

УДК 539.26+539.27

МАТРИЧНЫЙ МЕТОД ИНДИЦИРОВАНИЯ КАРТИН ДИФРАКЦИИ ОТ НЕПОДВИЖНОГО МОНОКРИСТАЛЛА С ПОМОЩЬЮ ЭВМ

М. И. Захарова, А. В. Сорокин, А. Г. Хунджуа

(кафедры физики твердого тела)

Рентгеновский анализ неподвижных монокристаллов и дифракционная электронная микроскопия являются мощными методами исследования структурных превращений в металлических сплавах. Чувствительность этих методов позволяет уловить изменения кристаллической структуры на самых ранних стадиях фазовых превращений, что необходимо для изучения механизма перестройки кристаллических решеток.

Применение методов рентгеновского анализа монокристаллов и дифракционной электронной микроскопии на практике требует индцирования картин дифракции, что часто сопряжено с трудоемкими вычислениями. Наиболее простой и распространенный способ индцирования — сопоставление экспериментальных картин дифракции с расчетными.

В связи с широким распространением дифракционной электронной микроскопии как метода исследования кристаллической структуры во многих лабораториях расчет микроэлектроннограмм ведется с помощью ЭВМ [1, 2]. В то же время расчету рентгенограмм неподвижных монокристаллов уделялось существенно меньшее внимание, хотя и проводились работы по расчету рентгенограмм монокристаллов твердых растворов на основе β -Ti и β -Zr с выделениями ω - и α -фаз [3] и расчету лауэграмм для кристаллов различных сингоний [4].

Целью настоящей работы является разработка единой программы для ЭВМ, позволяющей строить микроэлектроннограммы и рентгенограммы неподвижного монокристалла исходной фазы с выделениями кристаллитов других фаз.

Расчет картин дифракции от монокристалла с выделениями основан на построении Эвальда. В случае белого спектра множество сфер Эвальда сосредоточено между двумя крайними сферами с радиусами $1/\lambda_{\min}$ и $1/\lambda_{\max}$ (рис. 1). Вклад в дифракционную картину вносят узлы обратной решетки, заключенные между крайними сферами. Для таких узлов удовлетворяется условие интерференции, и их число и расположение определяют число и направление интерференционных лучей. Узел обратной решетки попадает в область между сферами в случае, если выполняется соотношение

$$\left\{ x_1^2 + x_2^2 + \left(x_3 + \frac{1}{\lambda_{\min}} \right)^2 \right\}^{1/2} - \frac{1}{\lambda_{\min}} \leq R, \quad (1)$$

$$\frac{1}{\lambda_{\max}} - \left\{ x_1^2 + x_2^2 + \left(x_3 + \frac{1}{\lambda_{\max}} \right)^2 \right\}^{1/2} \leq R,$$

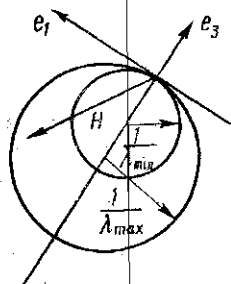


Рис. 1. Построение Эвальда для белого спектра

правление интерференционных лучей. Узел обратной решетки попадает в область между сферами в случае, если выполняется соотношение

где X_i — координаты узла в базисе $\{e_i\}$, связанном с первичным пучком (e_3 по лучу, e_1 по вертикали); R — радиус узла обратной решетки. Расходимость первичного пучка (угол расходимости φ) можно учесть, вводя поправку к радиусу узла обратной решетки

$$R' = R + \frac{\varphi}{2} \left(1 + \frac{\lambda^2 H^2}{4} \right)^{1/2} |\mathbf{H}|,$$

где \mathbf{H} — вектор рассеяния.

Координаты $\{X_i\}$ произвольного узла обратной решетки с индексами $\{h_i\}$ рассчитываются с помощью матриц соответствия. Пусть $\{a_i\}$, $\{a_i^*\}$ и $\{b_i\}$, $\{b_i^*\}$ — базисные векторы кристаллической и обратной решеток основной и выделяющейся фаз. Ориентация кристаллической решетки выделяющейся фазы относительно основной задается матрицей соответствия $M: \mathbf{b}_k = \mathbf{a}_j M_{jk}$ и ориентация монокристалла основной фазы относительно базиса $\{e_i\}$ — матрицей соответствия $N: \mathbf{a}_j = \mathbf{e}_i N_{ij}$. Тогда

$$X_i e_i = h_i \mathbf{b}_i^* = h_i \mathbf{b}_k g^{ik} = h_i \mathbf{a}_j M_{jk} g^{ik} = h_i \mathbf{e}_l N_{lj} M_{jk} g^{ik} = \mathbf{H} \\ X_l = \mathbf{e}_l \mathbf{H} = h_i N_{lj} M_{jk} g^{ik}, \quad (2)$$

где $g^{ik} = \mathbf{b}_i^* \cdot \mathbf{b}_k^*$ — метрический тензор обратной решетки выделяющейся фазы.

