

## БОЛРЫН КРИСТАЛЛД 22 МэВ ЭНЕРГИТЭЙ ЭЛЕКТРОНЫ ҮЙЛЧЛЭЛЭЭР ҮҮССЭН ЭВДРЭЛИЙН РЕНТГЕНГРАФЫН СУДАЛГАА

Л.Баяржаргал, доктор Д.Сангаа, Д.Баатархүү  
МУИС. ФЭС, Физикийн салбар

**Товч утга:** Микротрон МТ22 дээр гурван төрлийн болрыг 22 МэВ энергитэй электроноор шарсан. Электроны болрын бүтцэд үзүүлэх нөлөөг судлахын тулд электроноор шарахын өмнө ба дараа нь болрыг D500 дифрактометрээр рентген сарнилын зургийг авч бүтцийн параметруудыг нарийвчлан тогтоосон. Бүтцийн эвдрэл болон блокийн хэмжээ нь сарнилын пикийн өргөсөх гол шалгаан болдог. Пикийн өргөсөлтөөс хоёр янзын аргаар блокийн хэмжээ ба харьцангуй гажилтын хэмжээг тогтоосон.

### БЛОКИЙН ХЭМЖЭЭ БА МИКРО ГАЖИЛТЫГ ТОДОРХОЙЛОХ АРГУУД

**Интеграл өргөний арга:** Энэ аргад блокийн хэмжээ ба харьцангуй суналтын хэмжээг тодорхойлохдоо дараах гурван тэгшитгэлийг хэрэглэдэг.[1]

$$\beta = \frac{1}{D} + 2\varepsilon s \quad \beta = \frac{1}{D} + \frac{4\varepsilon^2 s^2}{\beta} \quad \beta = \frac{1}{D} + 4\varepsilon^2 s^2$$

Энд  $\beta$  нь урвуу торын интеграл өргөн

$$\beta_n = \frac{\int_0^{\infty} I(s) ds}{I(H_{nk})}$$

$\int_0^{\infty} I(s) ds$  нь интеграл эрчим :

$I(H_{nk})$  нь уг эрчимийн хамгийн их утга.

Хэрвээ урвуу торын цэгт дисперностейг тооцвол

$$\beta_{II} = \frac{1}{D}$$

Энд D вектор  $H_{nk}$ -ын дагуу сарниулж байгаа блокийн хэмжээ  $\varepsilon$  нь микрохарьцангуй суналтын хамгийн дээд утга юм [1]. Хэрвээ блок хэмжээний хувьд хангалттай том бол кристаллд

учруулсан хүчлэгийн улмаас үүссэн микро деформац нь  $\beta_H = 2\varepsilon H_{hkl}$  байна.

**Давхар Войгтын арга** : Хэрвээ пикийн хэлбэрийг Войгт функцээр илэрхийлж болж байвал энэ арга нь пикийг Фурье цуваагаар задалдаг. Варрен-Абербахын[3] аргын ойролцоололтой эквивалент болохыг Балзар Лэдбэттер[2] нар харуулсан. Чауси ба Гаусс функцууд нь пикийн өргөсөлтийг хангалттай илэрхийлж чаддаггүй. Харин Войгт функцээр арай илүү сайн илэрхийлэх боломжтой болдог. Войгт функцийн Фурье задаргааны дараа Фурье коэффициентууд дараах хэлбэртэй болдог.

$$F(L) = \exp[-2L\beta_c - \pi L^2 \beta_G^2]$$

$\beta_c$   $\beta_g$  нь  $\beta$  нийт интеграл өргөний харгалзах Чауси ба Гаусс хэсгүүд. [2] Блокийн хэмжээ ба микрохарьцангуй гажилтын харгалзах Чауси ба Гаусс хэсгүүдийг дараах тэгшитгэлүүдээс бодож олдог.

$$\beta_c = \beta_{sc} + \beta_{dc}$$

$$\beta_G^2 = \beta_{SG}^2 + \beta_{DG}^2$$

Энд ( $\beta_{sc}$ ,  $\beta_{dc}$ ) нь интеграл өргөний харгалзах Чауси хэсэг.

