

Laue 회절에 관한 Bernalte식의 재고찰

윤형근 · 박영한
단국대학교 물리학과

Alternative Derivation of Bernalte's Equation on the Laue Diffractions

Hyung-Guen Yoon and Young-Han Park

Department of Physics, Dankook University, Cheonan 330-714, Korea

요 약

결정면 법선의 각좌표와 Laue 회절 반점의 각좌표 사이의 관계를 나타내는 기존의 기하도형을 개선하였다. 그래서 Greninger와 Leonhardt charts에서의 선들에 대한 Bernalte의 대수방정식을 보다 더 직관적으로 그리고 보다 더 명료하게 도출하였다.

Abstract

The well-known geometries showing the relation between the angular coordinates of a plane normal and a Laue diffraction spot have been improved. The Bernalte's algebraic equations for the lines in the Greninger and Leonhardt charts have been alternatively derived in more intuitive and perspicuous ways than his original derivation.

1. 서 론

단결정의 방위를 정하는 X-선 회절방법에서, Greninger chart¹⁾는 배면반사 Laue 방법을 위해, Leonhardt chart^{2,3)}는 전면반사(투과) Laue 방법을 위해, 그리고 최근에 우리가 발표한 Park chart⁴⁾는 측면반사를 위해 이용된다. 대부분의 X-선 회절교재들은 Greninger와 Leonhardt chart들의 의미와 사용에 대해서 잘 설명하고 있다. 그런데 Bernalte는, 특히 Greninger chart에 대하여, 그 chart의 곡선의 기하학적 성질(특성)에 관한 언급이 불완전하거나⁵⁻⁷⁾ 또는 잘못되었다고⁸⁻¹⁰⁾ 지적했다.¹¹⁾ 그래서, 그는 두 chart에 선들에 대한 대수 방정식을 도출했다. 그러나 그가 대수방정식을 도출하기 위해 사용한 기하도형이 직관적 이해에 편리하지 못하다. 그래서 이 논문에서는 새로운 도형과 변형된 도형들을 이용하여 Bernalte식을 도출하므로써 그의 대수

방정식을 보다 쉽게 그리고 정확하게 이해하고, 또한 잘못된 chart를 이용하는 위험에서 벗어나 직접 chart를 제작해서 결정방위 해석에 정확을 기할 수 있게 하고자 한다.

2. 이 론

2-1. Greninger chart

배면반사 Laue 회절을 설명하기 위해 Fig. 1을 만들었다. 이 그림에서 $\sigma < 45^\circ$ 이면 배면반사이고, $\sigma > 45^\circ$ 이면 전진반사(투과)이다. 결정 C의 결정면 법선을 \overline{CN} 이라고 하면, 그 면 법선의 각좌표 γ 는 경도, δ 는 위도이며, σ 는 입사선 \overline{OC} 가 면 법선과 만드는 각이다. 면법선이 필름과 만나는 점의 좌표는 (x_N, y_N) 이고 결정면에 의한 회절선(또는 반사선)이 필름과 만나는 점의 좌표는 (x, y) 이다. Fig. 1에서 닳은 삼각형의 대응하는 변의 비가 서로 같다는 관

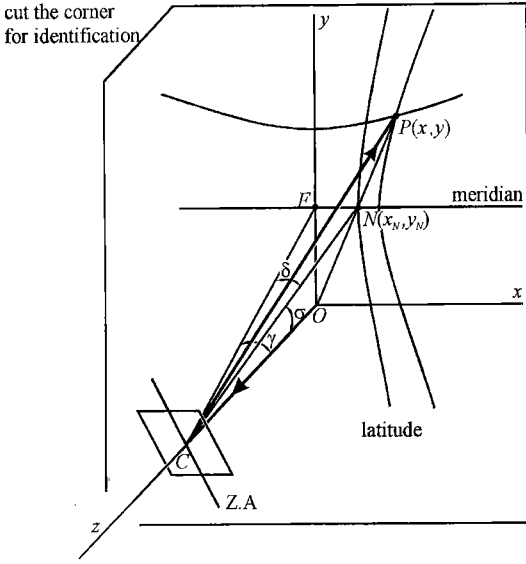


Fig. 1. Relation between the film coordinates of a back-reflection Laue spot x and y , and the angular coordinates of the plane-normal γ and δ .

