

## СПОСІБ ВИЗНАЧЕННЯ ПАРАМЕТРА РЕШІТКИ КУБІЧНИХ КРИСТАЛІВ

*Моїсеєнко Л.Л.,*

*Херсонська державна морська академія*

*В роботі наведений простий спосіб визначення параметра решітки кубічних кристалів, що ґрунтується на вимірюванні взаємного відносного кутового положення двох сусідніх інтерференційних рефлексів, які відповідають різним індексам інтерференції рентгенівських променів.*

*Визначені запропонованим способом параметри решіток кубічних додекаборидів РМЗ відповідають літературним джерелам, що підтверджує правильність методики та доцільність її використання в якості експрес метода для промислових лабораторій через легкість експерименту.*

*Ключові слова: параметр решітки, кубічні кристали, дифрактограми, інтерференційні рефлекси, додекабориди РЗМ, рентгенівська установка.*

**Вступ і постановка задачі.** В роботі приведена методика спрощеного експрес-методу визначення параметра (періоду) решітки кубічних кристалів.

Відомі існуючі способи [1] визначення параметра решітки  $\alpha$  кубічних кристалів ґрунтуються на визначенні положення дифракційної лінії відносно початку відліку або лінії еталона. Зазначений спосіб визначення параметра решітки по положенню дифракційної лінії відносно початку відліку має низку недоліків, що приводять до значних похибок.

Застосування еталону ускладнює експеримент і потребує додаткових затрат часу.

Спосіб визначення параметра решітки кубічних кристалів, що пропонується в даній роботі, ґрунтується на вимірюванні взаємного відносного кутового положення двох сусідніх інтерференційних рефлексів, які відповідають різним індексам інтерференції рентгенівських променів, що дифраговані досліджуваною речовиною.

**Результати дослідження.** Для цього на рентгенівській установці (скажімо, УРС-50И з використанням гоніометра ГУР-3) в межах великих кутів дифракції ( $\Theta > 60^\circ$ ) записується ділянка дифрактограми (рис. 1) від двох сусідніх рефлексів (наприклад,  $hkl$ : 642 і 731) і потім вимірюється відстань між ними, що відповідає різниці дифракційних кутів:

$$\Delta\Theta = \Theta_{731} - \Theta_{642}.$$

Для кожного із зазначених кутів відбиття можна записати ще два рівняння типу:

$$\frac{2a \sin \Theta_i}{\sqrt{h_i^2 + k_i^2 + l_i^2}} = \lambda_{\alpha 1}$$

де  $a$  – період решітки досліджуваного кубічного кристалу,  $\lambda_{\alpha 1}$  – довжина хвилі  $\alpha_1$ -випромінювання,  $\Theta_i$  – кут дифракції, що відповідає індексам  $h_i k_i l_i$ .

Сумісне рішення приведених рівнянь дозволило одержати вираз для параметра решітки, в який входить різниця кутів відбиття  $\Delta\Theta$ :

$$a = \frac{\lambda_{\alpha 1} N_{i+1}}{2 \cdot \sqrt{\frac{\sin^2 \Delta\Theta}{\sin^2 \Delta\Theta + (N_{i+1} \cos \Delta\Theta - N_i)^2}}},$$

де  $N_i = \sqrt{h_i^2 + k_i^2 + l_i^2}$ ,

$N_{i+1} = \sqrt{h_{i+1}^2 + k_{i+1}^2 + l_{i+1}^2}$ , (наприклад,  $h_i k_i l_i = 642$ ,  $h_{i+1} k_{i+1} l_{i+1} = 731$ ).