Таким образом, используя соотношения (2) и (1), легко выявить узлы обратной решетки, вносящие вклад в дифракционную картину, и затем определить положение соответствующих рефлексов на пленке по формулам, вид которых зависит от условий съемки.

Вычисление матрицы соответствия M требует нахождения для трех направлений в решетке выделяющейся фазы параллельных им направлений в решетке основной фазы: $\mathbf{a}^j = \mathbf{a}_i m_{ij}$ параллельны $\mathbf{b}^j = \mathbf{b}_i n_{ij}$ ($j = 1, 2, 3$). Такие направления можно определить из ориентационного соотношения между кристаллическими решетками основной и выделяющейся фаз, которое обычно задается в виде соотношения

$$\{HKL\} \langle hkl \rangle_{\text{основной фазы}} \parallel \{H'K'L'\} \langle h'k'l' \rangle_{\text{выделения}}.$$

За \mathbf{a}^1 и \mathbf{b}^1 можно взять направления $[hkl]$ и $[h'k'l']$; за \mathbf{a}^2 и \mathbf{b}^2 — нормали к плоскостям (HKL) и $(H'K'L')$ и положить $\mathbf{a}^3 = [\mathbf{a}^1 \mathbf{a}^2]$, $\mathbf{b}^3 = [\mathbf{b}^1 \mathbf{b}^2]$.

Условие параллельности запишем в виде равенства единичных векторов

$$\frac{\mathbf{a}_i m_{ij}^i}{|\mathbf{a}_i m_{ij}^i|} = \frac{\mathbf{b}_i n_{ij}^i}{|\mathbf{b}_i n_{ij}^i|}$$

Обозначая

$$\frac{m_{ij}^i}{|\mathbf{a}_i m_{ij}^i|} = A_j^i, \quad \frac{n_{ij}^i}{|\mathbf{b}_i n_{ij}^i|} = B_j^i,$$

получим

$$\mathbf{b}_i B_j^i = \mathbf{a}_i A_j^i; \quad \mathbf{b}_i = \mathbf{a}_i A_j^i (B_j^i)^{-1},$$

т. е. $M_{ij}^i = A_j^i (B_j^i)^{-1}$.

Матрица N находится аналогично.

Таким образом, для расчета картин дифракции необходимо задать ориентацию монокристалла относительно первичного пучка, па-

параметры решеток и ориентационное соотношение между кристаллическими решетками основной фазы и выделения, условия съемки, т. е. формулы, связывающие координаты узлов обратной решетки с положением рефлексов на пленке, интервал длин волн излучения, размер узлов обратной решетки, расходимость пучка. Далее ЭВМ вычисляет

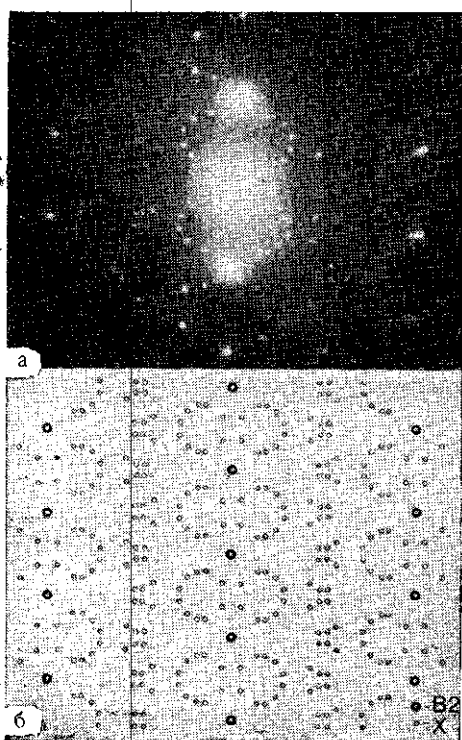


Рис. 2. Экспериментальная (а) и расчетная (б) (133)-микроэлектронogramмы сплава $Ni_{50}Ti_{46}Nb_4$ после 6 ч отпуска при $350^{\circ}C$ с рефлексами В2-матрицы и X-фазы

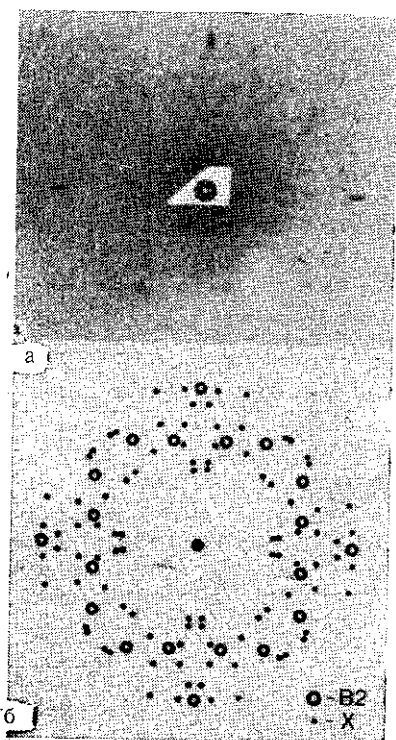


Рис. 3. Экспериментальная (а) и расчетная (б) рентгенограммы неподвижного монокристалла сплава $Ni_{50}Ti_{46}Nb_4$ с рефлексами В2-матрицы и X-фазы