계를 이용하면

$$\frac{\overline{OP}}{\overline{ON}} = \frac{x}{x_N} = \frac{y}{y_N} \quad (1)$$

Greninger chart에 곡선에 관한 Bernalte의 대수방정식을 도출하기 위해 Fig. 1의 입사면을 Fig. 2와 같이 고안하였다.

Fig. 2에서 점 V 는 N 에서 \overline{CP} 에 내린 수선이 그 선분과 만나는 점, 점 O'' 와 N'' 는 $\overline{O''N''} = \overline{CO}$ 그리고 $\overline{O''N''} // \overline{OP}$ 이 되도록 선택한 점들, 점 P' 는 $\overline{O''N''}$ 의 연장선과 \overline{CP} 의 연장선의 교점, 점 V' 는 점 N'' 에서 $\overline{CP'}$ 에 내린 수선이 그 선분과 만나는 점, N' 는 반사면의 법선이 그리고 O' 는 입사선, 전진 반사 필름과 만나는 점들이다. 이 그림에서 $\overline{O''N''} = \overline{N''V'}$ 이고 $\overline{O''N''} = \overline{CO}$ 이므로 $\overline{N''V'} = \overline{CO}$. 또한 각 $\angle N''P'V' = \angle CPO$ 이므로 삼각형 $\triangle N''P'V' \equiv \triangle CPO$ 이다. 따라서 $\overline{N''P'} = \overline{CP}$ 이다. 즉

$$\begin{aligned} \overline{CO} &= \overline{O''N''} \\ \overline{N''P'} &= \overline{CP} \end{aligned}$$

이므로, 식 (1)은

$$\frac{\overline{OP}}{\overline{ON}} = \frac{\overline{O''N''}}{\overline{O''N''}} = \frac{\overline{CO} + \overline{CP}}{\overline{CO}} \quad (2)$$

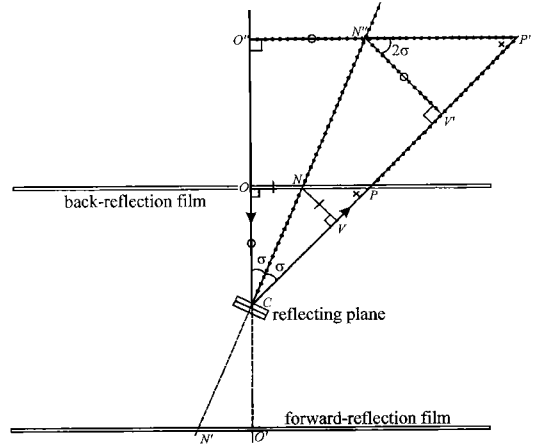


Fig. 2. The plane of incidence showing a back-reflection Laue spot geometry.

가 된다. 결정-필름 사이의 거리를 $\overline{CO} = \overline{CO'} = D$ 라고 놓으면, Fig. 1에서 $\overline{CP} = [\overline{CO}^2 + (x^2 + y^2)]^{1/2}$ 이므로, 이것과 식 (1) 및 (2)를 연결하여

$$\frac{\overline{OP}}{\overline{ON}} = \frac{x}{x_N} = \frac{y}{y_N} = \frac{D + [D^2 + (x^2 + y^2)]^{1/2}}{D} \quad (3)$$

를 얻는다. Fig. 1에서 동일 zone에 속하는 결정면들의 면법선중, 면법선 \overline{CF} 의 경도를 γ 라고 하면 경도선은

$$y_N = D \tan \gamma. \quad (4)$$

따라서 식 (3)과 (4)로부터, 동일 경선상에 결정면 법선들이 놓이는(즉, 동일 zone에 속하는) 결정면들의 배면반사점들은 식

$$x^2 + (1 - \cot^2 \gamma)y^2 + 2Dy \cot \gamma = 0 \quad (5)$$

로 표현되는 곡선상에 놓인다. 이식은 배면반사의 경도선 각좌표를 나타낸다. 또한 Fig. 1에서 면법선 \overline{CN} 의 위도를 δ 라고 하면 위도선에 대해

$$(x_N \cot \delta)^2 = D^2 + y_N^2 \quad (6)$$

이 성립한다. 따라서 식 (3)과 (6)으로부터

$$x_N^2 = D^2 / (\cot^2 \delta - y^2 / x^2) \quad (7)$$

또한 식(3)으로부터

$$\left(\frac{x}{x_N} \right)^2 = \left\{ \frac{D + [D^2 + (x^2 + y^2)]^{1/2}}{D} \right\}^2 \quad (8)$$

또는

$$\left\{ \left(\frac{x}{x_N} \right)^2 - \frac{[D^2 + (x^2 + y^2)]}{D^2} - 1 \right\}^2 = \frac{4[D^2 + (x^2 + y^2)]}{D^2} \quad (9)$$

이므로, 식 (7)과 (9)로부터 동일 위도상에 결정면 법선들이 놓이는 결정면들의 반사점들은 식

$$[y^2 - \frac{1}{2}(\cot^2\delta - 1)x^2]^2 + D^2[y^2 - x^2 \cot^2\delta] = 0 \quad (10)$$

로 표현되는 곡선상에 놓인다.