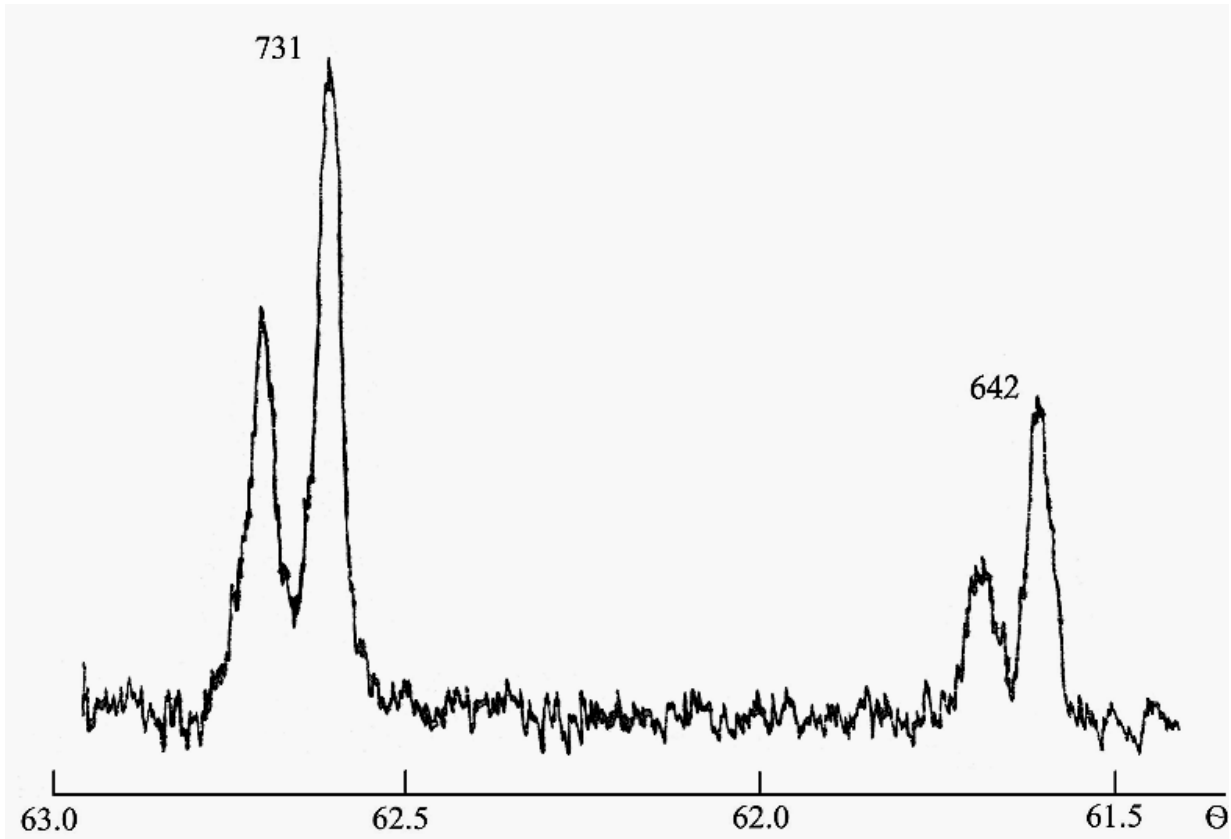


Рисунок 1 – Ділянка дифрактограми  $MeV_{12}$  в  $CoK_{\alpha}$  – випромінюванні.

Похибки у визначенні відстані  $\Delta\Theta$  між дифракційними лініями за способом, що пропонується, майже на два порядки менше, ніж при визначенні положення дифракційної лінії відносно початку відліку, наприклад:

а) при відхиленні поверхні зразка від поверхні, що фокусує:

$$\delta\Theta \sim C \operatorname{ctg} \Theta, \quad \delta(\Delta\Theta) = \Delta(\delta\Theta) \sim \frac{\sin \Delta\Theta}{\sin^2 \Theta},$$

$$\frac{\delta(\Delta\Theta)}{\delta\Theta} = \frac{2 \sin \Delta\Theta}{\sin 2\Theta}.$$

При  $\Theta = 60^\circ$  і  $\Delta\Theta = 1^\circ$   $\frac{\delta(\Delta\Theta)}{\delta\Theta} = 0,04$ ;