( $\beta_{SG}$  and  $\beta_{DG}$ ) нь интеграл өргөний харгалзах Чауси ба Гаусс хэсэг. Варрены тодорхойлолт [3] ёсоор нийт Фурье коэффициентуудыг  $F^S$ ,  $F^D$  -ын үржвэрээр  $F(L) = F^S(L)F^D(L)$  илэрхийлдэг.

$$F^S(L) = \exp[-2L\beta_{sc} - \pi L^2 \beta_{SG}^2] \quad F^D(L) = \exp[-2L\beta_{dc} - \pi L^2 \beta_{DG}^2]$$

Варрены тодорхойлолт ёсоор гадаргуугаар нормчилсон блокийн хэмжээ

$$\left[ dF^S(L) / dL \right]_{L \rightarrow 0} = -1 / D_s \quad \langle D \rangle_s = \frac{1}{2\beta_{sc}}$$

Варрены тодорхойлолт ёсоор эзлэхүүнээр нормчилсон блокийн хэмжээ

$$\langle D \rangle_v = \frac{\exp(k^2)}{\beta_{SG}} (1 - \operatorname{erfc}(k)) \quad k = \beta_{sc} / (\pi^{1/2} \beta_{SG})$$

Микрохарьцангуй гажилтын квадратын дундаж утга

$$\langle \varepsilon^2(L) \rangle = \frac{1}{s_0^2} \left( \frac{\beta_{DG}^2}{2\pi} + \frac{\beta_{sc}}{\pi^2} \frac{1}{L} \right)$$

## ТУРШИЛТ

Орчин үед дифракцийн шугамын хэлбэрийг судалж блокийн хэмжээ ба микро деформацийг тогтоох гурван арга байдгаас интеграл өргөний арга [1] ба Давхар Войгт [2] аргыг тооцоондоо авч хэрэглэсэн. Бүтцийн эвдрэл буюу кристалл бүтцийн гажилтыг үүсгэх зорилгоор микротрон дээр 22 МэВ энергитэй электроноор нэг талаас нь 30 минут нөгөө талаас нь 15 минут нийтдээ 45 минут шарсан. Энэ үед электроны гүйдлийн хэмжээ  $I_e=3\text{мкА}$  байсан. Таацын гол, Сайхан дулаан, Горхи, Цагаан толгой, Зүүнбаян гэх мэт 6 дээжийг электроны цацрагаар шарснаас Таацын гол, Сайхан дулаан, Зүүнбаяны болрын дээжийн бүтцийн судалгааг хийсэн. Пик нь дараах хүчин зүйлүүдээс болж өргөсдөг. Үүнд блокийн хэмжээ, кристаллын жигд биш гажилт ба эвдрэл болон багажаас шалтгаалсан өргөсөлт орно. Кристаллын жигд гажилт нь пикийг өргөсүүлдэггүй харин шилжүүлдэг. [5]

