалла. Гексагональная кристаллическая решетка может быть описана тремя векторами трансляций **a**, **b**, **c**, причем

$a = b$ и угол между $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$ равен 120°. Вектор $\mathbf{c}$ перпендикулярен $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$, но имеет другую длину. Объем элементарной ячейки равен $V = [\mathbf{a} \times \mathbf{b}] \cdot \mathbf{c} = a^2 c\sqrt{3}/2$. В соответствии с общим правилом векторы трансляции обратной решетки $\mathbf{A} = (2\pi/V)[\mathbf{b}\times\mathbf{c}]$, $\mathbf{B} = (2\pi/V)[\mathbf{c} \times \mathbf{a}]$, $\mathbf{C} = (2\pi/V)[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]$. Легко понять, что вектор $\mathbf{C}$ параллелен $\mathbf{c}$ а его длина $= 2\pi/c$, вектор $\mathbf{A}$ составляет угол 30° с вектором $\mathbf{a}$ в сторону $\mathbf{b}$, а его длина равна $A = 4\pi/(a\sqrt{3})$, вектор $\mathbf{B}$ составляет угол 30° с вектором $\mathbf{b}$ в сторону $\mathbf{a}$, а его длина равна $B = A$. Таким образом, угол между векторами $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$ равен 60°. В результате обратная решетка тоже гексагональная, но повернута относительно прямой решетки на угол 30°.

Условие трехволновой компланарной дифракции можно вывести из теоремы синусов решения треугольников

$$\lambda = \frac{4\pi \sin\varphi}{|\mathbf{h}_1 - \mathbf{h}_2|}, \tag{28}$$

где $\mathbf{h}_1$ и $\mathbf{h}_2$ – два вектора обратной решетки, а φ – угол между ними. Удобно как раз фиксировать разность векторов обратной решетки

$$\mathbf{h}_{12} = \mathbf{h}_1 - \mathbf{h}_2 = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C}, \quad h = h_1 - h_2, \quad k = k_1 - k_2, \quad l = l_1 - l_2 \tag{29}$$

Тогда формулу можно переписать в виде

$$\sin\varphi_0 = \frac{\lambda}{4\pi}[(h^2 + k^2 + hk)A^2 + l^2C^2]^{1/2} = \frac{\lambda}{a\sqrt{3}}[h^2 + k^2 + hk + gl^2]^{1/2}, \quad g = \frac{3a^2}{4c^2} \tag{30}$$

Так как $\sin\varphi_0$ не может быть больше 1, то выписанное условие сразу накладывает ограничение на возможные значения индексов h, k, l. С другой стороны перебирая значения индексов h_2, k_2, l_2 и вычисляя $h_1 = h_2 + h$, $k_1 = k_2 + k$, $l_1 = l_2 + l$ можно вычислить реальное значение $\sin\varphi$ для конкретной комбинации и сравнить его с заданным эталонным значением. Можно стартовать с минимальных значений и реализовать поиск минимума в трехмерном пространстве. Конкретно $a = 8.2285$, $c = 5.1220$.

Конкретное значение $\sin\varphi = (1 - \cos^2\varphi)^{1/2}$, $\cos\varphi = \mathbf{h}_1 \cdot \mathbf{h}_2/(|\mathbf{h}_1|\,|\mathbf{h}_2|)$. В развернутом виде

$$\cos\varphi = \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + (h_1k_2 + h_2k_1)/2 + gl_1l_2}{[h_1^2 + k_1^2 + h_1k_1 + gl_1^2]^{1/2}[h_2^2 + k_2^2 + h_2k_2 + gl_2^2]^{1/2}} \tag{31}$$

Фактически нужно искать минимум квадрата разности

$$f = (\sin\varphi - \sin\varphi_0)^2 \tag{32}$$

Проще всего попробовать перебором в пространстве трех индексов h_2, k_2, l_2 .Есть проблема, если попадаем на нулевой узел. Проще всего проверять на ноль знаменатель перед делением и если да, то ставить единицу для косинуса. Этого должно хватить.

Длины волн: CrKα1 = 2.28970, FeKα1 = 1.936042, CoKα1 = 1.788965, CuKα1 = 1.540562, MoKα1 = 0.709300, AgKα1 = 0.5594075

Программа для поиска вариантов имеет входные данные в виде: a, c, λ, h, k, l. Удобно как раз стартовать с нулевых индексов h_2, k_2, l_2 и для них даже не вычислять f. Чтобы не мучаться с алгоритмом зададим 6 троек индексов $\mathbf{d}_i$ = (1,0,0),(-1,0,0),(0,1,0),(0,-1,0),(0,0,1),(0,0,-1) и будем поочередно прибавлять их к текущему значению вектора (h_2, k_2, l_2), то есть работать будем с вектором (h_3, k_3, l_3) = (h_2, k_2, l_2) + $\mathbf{d}_i$. Получаем 6 значений f_i. Затем определяем значение индекса с минимальным f и изменяем текущее значение вектора (h_2, k_2, l_2) . Уже на втором шаге нулевые индексы снова появятся, но это будем обрабатывать. Программа останавливается если улучшения нет. Для этого надо запоминать предыдущее значение f. А сначала его можно просто задать как 5.

