

УДК 669.782:539.78

Д.А.Коротков (5 курс, каф. ФМиКТМ), А.Е.Калабушкин, асс.

## ОБ ИЗМЕРЕНИИ ОРИЕНТАЦИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ МЕТОДОМ ЛДР НА ПРИМЕРЕ КРИСТАЛЛА *NaCl*

Для корректной постановки физических экспериментов по изучению особенностей рекристаллизации требуется полная кристаллогеометрическая аттестация зерен и границ между ними. Для выполнения этих и подобных им исследований в последнее десятилетие широко используется метод тонкого пучка рентгеновских лучей, названный локальной рентгеновской дифрактометрией (ЛРД) [1].

ЛРД – набор методик, применяемый при регистрации брегговской дифракции от кристаллического образца и позволяющий проводить прецизионные угловые измерения положения нормалей к отражающим плоскостям с заданным межплоскостным расстоянием.

Особенно большое развитие метод ЛРД получил в последние годы. Разработаны новые приемы обработки измерений, в том числе применительно к анализу напряженного и деформационного состояния, прецизионного расчета ориентировок и разориентировок.

В качестве исследуемого образца был взят самостоятельно выращенный [2] кристалл *NaCl* как наиболее просто получаемый в обычных условиях.

Для проведения ЛДР измерений использовался рентгеновский дифрактометр общего назначения, оснащенный приставкой, при помощи которой обеспечивается  $\omega$ - $\varphi$  сканирование изучаемого участка.

Комплекс управляется при помощи шаговых двигателей. Вычислительная часть комплекса построена на базе IBM PC. Для стыковки оборудования использован программируемый адаптер параллельной связи. Информация о зарегистрированной интенсивности записывается в файл данных и одновременно выводится на экран.

В качестве отражающих плоскостей выбрали плоскости с кристаллографическими индексами [531], поскольку это наиболее удобно для нахождения ориентации. Для идентификации рефлексов воспользовались значениями всех возможных различных углов, встречающиеся между нормалью к плоскостям [531].

Для нахождения ориентации в большинстве случаев достаточно трех пар угловых координат зарегистрированных рефлексов. После серии тестовых измерений выбрали четыре таких пары. По ним имеется возможность посчитать ориентацию несколькими способами и оценить статистическую погрешность.

Результаты измерений последовательно обрабатывались. В каждой такой группе из 3 рефлексов содержится одинаковое угловое расстояние, названное нами  $\alpha_1$ . Алгоритм вычисления матрицы ориентации построен исходя из этого свойства.

1) Переход от  $\omega$ ,  $\varphi$  к декартовым координатам.

2) Расчет направления типа  $001$ . Для этого воспользуемся тем свойством, что три точки однозначно определяют плоскость. Напишем ее уравнение:  $Ax + By + Cz = 0$ , где  $A, B, C$  и будут координатами вектора нормали к этой плоскости. Таким образом, вектор  $\mathbf{n}_{001} = \mathbf{n}_{001}(A, B, C)$ .

3) Расчет  $\mathbf{n}_{010}$ . Прямая, содержащая  $\alpha_1$ , является параллельной к прямой, содержащей  $\mathbf{n}_{001}$ .

4) Из условия ортогональности данных векторов  $\mathbf{n}_{001}$  найдем как векторное произведение:  $\mathbf{n}_{001} = \mathbf{n}_{001} \times \mathbf{n}_{010}$ .

5) После этого каждый вектор подвергнем нормировке и получим ортонормированный базис. Строим матрицу:  $\mathbf{R} = (\mathbf{n}_{001} \ \mathbf{n}_{010} \ \mathbf{n}_{100})$ .

6) Для графического отображения полученного результата на сетке Болдырева, перейдем от декартовых координат к  $\omega$ ,  $\varphi$ .

В результате численной обработки полученных данных показано, что рассчитанные вектора попадают в угловой диапазон относительно среднего положения, не превышающий угловую величину раствора датчика. На основании этого можно заключить, что выращенный монокристаллический образец по своим кристаллогеометрическим свойствам близок к идеальному кристаллу, что можно видеть из небольшого количества измерений методом ЛРД.

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. Калабушкин А. Е. Титовец Ю.Ф. Локальная рентгеновская дифрактометрия с расширенными возможностями. Вопросы материаловедения. 2002. №1(29). с. 285-289.
2. В. В. Клубович. Н. К. Толочко. Методы выращивания кристаллов из растворов. АН БССР Витеб. Отделение Ин-та ФТТ и полупроводников. Минск: «Навука і тэхніка». 1991. 296 с.