

С. И. Деменко, Г. М. Рылов

(Новосибирск)

ОСОБЕННОСТИ ОРИЕНТИРОВАНИЯ СИНТЕТИЧЕСКИХ
КРИСТАЛЛОВ БОРАТА ЛИТИЯ LiB_3O_5 (LBO)

Проведена идентификация естественных граней кристаллов LiB_3O_5 . Выявлены особенности рентгеновской дифракции от кристаллографических плоскостей. Измерены постоянные решетки для одного из кристаллов.

Синтетические монокристаллы LBO (пр. гр. $R\bar{3}m$) являются перспективными нелинейно-оптическими материалами для преобразования излучения YAG:Nd-лазера мощностью до 20 ГВт/см² во вторую и третью гармоники. В процессе изготовления оптических элементов перед разработчиками стоит несколько задач: ориентирование булы по кристаллографическим осям, определение оптического качества кристалла, изготовление элемента и его испытания. При ориентировании булы по кристаллографическим осям первоначально необходимо провести идентификацию естественных граней. Исследуемые образцы не имели четко выраженного габитуса, что не позволило определить естественные грани по их внешним углам. Поэтому идентификация граней проводилась рентгеновскими методами.

Эксперименты проводились на опытных образцах кристаллов LBO. На дифрактометре ДРОН-2.0 (излучение $\text{Cu } K\alpha$) осуществлялось измерение дифрактограмм естественных граней и полированных поверхностей кристаллических булы с последующим их индцированием. Предварительно измерялись внешние углы между двумя-тремя естественными гранями.

Тщательное исследование отраженного рентгеновского излучения от имеющих немногочисленных естественных граней и полированных поверхностей, близких к кристаллографическим плоскостям, показало, что значения некоторых межплоскостных расстояний (d/n) весьма близки между собой. Не имея информации об абсолютных значениях интенсивностей рефлексов, можно достаточно легко ошибиться при определении ориентации кристаллов. Чтобы преодолеть эту трудность, была рассчитана полная рентгенограмма LBO для медного излучения с использованием координатных параметров из [1]. На ЭВМ были рассчитаны межплоскостные расстояния, углы дифракции, интенсивности $I_{\text{выч}}$ и структурные амплитуды $F_{\text{выч}}$ индексов для всех hkl в пределах значения $\sin\Theta/\lambda$ от 0,1 до 1,28. Таким образом, были найдены указанные характеристики для всех порядков отражений, важных для определения индексов и ориентировки в целом. В таблице приведены данные для двух серий

hkl	2Θ , град	$F_{\text{выч}}$	hkl	2Θ , град	$F_{\text{выч}}$
002	24,10	10,8	201	24,23	19,0
004	49,35	6,2	402	49,64	10,6
006	77,54	2,8	603	78,05	11,0
008	113,22	1,9	804	114,18	7,9

отражений (00 l) и ($h0l$), имеющих близкие углы дифракции. Используя вычисленные значения $I_{\text{выч}}$ и $F_{\text{выч}}$ для нескольких порядков отражений, можно идентифицировать рефлексы 002 и 201. Аналогичные пары представляют собой отражения 200 и 011, 102 и 210 и их порядки. Их также легко идентифици-

ровать, имея по ним все характеристики.

Точность измерения угла 2Θ , определяемая паспортными характеристиками приборов, составляла $0,03^\circ$, а разброс значений при многократных измерениях — $\pm 0,0025^\circ$. При использовании статистических методов снижения ошибок измерений удалось достичь погрешности $\Delta(2\Theta) \approx 0,01^\circ$. В качестве эталона использовался кристалл оптического кварца. Поправка на преломление рентгеновских лучей в кристалле, составляющая от $0,0018$ до $0,009^\circ$, не учитывалась. Отклонение естественных и полированных плоскостей от кристаллографических составляло от 2 до $10'$, что может вносить поправку только в 4-й знак после запятой.

Дифрактограммы естественных граней были четырех типов. Используя теоретические дифрактограммы и анализируя интенсивности отражений, однозначно были идентифицированы грани, соответствующие плоскостям графической плоскостью, не имеющей запрещений на отражение в данной пространственной группе. Таким образом, были идентифицированы грани, соответствующие плоскостям $\{011\}$, $\{210\}$ и $\{111\}$.

При измерении дифрактограмм было замечено, что угол 2Θ для одних и тех же кристаллографических плоскостей, но для кристаллов из разных опытов заметно меняется. Так, для плоскостей (001) (отражение 002) разброс двойного угла дифракции 2Θ составил $0,032^\circ$. Это объясняется тем, что кристаллы выращивались в различных технологических условиях. В связи с этим для одного из кристаллов были определены постоянные решетки, использованы естественные грани, максимально близкие ($< 2'$) к плоскостям (011), (210) и (111), а также отражения 022, 210 и 111 и их порядки. Так как применялось немонахроматическое излучение (K_α), то длина волны рентгеновского излучения была принята $\lambda = 0,154178$ нм, как рекомендовано в [2]. Было получено: $a_0 = 8,47_0$, $b_0 = 5,14_3$, $c_0 = 7,41_6$ (по данным работы [1] $a_0 = 8,46_0$, $b_0 = 5,13_3$, $c_0 = 7,38_6$).

Авторы считают своим приятным долгом выразить признательность Л. И. Исаенко за предоставленные образцы опытных кристаллов бората лития.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. König H., Hoppe R. Zur Kenntnis von LiB_3O_5 // Z. anorg. allg. Chem.—1988.—439.—S. 71.
2. Бонд В. Л. Технология кристаллов.—М.: Недра, 1980.

Поступила в редакцию 14 октября 1992 г.