После того, как найдены значения индексов (h_1, k_1, l_1) и (h_2, k_2, l_2) соответствующие компланарному случаю, необходимо найти волновой вектор $\mathbf{k}_0$, который точно удовлетворяет этим индексам. Заодно можно проверить – какой длине волны он соответствует. Положим $\mathbf{k}_0 = \alpha\mathbf{h}_1 + \beta\mathbf{h}_2$, где α и β вычислены в предыдущем разделе. Соответственно квадрат $k_0^2 = \alpha^2 h_{11} + \beta^2 h_{22} + 2\alpha\beta h_{12}$, длина волны $\lambda = 2\pi/k_0$. Выбирая в обратной решетке единицу измерения $A = 4\pi/(a\sqrt{3})$ имеем

$$\begin{aligned} h_{11} &= h_1^2 + k_1^2 + h_1 k_1 + g l_1^2, \\ h_{22} &= h_2^2 + k_2^2 + h_2 k_2 + g l_2^2, \\ h_{12} &= h_1 h_2 + k_1 k_2 + (h_1 k_2 + h_2 k_1)/2 + g l_1 l_2 \end{aligned} \tag{33}$$

Соответственно, вычисляя k_0 в единицах A, окончательно имеем

$$\lambda = \frac{a\sqrt{3}}{2k_0}, \quad k_0 = K = \frac{a\sqrt{3}}{2\lambda} \tag{34}$$

Формулы разделов 3 и 4 легли в основу программы **langatat-coplanar-geom.acl**.

5. Геометрические параметры для некомпланарного случая

В общем случае некомпланарной дифракции может быть использован такой же подход, как и в компланарном случае, только вектор падающей волны имеет чуть более сложное выражение $\mathbf{k}_0 = \alpha\mathbf{h}_1 + \beta\mathbf{h}_2 + w h_{11}^{1/2}\mathbf{e}_N$, где $\mathbf{e}_N$ – единичный вектор в направлении $\mathbf{N}$ =$[\mathbf{h}_1 \times \mathbf{h}_2]$, а параметр w безразмерный аналогично α и β. Соответственно имеем $\mathbf{e}_N\mathbf{Z} = \cos\psi$, где ψ – угол между $\mathbf{e}_N$ и $\mathbf{Z}$ (см. формулу (22)), и формулы для углов θ_i становятся чуть посложнее, а именно

$$\begin{aligned} \sin\theta_0 &= \frac{\mathbf{k}_0\mathbf{Z}}{K} = \frac{\alpha h_{13} + \beta h_{23}}{K h_{33}^{1/2}} + w h_{11}^{1/2}\cos\psi, \\ \sin\theta_1 &= -\frac{\mathbf{k}_1\mathbf{Z}}{K} = -\frac{(\alpha+1) h_{13} + \beta h_{23}}{K h_{33}^{1/2}} - w h_{11}^{1/2}\cos\psi, \\ \sin\theta_2 &= -\frac{\mathbf{k}_2\mathbf{Z}}{K} = -\frac{\alpha h_{13} + (\beta+1) h_{23}}{K h_{33}^{1/2}} - w h_{11}^{1/2}\cos\psi \end{aligned} \tag{35}$$

Вообще говоря, параметр w может быть как положительным, так и отрицательным, что просто приводит к двум вариантам геометрии. Если нормаль к поверхности кристалла находится в плоскости векторов обратной решетки, то $\cos\psi = 0$ и ситуация упрощается. Очень часто в некомпланарном случае вектор $\mathbf{Z}$ антипараллелен вектору $\mathbf{h}_1$ и имеет место как раз такой случай. Значения параметров α и β определяются по формулам (8), а параметр w находится из заданной длины вектора $\mathbf{k}_0$, то есть $K = 2\pi/\lambda$.

$$w = \pm h_{11}^{-1/2}\left(K^2 - \alpha^2 h_{11} - \beta^2 h_{22} - 2\alpha\beta h_{12}\right)^{1/2} \tag{36}$$

Методом довольно сложных прямых вычислений можно показать, что

$$\alpha^2 h_{11} + \beta^2 h_{22} + 2\alpha\beta h_{12} = \frac{h_{11}h_{22}(h_{11}h_{22} - 2h_{12}^2)}{4(h_{11}h_{22} - h_{12}^2)} \tag{37}$$

Расчет азимутальных углов можно проводить по той же схеме, что и выше. Фактически ответ получается сразу по формуле (16) через скалярное произведение между векторами. Эту формулу можно получить непосредственно и более простым способом, чем тот, который указан выше. Запишем все векторы $\mathbf{k}_j$, $j = 0, 1, 2$ в виде

$$\mathbf{k}_j = \mathbf{a}_j + \mathbf{b}_j, \quad a_j = K\cos\theta_j, \quad b_j = K\sin\theta_j \tag{38}$$