б) при зміщенні площини зразка від осі гоніометра:

$$\delta \Theta \sim \cos \Theta, \quad \delta(\Delta\Theta) \sim 2 \sin \Theta \cdot \sin \frac{\Delta\Theta}{2},$$

$$\frac{\delta(\Delta\Theta)}{\delta \Theta} = 2 \sin \frac{\Delta\Theta}{2} \cdot \operatorname{tg} \Theta; \quad \frac{\delta(\Delta\Theta)}{\delta \Theta} = 0,03;$$

в) внаслідок поглинання рентгенівських променів у зразку:

$$\delta \Theta \sim \sin 2\Theta, \quad \delta(\Delta\Theta) \sim 2 \cos 2\Theta \cdot \sin \Delta\Theta,$$

$$\frac{\delta(\Delta\Theta)}{\delta \Theta} = 2 \operatorname{ctg} \Theta \cdot \sin \Delta\Theta; \quad \frac{\delta(\Delta\Theta)}{\delta \Theta} = 0,02.$$

Аналогічні оцінки одержані і для інших систематичних похибок.

Визначені за пропонованим способом параметри решіток кубічних кристалів добре узгоджуються з літературними даними [2] на прикладі кубічних додекаборидів рідкоземельних металів (РЗМ) – таблиця 1. Зйомка дифрактограми здійснювалась в кобальтовому (фільтр *Fe* товщиною 20 мкм) випромінюванні на установці УРС-50И в камері РКД-57.

Таблиця 1 – Періоди решіток кубічних додекаборидів РЗМ

Кристал	Період решітки, Å	
	за способом, що пропонується в роботі	за літературними даними [2]
YB <sub>12</sub>	7,503	7,500
TeB <sub>12</sub>	7,505	7,504
DyB <sub>12</sub>	7,499	7,501
HoB <sub>12</sub>	7,495	7,492
ErB <sub>12</sub>	7,484	7,484
TmB <sub>12</sub>	7,476	7,476
YbB <sub>12</sub>	7,471	7,469
LuB <sub>12</sub>	7,463	7,464

**Висновки.** Запропонований спосіб дозволяє спростити процес визначення параметра решітки кубічних кристалів, зменшити вплив різних похибок на кінцевий результат, виключити додаткові труднощі при роботі з еталоном.

Даний метод можна рекомендувати в якості експресного для промислових лабораторій.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Русаков А. А. Рентгенография металлов / А. А. Русаков – М. : Атомиздат, 1977. – 480 с.
2. 2 La Placa S., Binder J., Post B. Binary dodecaborides. – J. Inorg. Nucl. Chem. – 1961. – v. 18, № 4. – p. 113-118.

**Мойсеенко Л.Л. СПОСОБ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРА РЕШЕТКИ КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ**

*В работе приведен простой способ определения параметра решетки кубических кристаллов, основанный на измерении взаимного относительного углового положения двух соседних интерференционных рефлексов, соответствующих разным индексам интерференции рентгеновских лучей.*

*Определенные предложенным способом параметры решеток кубических додекаборидов РЗМ хорошо согласуются с литературными данными, что подтверждает правильность методики и целесообразность её использования в качестве экспрессного метода для промышленных лабораторий ввиду простоты эксперимента.*

*Ключевые слова: параметр решетки, кубические кристаллы, дифрактограммы, интерференционные рефлексы, додекабориды РМЗ, рентгеновская установка.*

**Moyseenko L.L. METHOD FOR DETERMINING THE PARAMETER OF CUBIC CRYSTALS LATTICE**

*Simple method for determining the parameter of cubic crystals lattice based on measuring mutual relative angle position of two adjacent interference reflexes that correspond to different indexes of x-rays interference is considered.*

*Parameters of RZM cubic dodecaborids lattice determined with the proposed method are in good conformity with literary data proving the methodology accuracy and suitability of application as an express method for industry laboratories because of the experiment simplicity.*

*Keywords: lattice parameter, cubic crystals, diffraction patterns, interference reflexes, dodecaborids RZM, X-ray unit.*