

МЕТОД СВЕТОРАССЕЯНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ГЕОМЕТРИИ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ В МОНОКРИСТАЛЛАХ

В. Г. Кононенко и Д. В. Плужникова

Описана методика исследования геометрии неоднородности в монокристаллах.

1. Как известно, неоднородности в монокристаллах ограничены участками плоских поверхностей и имеют вид многогранников. В данной работе, имея в виду кубические кристаллы, форма рассеивающей частицы аппроксимировалась прямоугольным параллелепипедом с произвольным соотношением сторон и произвольно ориентированным в пространстве. Угловые зависимости светорассеяния (УЗС) рассчитывались в приближении Релея—Ганса [1, 2], т. е. для случая оптически «мягких» частиц. Для задач физики твердого тела это приближение оказывается оправданным до размеров частиц $\rho \approx 10^1 \div 10^2$ ($\rho = 2\pi a/\lambda$, a — эффективный радиус частицы, λ — длина волны падающего света в матрице), так как скачок показателя преломления на границе частица—матрица обычно порядка $10^{-1} \div 10^{-2}$. В указанном приближении, как известно, УЗС определяются угловыми зависимостями фазовой функции

$$\Phi(\Theta) = \frac{1}{v} \int e^{i\delta} dv, \quad (1)$$

где Θ — угол рассеяния, $\delta = kr(k_p - k_0) = 2k \sin \frac{\Theta}{2} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{b})$ — фазовый сдвиг элемента объема dv относительно центра частицы, $\mathbf{r}$ — радиус-вектор dv , k , k_p , k_0 — абсолютная величина волнового вектора и единичные векторы вдоль направления рассеянной и падающей волн соответственно, $\mathbf{b}$ — единичный вектор вдоль биссектрисы угла $(180 - \Theta)$. Для вычисления $\Phi(\Theta)$ в нашем случае введем две системы координат: одну (X'_i) с осями, параллельными сторонам частицы, и другую (X_i) лабораторную, в которой заданы направления k_p и k_0 . После перехода в (1) к системе координат, связанной с частицей, и интегрирования по объему частицы v получим

$$\Phi(\Theta, \alpha) = \prod_{j=1}^3 \frac{\sin \left[2k \sin \frac{\Theta}{2} a_j a_{lj} b_l \right]}{2k \sin \frac{\Theta}{2} a_j a_{lj} b_l}, \quad (2)$$

где a_1, a_2, a_3 — полуразмеры частицы вдоль соответствующих осей (X'_i) , a_{lj} — направляющие косинусы l -го орта (X'_i) относительно j -й оси системы (X_i) , b_l, b_i — компоненты $\mathbf{b}$ в системе координат (X_i) . Явный вид матрицы поворота a_{lj} естественно выразить через углы Эйлера: угол нутации β , угол прецессии ψ и угол чистого вращения φ .

2. Описываемая методика основана на сопоставлении и анализе угловых зависимостей $\Phi(\Theta, \alpha)$ и экспериментальных УЗС, получаемых в двух геометриях опыта. В одной геометрии $k_0 \parallel$ оси вращения цилиндрического образца (осевое освещение). Если для определенности k_0 направлено

в положительном направлении оси OX_3 , а плоскостью рассеяния является плоскость X_3OX_2 , то в α_{lj} единственной переменной окажется угол ψ , а

$$b_l = \left(0; \cos \frac{\theta}{2}; -\sin \frac{\theta}{2}\right). \quad (3)$$

В другой геометрии $k_0 \perp$ оси вращения образца (боковое освещение). Если k_0 направить в положительном направлении оси OX_2 , а за плоскость рассеяния взять плоскость X_1OX_2 , то