결론적으로 식 (5)를 이용하여 경도선 각좌표를 나타내는 곡선을, 그리고 식 (10)을 이용하여 위도선 각좌표를 나타내는 곡선을 그리면 Greninger chart가 완성된다.

2-2. Leonhardt chart

Leonhardt chart의 곡선에 관한 Bernalte대수 방정식을 도출하기 위해 Fig. 3과 4를 고안하였다. Fig. 3에서 C는 시료결정, CN은 반사면의 법선, CF는 면 법선이 y-z면 내에 놓이며 CN의 반사면과 동일 zone에 속하는 또다른 반사면의 법선, OC는 입사선, CP는 반사선, N'는 반사면의 법선이 전진반사 Laue 필름과 만나는 점, ϕ_m 은 Z.A.와 입사선의 사이각, γ 는 CO와 CN'의 사이각이다. 이 그림에 입사면 만들 때 그리면 Fig. 4와 같다. 이 그림에서 B는 반사면의 연장선이 전진반사 필름과 만나는 점이고 V''는 점 B에서 반사선 CP에 내린 수선의 교점이다. Fig. 3과 4로부터 점 N'의 좌표 ($x_{N'}$, $y_{N'}$)와 점 P의 좌표 (x , y)의 부호가 서로 다르며,

$$\frac{x}{x_{N'}} = \frac{y}{y_{N'}} = - \frac{O'P}{O'N'} \quad (11)$$

$$y_{N'} = D \tan\gamma \quad (11a)$$

$$x_{N'}^2 = \frac{D^2}{\cot^2\delta - y^2/x^2} \quad (11b)$$

Fig. 4에서 $\triangle CN'O'$ 와 $\triangle CO'B$ 는 닮은 삼각형이고, $\triangle CO'P$ 와 $\triangle BV''P$ 도 닮은 삼각형이므로

$$\frac{O'N'}{O'P} \cdot \frac{CO'}{CO'} = \frac{CO'}{O'B} \cdot \frac{O'P}{O'B}, \quad (12)$$

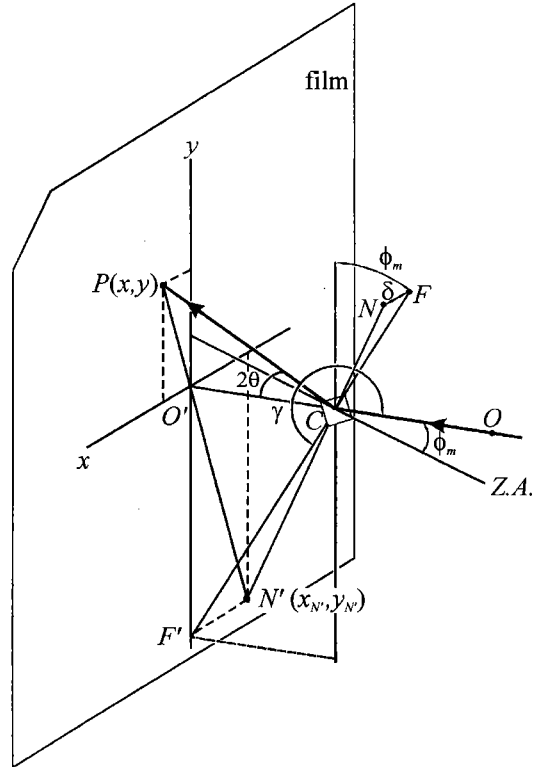


Fig. 3. Relation between the plane normal orientation and the diffraction spot position in the forward-reflection Laue method.