БОЛРЫН ТОРЫН ПАРАМЕТРЫГ РИТВЕЛДЫН АРГААР  
НАРИЙВЧЛАН ТОГТООСОН ҮР ДҮН

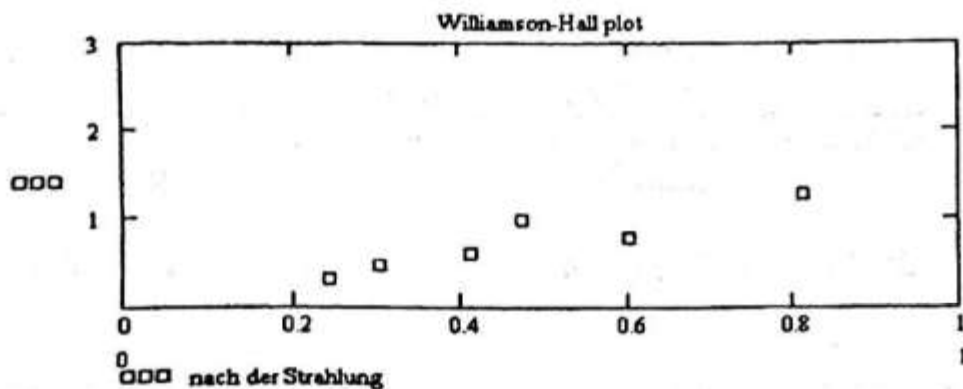
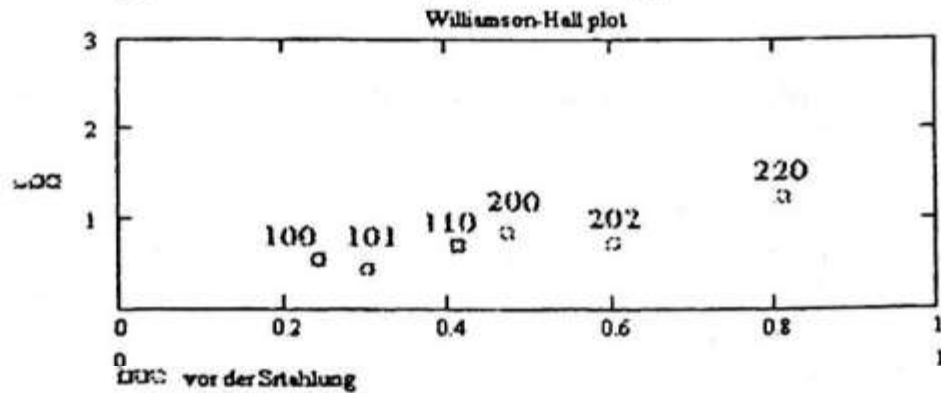
Таацын гол, Сайхан дулаан, Зүүнбаяны ордын болрын спектрийн боловсруулалтыг гүйцэтгэж атомын координат, торын параметруудийг тодорхойлсон үр дүнгээс дараах хүснэгтэд үзүүлэв. Эндээс үзэхэд болрын торын  $c$  параметр бусад параметрыг бодвол илүү өөрчлөгдсөн байна.

*Хүснэгт 1. Электроноор шарахын өмнө ба дараах болрын торын параметрууд*

	Таацын гол (E)	Таацын гол Дараа (E)	Зүүнбаян (E)	Зүүнбаян дараа (E)
a =	4.9131(9)	4.9124(10)	4.9112(5)	4.9147(11)
b =	4.9131(9)	4.9124(10)	4.9112(5)	4.9147(11)
c =	5.40207(7)	5.40262(7)	5.4008(7)	5.4072(10)

## ДАВХАР ВОЙГТ БА ИНТЕГРАЛ ӨРГӨНИЙ АРГААР ОЛСОН ҮР ДҮНГИЙН ХАРЬЦУУЛАЛТ

Болрын рентген дифракцийн зураг нь олон пиктэй байдгаас кристаллографийн [100], [110], [101] чиглэл нь их өнцгийн мужид давхцах хавтгайнуудтай ( (200), (220), (202)) байсан. Дээрх чиглэлүүдэд профилийн анализийг хийж пикийн хэлбэрийн параметр ба интеграл өргөнийг тогтоосон. [100], [101] чиглэлд Войгт функц [110] чиглэлд ПсевдоВойгт функцыг тус тус хэргэлсэн. Стандарт болрын дээжийг багажийн улмаас үүсэх пикийн өргөсөлтийг засахад ашигласан. Доорх Вилламсон-Халл плотоос харахад болрын тор [100] чиглэлд илүү гажсан байна. Мөн [110] ба [101] чиглэлд хэмжиж болохуйц гажилт үүссэн.