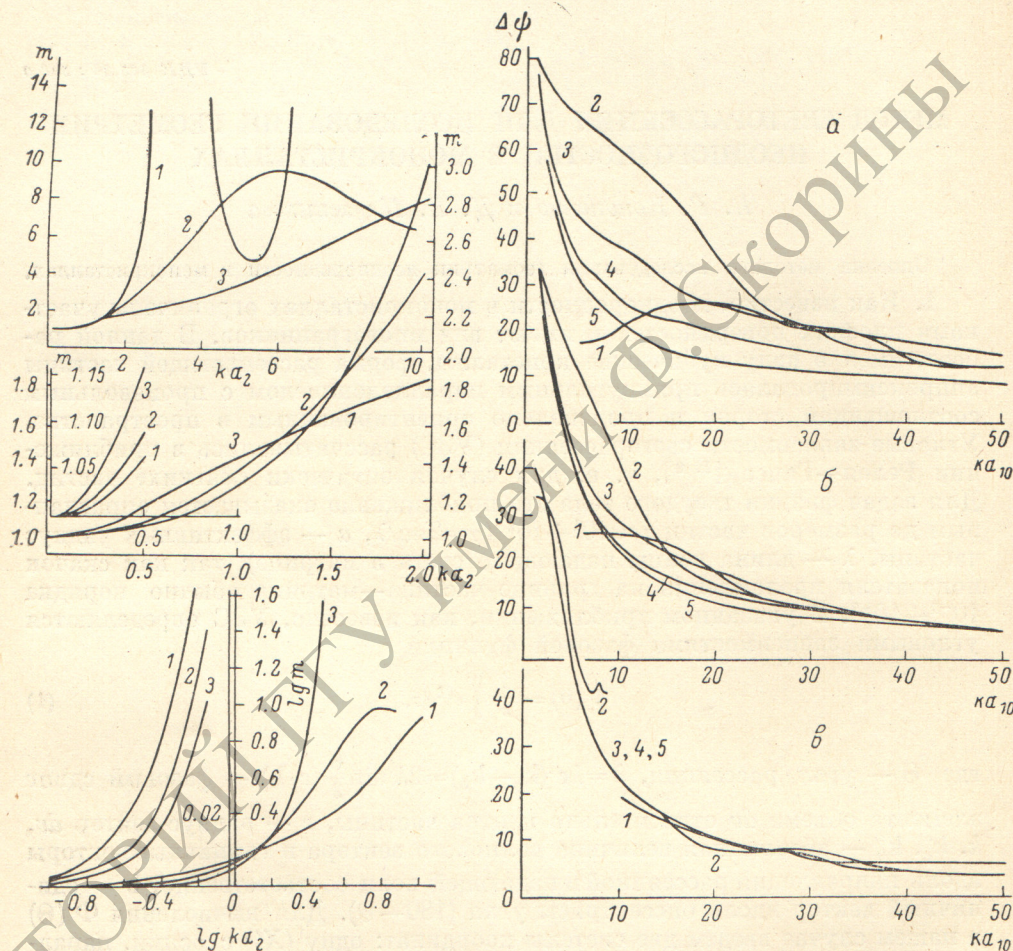


Рис. 1. Зависимости m от «толщины» частицы ka_2 .

1 — $\sigma=0$, 2 — $\sigma=0.5$, 3 — 1.0.

Рис. 2. Зависимости полуширины главного максимума $\Delta\psi$ от «ширины» частицы ρ_{10} . Кривые 1, 2, 3, 4, 5 относятся к частицам с $\mu=1, 2, 3, 10$ и 20 соответственно. а — $\sigma=1.0$, б — $\sigma=0.5$, в — $\sigma=0.1$.

$$b_l = \left(\cos \frac{\theta}{2}; -\sin \frac{\theta}{2}; 0\right). \quad (4)$$

Указанные геометрии позволяют получить диаграммы рассеяния при боковом и осевом освещении (фиксирован угол θ , переменный угол ψ) и обычную индикатрису рассеяния (фиксирован угол ψ , переменный угол θ). Подставляя в (2) выражения (3) или (4) и α_{lj} , получим $\Phi(\theta, \alpha)$ в явном виде. При сопоставлении экспериментальных и расчетных УЗС будем иметь в виду, что, во-первых, в монокристаллах реализуется дискретный набор ориентаций частиц, и, во-вторых, внутри каждой группы частицы разных размеров геометрически подобны.

Форма частиц. Из анализа $\Phi(\Theta, \alpha)$ следует, что максимумы рассеяния должны наблюдаться, когда частица одним из своих больших размеров совмещается с «зеркальной» $((\mathbf{r}\mathbf{b})=0)$ плоскостью относительно $\mathbf{k}_0$ и $\mathbf{k}_p$. Учитывая это обстоятельство, можно заранее составить таблицу расположения максимумов УЗС от частиц предполагаемых форм и ориентаций в двух указанных геометриях опыта для характерных кристаллографических плоскостей. Сопоставление экспериментальных максимумов УЗС