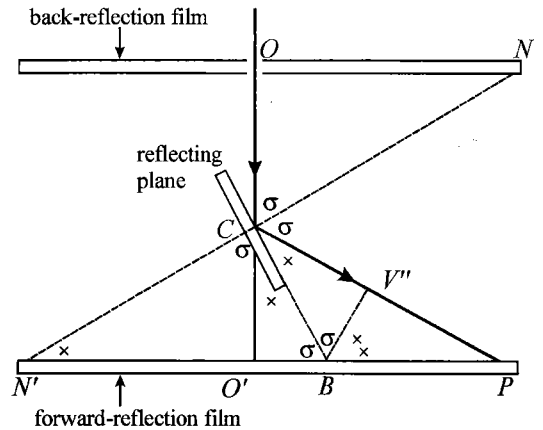


Fig. 4. The plane of incidence showing a forward-reflection Laue geometry.

이다. 결정-필름 사이의 거리는 $CO' \equiv D$ 이고, $\sqrt{V''P} = [D^2 + (x^2 + y^2)]^{1/2} - D$ 이므로 식 (12)는

$$\frac{O'N'}{O'P} = \frac{CO'^2}{O'B} = \frac{D^2}{O'B},$$

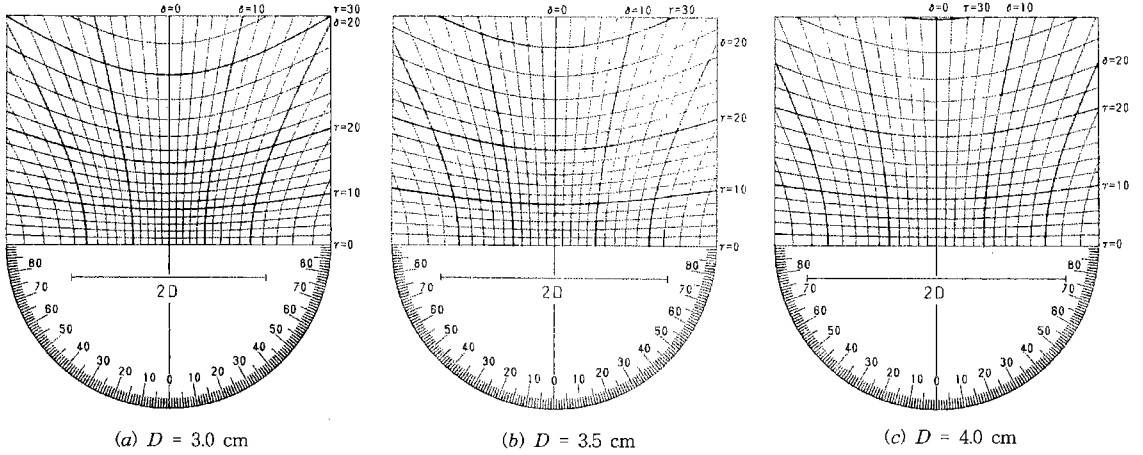


Fig. 5. The Greninger charts. $D=3.0, 3.5, 4.0$ cm.

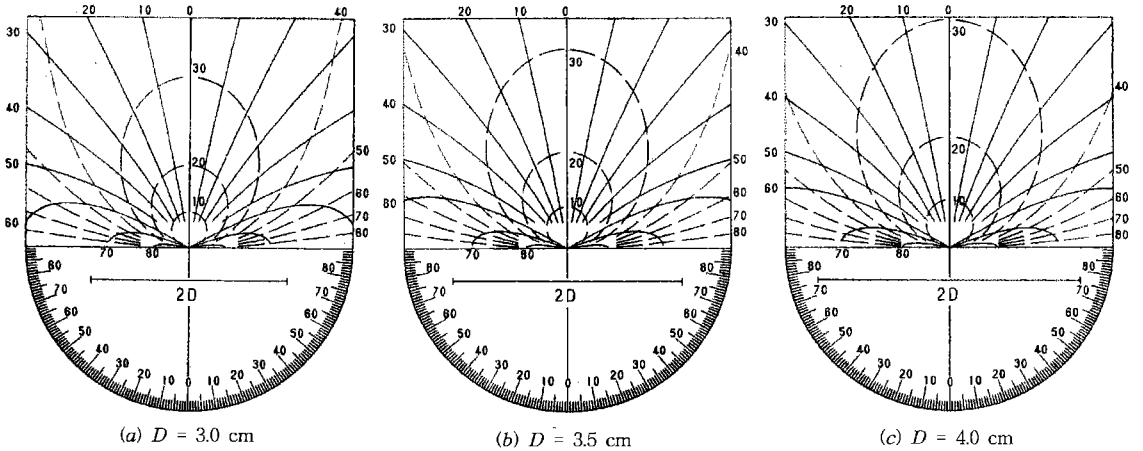


Fig. 6. The Leonhardt charts. $D=3.0, 3.5, 4.0$ cm. The dashed lines are of constant ϕ_m , and the solid lines are of constant δ .