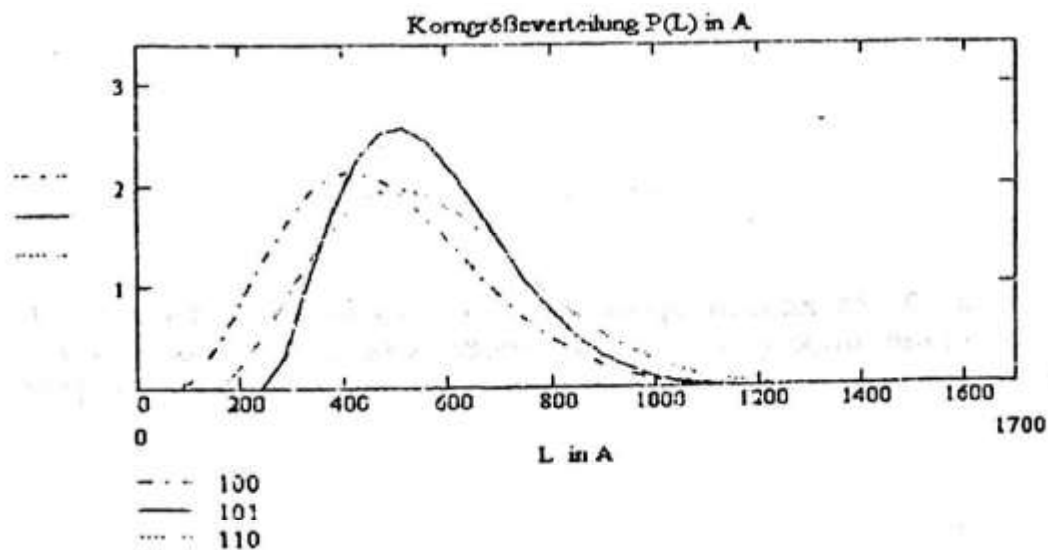


**Зураг 1.** Электроноор шарахын өмнө ба шарсны дараах Вилламсон-Халл плот

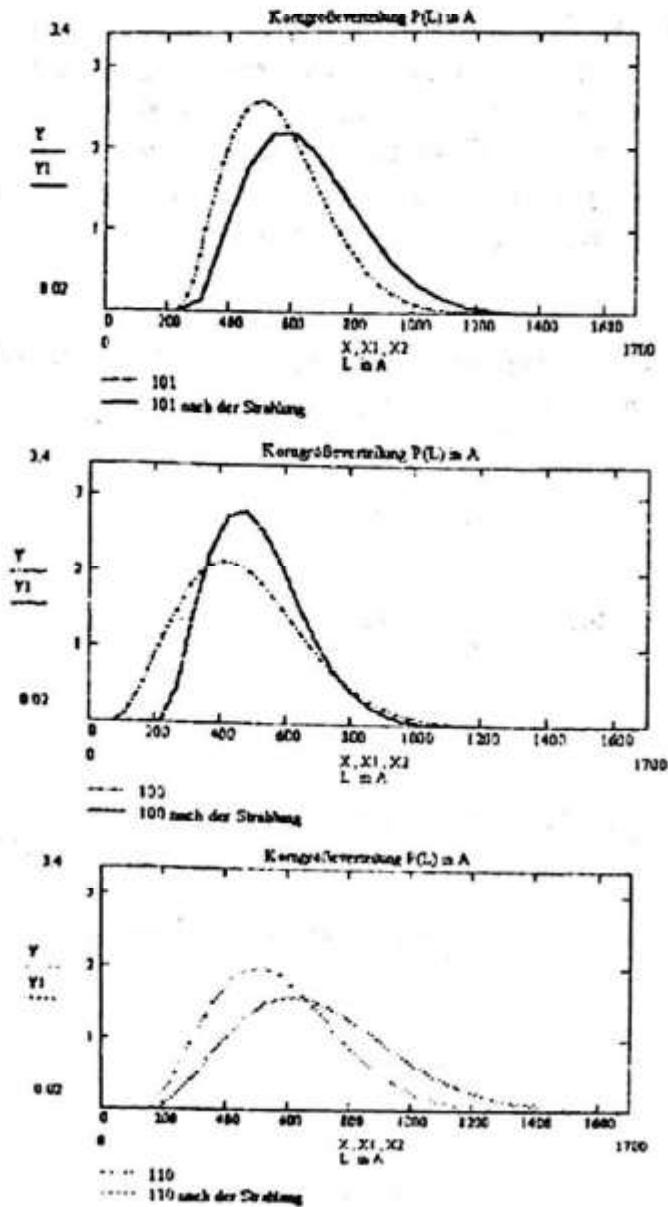
Доорх хүснэгтээс Давхар Войгт арга ба интеграл өргөний аргаар олсон блокийн хэмжээнүүдийг харьцуулан харж болно. Блокийн хэмжээний түгэлтийн функцийг Давхар Войгтийн ойролцооллоор бодсон. Блокийн хэмжээний түгэлтийн зургаас үзэхэд болор нь гомоген хэлбэртэй ба электроноор шарсаны дараа хэлбэр нь бага зэрэг өөрчлөгдсөн.

