

РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКИЙ МЕТОД ИЗУЧЕНИЯ СУБСТРУКТУРЫ КВАЗИКРИСТАЛЛОВ

Крячко С.В., Малыхин С.В., Решетняк М.В.

Национальный технический университет

“Харьковский политехнический институт”, г. Харьков

Икосаэдрические квазикристаллы представляют собой новый класс структур, строение которых характеризуется наличием дальнего порядка при отсутствии трансляционной инвариантности и симметрией 5-го порядка. Структура квазикристаллов может содержать как классические для кристаллов точечные и линейные дефекты, так и специфические фазонные дефекты. В данной работе предпринята попытка модифицировать способ аппроксимации, чтобы в квазикристаллах анализировать кроме L и ε еще и плотность фазонных дефектов- n .

Исходим из того, что в приближении аппроксимации по Коши физическая ширина отражений включает три слагаемых - $b = b_L + b_e + b_f$. В пространстве обратной решетки ширина, связанная с дисперсностью ОКР, $b_L = 1/L$, а уширение от микродеформаций $b_e = 2eQ_{нар}$, где $Q_{нар} = \frac{2\sin J}{I}$ - модуль трехмерного дифракционного вектора отражения от квазикристалла в прямом пространстве. Согласно литературным данным уширение отражения с индексами Дж.Кана (N,M) от фазонов b_f зависит исключительно от их концентрации и модуля дифракционного вектора в дополнительном пространстве $-Q_{непр}$. Вид зависимости b_f выбран таким, какой предлагается для дислокационных диполей [1], а именно $b_f \approx b_f Q_{непр} \sqrt{n}$, b_f - величина фазонного перескока.

Процедура расчетов заключается в нахождении методом наименьших квадратов вида уравнения плоскости, описывающего ширину как функцию двух аргументов $Q_{нар}$ и $Q_{непр}$. Для нахождения уравнения плоскости используется оригинальная программа, написанная на Object Pascal в среде Delphi. При нахождении уравнения плоскости исходят из того, что массив точек может иметь разброс, связанный с погрешностью измерения. Из параметров уравнения вычисляются величина микродисперсности, микродеформации и плотность фазонных дефектов. Экспериментальное опробование метода выполнено для образцов систем Ti-Zr-Ni и Al-Pd-Mn, содержащих квазикристаллическую фазу, и которые имели различную скорость закалки при синтезе, а, следовательно, имели различную плотность дефектов.

[1] Кривоглаз М.А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах.- К.: Наукова думка, 1983, 408 с.