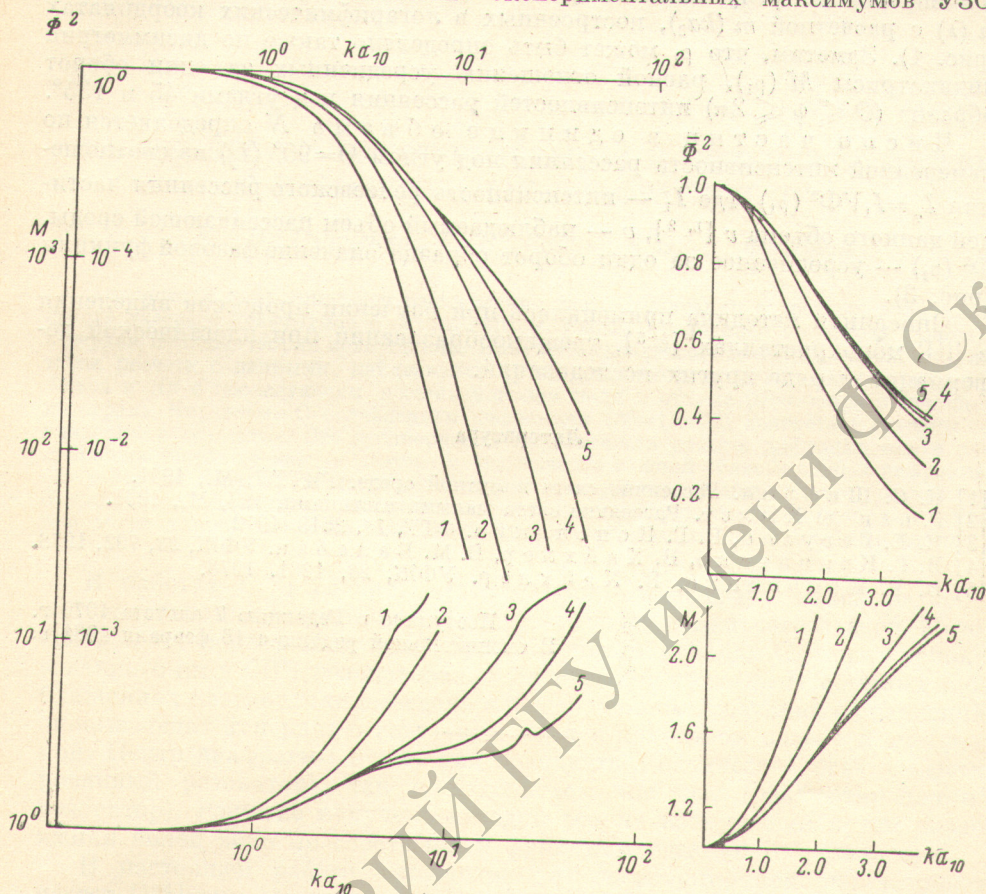


Рис. 3. Зависимости Φ^2 и M от «ширины» частицы ka_{10} .

Кривые 1, 2, 3, 4, 5 относятся к частицам с $\mu=1, 2, 5, 10$ и 20 соответственно, $\sigma=0.5$ (зависимости $\Phi^2(ka_{10})$ и $M(ka_{10})$ слабо зависят от σ).

с таблицей дает возможность идентифицировать формы и расположения частиц в первом приближении. Для уточнения формы во втором приближении и определения размеров частиц необходимо каждую группу исследовать в боковом освещении дополнительно, вырезав образцы так, чтобы ось вращения образца была параллельна плоскости залегания частиц данного сорта. Нами численно на ЭВМ-222 исследованы УЗС в боковом освещении с учетом функции распределения типа Гаусса по размеру $\rho_1 = 2\pi a/\lambda$. Так как в принятой геометрии опыта $\Phi(\Theta, \alpha)$ вырождается в зависимость $\Phi(\psi)$ и УЗС определяются только двумя величинами ρ_1 и ρ_2 и не зависят от ρ_3 , то в расчет введен один параметр формы — вытянутость $\mu = \rho_1/\rho_2$. Другим независимым параметром была дисперсия функции распределения σ .

Размеры частиц. Расчеты показывают следующее. 1. Зависимости $\Phi^2(\psi)$ осциллирующие: имеются главные максимумы (ГМ) и боковые (БМ), значительно меньшей интенсивности. С ростом ρ_1 число БМ растет, а интенсивность падает. С увеличением σ БМ сглаживаются.

2. Отношение m интенсивностей одних и тех же ГМ, полученных при симметричных Θ (например, 45° и 135°), зависит от ρ_2 и, следовательно, может быть использовано для его определения (рис. 1). 3. Угловая полуширина ГМ — $\Delta\psi$ зависит от ρ_1 и, следовательно, дает возможность экспериментального определения этой величины (рис. 2). Как видно из рис. 1 и 2, точность определения ρ_1 и ρ_2 можно улучшить, оценив σ из совмещения по углу наклона участка экспериментальной зависимости $m(\lambda)$ с расчетной $m(ka_2)$, построенных в логарифмических координатах (рис. 1). Заметим, что ρ_1 может быть определено также по дисимметрии индикатрисы $M(\rho_1)$, равной отношению усредненных за один оборот образца ($0 \leq \psi \leq 2\pi$) интенсивностей рассеяния под углами 45° и 135° .

Число частиц в единице объема N определяется по измеренной интенсивности рассеяния под углом $\Theta=90^\circ$ (I_p) из соотношения $I_p = I_1 V \Phi^2(\rho_1)$, где I_1 — интенсивность релеевского рассеяния частиц данного объема v [1, 2], v — наблюдаемый объем рассеивающей среды, $\Phi^2(\rho_1)$ — усредненное за один оборот образца значение фазовой функции (рис. 3).

Описанная методика применялась при изучении процессов выделения в ЩГ монокристаллах [3-5], трещинообразовании при пластической деформации и ряде других исследований.

Литература

- [1] К. С. Шифрин. Рассеяние света в мутной среде. ГИТТЛ, М., 1951.
- [2] Г. ван де Хюлст. Рассеяние света малыми частицами, ИЛ, М., 1961.
- [3] Я. Е. Гегузин, В. Г. Кононенко. ФТТ, 14, 2513 1972.
- [4] В. Г. Кононенко, В. Хайхлер, В. М. Балабан. УФЖ, 23, 792, 1978.
- [5] В. Г. Кононенко, В. Хайхлер. УФЖ, 23, 1261, 1978.

Поступило в Редакцию 7 августа 1979 г.
В окончательной редакции 16 февраля 1981 г.