матрицы соответствия, путем перебора находит узлы обратной решетки, вносящие вклад в дифракционную картину, и рассчитывает положение соответствующих рефлексов на пленке.

По приведенной схеме были рассчитаны рентгенограммы неподвижных монокристаллов и микроэлектронogramмы ОЦК сплавов на основе β -Ti, β -Zr, β -Ni с выделениями α - и ω -фаз и ОЦК В2-сплавов на основе никелида титана с выделениями переходной фазы с утроенной кубической решеткой ($a=9 \text{ \AA}$). Расчетные рентгенограммы и микроэлектронogramмы совпали с экспериментальными.

Попытки индирования микроэлектронogramм никелида титана с выделениями X-фазы привели к заключению, что на основе известных из работ [5, 6] параметров ГЦК X-фазы и ориентационного соотношения не удастся полностью описать экспериментальные дифракционные картины. Анализ микроэлектронogramм различных зон показал, что их можно полностью объяснить, приписывая X-фазе ромбоэдрическую

решетку с параметрами $a_X = \sqrt{5}a_{B2}$, $\alpha = 114^\circ$, ориентированную относительно ОЦК $B2$ -матрицы так, что выполняется соотношение

$$\{\bar{1}10\langle 111 \rangle_X\} \parallel \{\bar{3}\bar{2}1\langle 111 \rangle_{B2}\}.$$

Доказательством правильности предложенной для X -фазы кристаллической структуры и ориентационного соотношения могут служить приведенные на рис. 2, а, 3, а экспериментальные (133)-микроэлектронограмма и рентгенограмма неподвижного монокристалла сплава $Ni_{50}Ti_{46}Nb_4$, с достаточной точностью совпадающие с расчетными (рис. 2, б, 3, б).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Утевский Л. М., Ноткин А. Б. Заводская лаборатория, 1975, 41, с. 193. [2] Дзиграшвили Г. А., Кутелия Э. Р. В кн.: XII Всесоюз. конф. по электронной микроскопии. М.: Наука, 1982, с. 90. [3] Хатанова Н. А., Киров С. А., Захарова М. И. Заводская лаборатория, 1977, 43, с. 1086. [4] Ploc R. A. J. Mater. Sci., 1983, 18, p. 1083. [5] Kolomytsev V. I., Lobodyuk V. A., Khandros L. G. Phys. Stat. Sol. (a), 1981, 65, p. 87. [6] Хунджа А. Г., Захарова М. И. Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон., 1982, 23, № 6, с. 81.

Поступила в редакцию
24.02.84

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1984, т. 25, № 4

УДК 539.186

СВЕРХУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ НА АТОМАХ НАТРИЯ В БОРНОВСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ ИСКАЖЕННЫХ ВОЛН

О. И. Зайцева

(кафедра физики атомного ядра)

Экспериментальное и теоретическое изучение сверхупругого рассеяния электронов на атомах, возбужденных путем лазерной накачки, началось сравнительно недавно [1, 2]. Наиболее подробно исследование рассеяния электронов на атомах натрия, возбужденных лазером в $3P$ -состояние: $e + Na^*(3P) \rightarrow e' + Na(3S)$ [3]. Целью настоящей работы является использование и анализ применимости борновского приближения искаженных волн (БПИВ) [4, 5] для описания этого процесса. Ранее с аналогичной целью применялись приближение сильной связи каналов [6] и метод поляризованных орбиталей [7]. В соответствии с имеющимися экспериментальными данными и общими ограничениями, накладываемыми на БПИВ, нас будут интересовать небольшие углы рассеяния. В данной работе приводятся результаты наших расчетов для энергии пучка электронов $E = 20$ эВ.

Рассматриваемый процесс сверхупругого рассеяния полностью характеризуется набором четырех независимых параметров [8]. Если пренебречь релятивистскими взаимодействиями и обменным рассеянием, то число независимых параметров сокращается до двух. Анализ, проведенный в [9], подтвердил (в пределах ошибок эксперимента) применимость двухпараметрического описания процесса сверхупругого рассеяния при интересующих нас кинематических условиях ($E = 20$ эВ угол рассеяния $\theta \leq 15^\circ$). Экспериментальные характеристики сверхупругого рассеяния традиционно параметризуются через величины, связанные с амплитудами обратного во времени процесса воз-