Здесь вектор $\mathbf{a}_j$ – представляет собой проекцию вектора $\mathbf{k}_j$ на поверхность кристалла, а вектор $\mathbf{b}_j$ наоборот перпендикулярен поверхности кристалла. Тогда сразу получаем

$$k_{ij} = \mathbf{k}_i\mathbf{k}_j = \mathbf{a}_i\mathbf{a}_j + \mathbf{b}_i\mathbf{b}_j = K^2\cos\theta_i\cos\theta_j\cos\varphi_{ij} + s_{ij}K^2\sin\theta_i\sin\theta_j \tag{39}$$

где $\varphi_{ij} = \varphi_j - \varphi_i$ угол между векторами $\mathbf{a}_i$ и $\mathbf{a}_j$, $\varphi_j = \varphi_{0j}$, а знаковый множитель учитывает параллельность или антипараллельность векторов $\mathbf{b}_i$ и $\mathbf{b}_j$. Так $s_{01} = s_{02} = -1$, $s_{12} = 1$. Косинус не определяет знак угла φ. Можно всегда выбрать $\varphi_1 > 0$, а знак φ_2 определять из условия $\varphi_{12} = \varphi_2 - \varphi_1$ Это условие в каком-то смысле произвольное, но в принципе можно проверять оба варианта.

Рассмотрим простой частный случай кубического кристалла. Тогда векторы $\mathbf{h}_1$, $\mathbf{h}_2$, $\mathbf{h}_3$ задаются своими индексами Миллера в единицах $(2\pi/a)$, где a – постоянная решетки, все скалярные произведения легко вычисляются. Угол ψ находится через косинус по формуле

$$\cos\psi = \frac{l_3(h_1k_2 - h_2k_1) - k_3(h_1l_2 - h_2l_1) + h_3(k_1l_2 - k_2l_1)}{(h_{11}h_{22}h_{33})^{1/2}\sin\varphi}, \quad \cos\varphi = \frac{h_{12}}{(h_{11}h_{22})^{1/2}}$$

Затем вычисляются параметры α и β по формулам (8) и w по формуле (36), после чего можно сразу вычислить углы θ_j. Для вычисления азимутальных углов нужно вычислить скалярные произведения волновых векторов по формулам

$$\begin{aligned}
k_{01} &= \alpha(\alpha+1)h_{11} + \beta^2 h_{22} + \beta(2\alpha+1)h_{12} + w^2 h_{11},\\
k_{02} &= \alpha^2 h_{11} + \alpha(2\beta+1)h_{12} + \beta(\beta+1)h_{22} + w^2 h_{11},\\
k_{12} &= \alpha(\alpha+1)h_{11} + [2\alpha\beta + \alpha + \beta + 1]h_{12} + \beta(\beta+1)h_{22} + w^2 h_{11}
\end{aligned}$$

Углы Брэгга вычисляются обычным образом $\theta_{Bj} = \arcsin(h_{jj}^{1/2}/2K)$. Во всех формулах нужно использовать $K = a/\lambda$. Эти формулы использованы в программе **cubic-general-geom.acl**.

6. Обобщение на 4-х волновой случай

В 4-х волновом случае появляется дополнительный вектор обратной решетки, который приходится назвать $\mathbf{h}_4$ поскольку вектор $\mathbf{h}_3$ занят под нормаль. Возникающую путаницу надо будет потом исправить переписав все формулы, а пока оставим так. При этом $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}_4$. Соответственно

$$\sin\theta_3 = \frac{\mathbf{k}_3\mathbf{Z}}{K} = \frac{\alpha h_{13} + \beta h_{23} + h_{43}}{K h_{33}^{1/2}} + w h_{11}^{1/2}\cos\psi$$

Здесь явно учитываем, что $\mathbf{k}_3$ параллелен $\mathbf{k}_0$. Формула для φ_3 получается из (16)

$$\cos\varphi_3 = \frac{k_{03} - K^2\sin\theta_0\sin\theta_3}{K^2\cos\theta_0\cos\theta_3}$$

При этом

$$\begin{aligned} k_{03} &= \alpha^2 h_{11} + 2\alpha\beta h_{12} + \beta^2 h_{22} + w^2 h_{11} + \alpha h_{14} + \beta h_{24} \\ k_{13} &= \alpha(\alpha+1)h_{11} + (2\alpha+1)\beta h_{12} + \beta^2 h_{22} + w^2 h_{11} + (\alpha+1)h_{14} + \beta h_{24} \end{aligned}$$

Соответственно

$$\cos(\varphi_3 - \varphi_1) = \frac{k_{13} + K^2\sin\theta_1\sin\theta_3}{K^2\cos\theta_1\cos\theta_3}$$

Знак учитывает, что реально углы θ_1 и θ_3 имеют разные знаки. Если это не так, то знак надо менять.