

GIORGIO MAGNANO*

UNA SEMPLICE RELAZIONE FRA GLI ANGOLI DI LAUE E DI BRAGG

RIASSUNTO. — Riferendosi al principio che tutti i segmenti reticolari delimitati da due piani paralleli sono equivalenti tra loro agli effetti metrico-interferenziali, viene dedotta la seguente relazione geometrica fra gli angoli σ' e σ di Laue e ϑ di Bragg:

$$(\cos \sigma' - \cos \sigma) / 2 \sin \vartheta = \sin [uvw] \wedge (hkl),$$

dove $[uvw]$ è qualunque filare diffrangente associato ai piani riflettenti (hkl) .

ABSTRACT. — Relating to the principle that every lattice segment delimited by two parallel planes is equivalent as regarding the metric-interferential effects, the following geometrical relationship between Laue's angles (named σ' and σ) and Bragg's angle, ϑ , is derived:

$$(\cos \sigma' - \cos \sigma) / 2 \sin \vartheta = \sin [uvw] \wedge (hkl),$$

where $[uvw]$ is any row of scattering centres associated with the (hkl) reflecting planes.

In una recente Nota (CAVINATO A. e MAGNANO G., 1979) è stato illustrato il principio di equivalenza tra segmenti reticolari, in base al quale « i segmenti reticolari delimitati da due piani paralleli sono equivalenti tra loro agli effetti metrico-interferenziali e possono vicendevolmente sostituirsi »; ossia

$$(1) \quad s_{hkl} (\cos \sigma' - \cos \sigma) = 2d_{hkl} \sin \vartheta = \Delta,$$

dove s_{hkl} è qualunque segmento reticolare delimitato da piani paralleli (hkl) , da considerare per opportunità adiacenti, la cui distanza è d_{hkl} , e σ e σ' sono gli angoli di s_{hkl} rispettivamente con i e con r , direzioni d'incidenza e di possibile diffrazione di raggi X a lunghezza d'onda λ , simmetriche rispetto ai piani (hkl) e formanti con questi l'angolo ϑ (fig. 1). Se nella direzione r l'intero reticolo diffrange in concordanza di fase, ϑ è un angolo di Bragg e sussistono le condizioni: $\Delta = n\lambda$, $d_{hkl} \geq \lambda/2$.

Il principio di equivalenza permette dunque di correlare tra loro, in termini di diffrazione, tutti i segmenti reticolari compresi fra due piani paralleli riflettenti (ma conserva il suo significato anche per valori di ϑ che non soddisfano l'equazione di Bragg). Ai fini dell'applicazione geometrica che qui ne vien fatta, è indifferente che un certo segmento s_{hkl} abbia entrambi gli estremi in posizione nodale, come nel caso della figura, oppure uno solo: la distinzione fra i segmenti del primo

* Istituto di Giacimenti minerali e Geologia applicata del Politecnico di Torino.

e del secondo tipo ha invece rilevanza quando si vogliono confrontare gli ordini di diffrazione dei rispettivi filari.

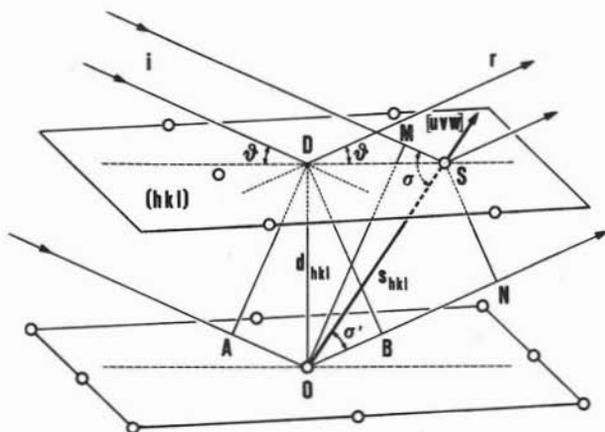


Fig. 1. — Proiezione clinografica atipica di un reticolo triclino, ruotato intorno a OD , normale ai piani $(hk\bar{l})$, di un angolo δ tale da portare il segmento OS nel piano di proiezione ir . In questo modo le proiezioni ortogonali di OS e OD su i e r non subiscono deformazione prospettica e dalle loro misure grafiche risulta direttamente: $ON - SM = AO + OB$.

Dalla (1), valida per il reticolo triclino e quindi per tutti i reticoli, si ricava la relazione generale

$$(2) \quad \frac{\cos \sigma' - \cos \sigma}{2 \sin \theta} = \sin [uvw]^{\wedge} (hk\bar{l}),$$

dove u, v, w sono gli indici del filare a cui appartiene il segmento reticolare s_{hkl} . Per s_{hkl} crescente e tendente a infinito, il rapporto $d_{hkl}/s_{hkl} = \sin [uvw]^{\wedge} (hk\bar{l})$ tende a zero, e al limite $[uvw]$ giace su $(hk\bar{l})$.