$$\frac{\overline{OP}}{\overline{OB'}} = \frac{\overline{CO'} \times \overline{V''P}}{\overline{OB'}} = \frac{D[(D^2+x^2+y^2)^{1/2}-D]}{\overline{OB}} \quad (13)$$

식 (11)과 (13)으로부터

$$\frac{x}{x_{N'}} = \frac{y}{y_{N'}} = \frac{D - (D^2+x^2+y^2)^{1/2}}{D} \quad (14)$$

또한 경도선은 식 (11a)와 위도선은 식 (11b)으로 표현된다. 따라서 전진반사에서 동일 zone에 속하는 결정면들의 회절반점들의 위치곡선은 식 (11)과 (14)를 써서 식 (5)와 동일한 식을 얻는다. Fig. 3에서 $\gamma=3\pi/2 - \phi_m$ 이므로 식 (5)는

$$x^2+y^2(1-\tan^2\phi_m)+2yD \tan\phi_m=0 \quad (15)$$

가 된다.

결정면들의 법선들이 동일 위도상에 놓이는 결정면들의 회절반점들의 위치곡선은 식 (11b)와 (14)로부터 식 (10)과 동일한 식을 얻는다.

3. 결 론

Fig. 1과 2에서 $\sigma < 45^\circ$ 이면 배면반사이다. 또한, Fig. 4에서 $\sigma > 45^\circ$ 이면 전진반사이다.

두 종류의 반사 모두에 대해서 결정면 법선의 한 경도선 위치와 한 위도선 위치에 대한 회절반점의 위치는 식 (5)와 (10)으로 표현되는 곡선의 교점이다.

Fig. 5는 경도범위 $0^\circ < \gamma < 30^\circ$, 위도범위 $-30^\circ < \delta < 30^\circ$, 시료-필름 사이의 거리 $D=3, 3.5, 4, 5$ cm에 대한 Greninger chart를 그린 것이다.

Fig. 6은, 경도범위 $10^\circ < \phi_m < 90^\circ$, 위도범위 $-80^\circ < \delta < 80^\circ$, 시료-필름 사이의 거리 $D=3.0, 3.5, 4.0$ cm에 대한 Leonhardt chart를 그린 것이다.

우리는 Bernalte 그림을 개선해서 기하도형을 보다 직관적으로 이해하기 쉽게 했다. 따라서, Greninger 및 Leonhardt charts에 곡선에 관한 대수방정식 도출과정을 쉽게 이해할 수 있게 했다. 나아가서 Bernalte식을 정확하게 이해하므로서 정교하게 제작된 chart가 없을 때, 그리고 결정(시료)-필름 사이의 거리의 자유로운 선택에 대응하기 위하여 식 (5), 식 (10) 및 식 (15)를 사용하여 작도한 $D=3.0, 3.5, 4.0$ cm에 대한 chart를 Fig. 5와 6에 실었다.

감사의 글

이 연구는 단국대학교 '99 대학연구비로 수행되었습니다.

참고문헌

- 1) Greninger, A. B., *Z. Kristallogr.*, **91**, 424 (1935).
- 2) Leonhardt, J., *Z. Kristallogr.*, **61**, 100 (1924).
- 3) Dunn, C. G. and Martin, W. W., *Trans. AIME*, **185**, 417 (1949).
- 4) Park, Y. H., Yeom, H. Y., Yoon, H. G. and Kim, K. W., *J. Appl. Crystall.*, **30**, 456 (1997).
- 5) Barrett, C. S., *Structure of Metals*, 2nd ed., McGraw-Hill, New York (1952).
- 6) Guinier, A., *Théorie et technique de la radioe-rystallographie*, 2nd ed., Dumond, Paris (1956).
- 7) Wood, E. A., *Crystal Orientation Manual*, Columbia Press, New York (1963).
- 8) Terpstra, P. and Codd, L. W., *Crystallography*, Academic Press, New York (1961).
- 9) Cullity, B. D., *Elements of X-ray Diffraction*, Addison-Wesley, London (1956).
- 10) *International Tables for X-ray Crystallography*, Vol. II, Kynoch Press, Birmingham (1959).
- 11) Bernalte, A., *Acta Crystallogr.*, **19**, 916 (1965).