**Хүснэгт 2.** Таацын голын болрын дээжийг электроноор шарахын өмнөх ба дараах блокийн хэмжээг Давхар Войгт арга ба интеграл өргөний аргаар олсон үр дүн.

	Давхар-Войгт арга			Интеграл өргөний арга					
	$D_v$ (A)	$D_z$ (A)	$\langle \varepsilon^2(a_i) \rangle^{1/2}$ $10^3$	$D_{cc}$ (A)	$D_{cg}$ (A)	$D_{gg}$ (A)	$\varepsilon_{cc}$ $\times 10^{-3}$	$\varepsilon_{cg}$ $\times 10^{-3}$	$\varepsilon_{gg}$ $\times 10^{-3}$
[100]									
өмнө	477	436	6.12(23)	420	493	486	6.51(22)	6.76(33)	6.80(36)
дараа	515	477	6.64(46)	581	633	631	7.43(31)	7.28(19)	7.54(40)
[101]									
өмнө	561	520	4.19(14)	595	646	644	4.76	4.45(28)	4.61(11)
дараа	650	601	4.60(10)	627	648	747	5.17	4.67(17)	4.92(25)
[110]									
өмнө	575	505	7.19(42)	533	596	593	6.68	7.13(29)	6.82(38)
дараа	704	613	7.04(37)	591	716	715	6.96	7.34(24)	7.11(15)



**Зураг 2.** Блокийн хэмжээний түгэлт 100, 110, 101 хавтгайд перпендикуляр зай L-ээс хамаарсан хамаарал ( электроноор шарахын өмнө)



**Зураг 3.** Электроноор шарахын өмнөх блокийн хэмжээний түгэлт (тасархай шугам) электроноор шарсны дараа (тасралтгүй шугам) хэрхэн өөрчлөгдсөнийг харуулсан зураг.



### ДҮГНЭЛТ

Электроноор шарсаны дараа болрын кристалл тор нь хэмжиж болохуйц гажсан. Ялангуяа 100 чиглэлд харьцангуй их гажсан. Цэвэр болрын хувьд эвдрэл ба ором ихтэй болрыг бодвол их гажсан. Блоккийн хэмжээний түгэлт электроноор шарсаны дараа өөрчлөгдсөн.

### АШИГЛАСАН НОМ ЗОХИОЛ

1. D. Balzar, *J. Appl. Cryst.* **25** (1992) 559-570. *Voigt-function model in diffraction line-broadening analysis*
2. D. Balzar and H. Ledbetter, *J. Appl. Cryst.* **26** (1993) 97-103.
3. B. E. Warren, *X-ray Diffraction* (Addison Wesley, Reading, MA, 1969).
4. Th. H. de Keijser, J. I. Langford, E. J. Mittemeijer, and A. B. P. Vogels, *J. Appl. Cryst.* **15** (1982) 308-314
5. K SANTRA, P CHATTERJEE and S P SEN GUPTA *Bull. Mater. Sci.*, Vol. 25, No. 3, June 2002, pp. 251-257. *Voigt modelling of size-strain analysis: Application to  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> prepared by combustion technique*