In particolare, quando il filare considerato è un asse di riferimento del reticolo, σ' e σ sono gli angoli della corrispondente equazione di Laue. Ne consegue che, data una terna di equazioni di Laue, per mezzo delle quali è individuata una famiglia di piani riflettenti $(hk\bar{l})$, potremo scrivere, effettuate le sostituzioni nella (2):

$$(3) \quad \begin{aligned} \frac{\cos \alpha' - \cos \alpha}{2 \sin \theta} &= \sin [100]^{\wedge} (hk\bar{l}), \\ \frac{\cos \beta' - \cos \beta}{2 \sin \theta} &= \sin [010]^{\wedge} (hk\bar{l}), \\ \frac{\cos \gamma' - \cos \gamma}{2 \sin \theta} &= \sin [001]^{\wedge} (hk\bar{l}). \end{aligned}$$

È quasi superfluo osservare che i secondi membri delle (3) equivalgono ai coseni direttori della normale a $(hk\bar{l})$.

Confrontando le relazioni (2) e (3) con la (1), risulta evidente che mentre gli angoli ϑ, σ' e σ (ovvero α' e α , ecc.) variano con Δ , in relazione con i para-

metri rappresentativi della discontinuità reticolare, il rapporto adimensionale $(\cos \sigma' - \cos \sigma) / 2 \sin \vartheta$ non è funzione di λ e di n , ma è una costante che dipende soltanto dalla scelta degli assi e dei piani considerati, cioè dalla geometria del cristallo.

In conclusione si può affermare che, data una coppia filare-piano reticolare, per qualsiasi valore di λ e per tutti gli ordini di riflessione possibili il rapporto fra $\cos \sigma' - \cos \sigma$ (angoli di Laue) e $2 \sin \vartheta$ (angolo di Bragg) è costante ed uguale al seno dell'angolo tra il filare diffrangente ed il piano riflettente.

Nella Tabella che segue sono esposti i dati numerici relativi a un esempio concreto, calcolati al solo scopo di presentare una semplice documentazione di tipo didascalico.

TABELLA 1

Salgemma - Verifica della relazione $(\cos \sigma' - \cos \sigma) / 2 \sin \vartheta = \sin [uvw]^{(hkl)}$, applicata ai filari con indici più semplici, in coincidenza dei riflessi 002 e 004 di cristallo rotante intorno a $[100]$, per $\lambda = 1,5418 \text{ \AA}$ ($\vartheta_1 = 15,86665^\circ$, $\vartheta_2 = 33,14766^\circ$)

FILARI DIFFRANGENTI [uvw]	RIFLESSO 002		RIFLESSO 004		$\cos \sigma'_{1,2} - \cos \sigma_{1,2}$ $2 \sin \vartheta_{1,2}$	$\sin [uvw]^{(001)}$
	σ'_1	σ_1	σ'_2	σ_2		
[100]	90,00000°	90,00000°	90,00000°	90,00000°	0	0
[010]	15,86665	15,86665	33,14766	33,14766	0	0
[110], $[\bar{1}10]$	47,14335	47,14335	53,69844	53,69844	0	0
[111], $[\bar{1}\bar{1}1]$	44,50406	66,57762	36,95680	80,34586	0,57735	0,57735
[1 $\bar{1}$ 1], $[\bar{1}\bar{1}1]$	113,42238	135,49594	99,65414	143,04320	0,57735	0,57735
[101], $[\bar{1}01]$	78,85325	101,14675	67,25409	112,74591	0,70711	0,70711
[011]	29,13335	60,86665	11,85234	78,14766	0,70711	0,70711
[0 $\bar{1}$ 1]	119,13335	150,86665	101,85234	168,14766	0,70711	0,70711
[001]	74,13335	105,86665	56,85234	123,14766	1,00000	1

Per calcolare gli angoli $\sigma_{1,2}$ e $\sigma'_{1,2}$ su riportati, i raggi X incidenti e riflessi su (001) sono stati indicizzati come assi $[0 \ 1 \ \mp \tan \vartheta_{1,2}]$. Arbitraria la scelta di λ .

Contestualmente a quanto precede si deduce inoltre che, fuori del discontinuo, la (2) è applicabile anche nel caso della riflessione della luce su qualunque faccia di un cristallo, essendo ϑ il complemento dell'angolo d'incidenza e σ e σ' gli angoli formati rispettivamente dal raggio incidente e dal raggio riflesso con uno spigolo.

BIBLIOGRAFIA

- CAVINATO A., MAGNANO G. (1979) - Principio di equivalenza tra segmenti reticolari agli effetti metrico-interferenziali. Rend. Acc. Naz. Lincei, ser. 8, 66, 429-434.