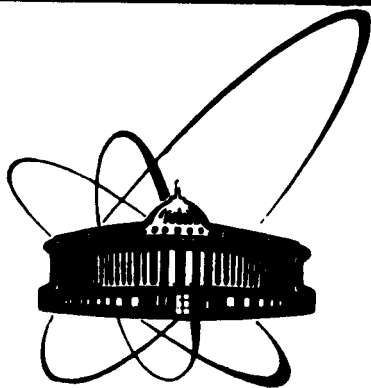


90-406



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P14-90-406

**Г.И. Доливо-Добровольская, В.Д. Коломенский,
В.П. Перелыгин, С.Г. Стеценко**

**СВЕРХСТРУКТУРА В СДВОЙНИКОВАННЫХ
КРИСТАЛЛАХ**

Направлено в журнал "Приборы и техника эксперимента"

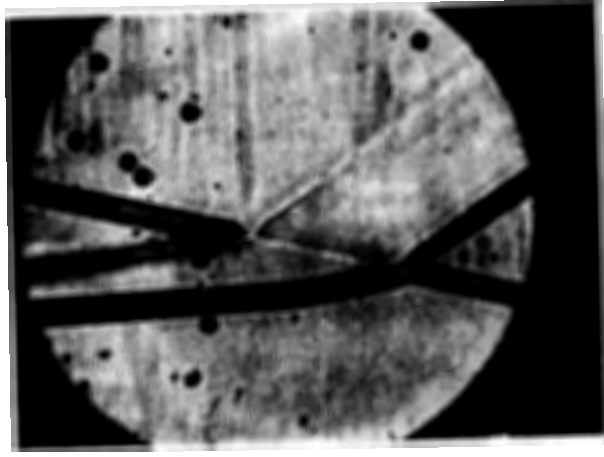
1990

Двойникование относится к числу явлений, часто наблюдаемых как в природных, так и в синтезированных кристаллах. За редким исключением /1,2/, двойники являются браком, снижающим ценность оптических, полупроводниковых и магнитных кристаллов. Наличие двойников вызывает переориентацию кристаллографических плоскостей и направлений, в связи с чем искажается заданная схема раскроя кристалла на рабочие заготовки будущих деталей. Переориентация двойника создает анизотропию прочностных свойств, что в свою очередь приводит к появлению "ступенек" при шлифовке, полировке и химическом травлении (рис. 1а, б).

Для таких материалов, как твердый раствор $Ge-Si$, селенид цинка и другие соединения со структурой типа алмаза и сфалерита, выращивание монокристаллов, свободных от двойниковых прослоев или вростков, остается нерешенной задачей. В связи с этим нами были проведены исследования по геометрической расшифровке ориентации сдвойникованных кристаллов кубического класса с целью выявления закономерностей многократного двойникования /3/. При этом было обнаружено неизвестное ранее свойство: существование совокупности кристаллографических плоскостей и направлений, обладающих одинаковой пространственной ориентацией как в матричном, так и в двойниковых индивидах. Совокупность этих плоскостей создает сверхструктуру, пронизывающую весь объем сдвойникованной булы, например кремния.

Возникновение сверхструктуры происходит вследствие того, что при двойниковании по наиболее распространенным законам $6'/m'm'm'$ и $2'/m$ /4/ некоторая часть плоскостей рациональных символов - таких, как $\{111\}$, $\{211\}$, $\{110\}$, $\{113\}$, - сохраняет свое пространственное положение параллельным с матричным кристаллом. Эта закономерность была обнаружена при выводе набора новых ориентаций индивидов по отношению к матричному кристаллу при двойниковании 1-го, 2-го и 3-го порядка. Оказалось, что часть плоскостей и направлений совпадает по своим сферическим координатам вплоть до III порядка двойникова-

а



б

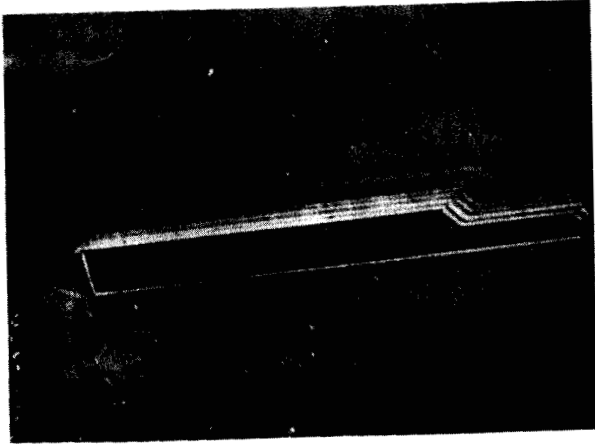


Рис.1. Двойники в синтетическом теллуриде кадмия (а) и в полупроводниковом кремнии (б). Интерференционный контраст в проходящем (а) и отраженном (б) свете. Увеличение 230X.

Таблица 1

Преобразование символов плоскостей (111) и (011) матричного кристалла при двойниковании первого, второго и третьего порядка

Порядок двойнико- вания	Двойниковые символы плоскостей	
	(111)	(011)
I	111 , 115	011 , 114
II	111 , 115 , 1.11.11, 5.7.13	011 , 114 , 778 , 5.4.11
III	111 , 115 , 1.11.11 , 5.7.13 , 1.31.35 , 13.13.43 , 7.17.43 , 11.29.45 , 17.23.37	011 , 114 , 778 , 5.4.11 , 5.8.37 , 23.23.28 , 8.13.35 , 16.19.29 , 7.25.28

Таблица 2

Координаты плоскостей сверхструктуры для всех кристаллов кубического класса симметрии.

Ориентация матрицы по /111/

№ плоскости	Символы		Координаты	
	Матрица	Двойник	Долгота	Широта
1	01 $\bar{1}$	01 $\bar{1}$	00°00	90°00
2	0 $\bar{1}$ 1	0 $\bar{1}$ 1	180°00	90°00
3	111	$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$	270°00	70°32
4	211	211	90°00	19°28
5	110	110	30°00	35°16
6	101	101	150°00	35°16
7	12 $\bar{1}$	12 $\bar{1}$	19°06	61°53
8	112	1 $\bar{1}$ 2	160°54	61°53
9	113	3 $\bar{1}\bar{1}$	210°00	29°30
10	131	31 $\bar{1}$	330°00	29°30
11	3 $\bar{1}\bar{1}$	113	120°00	58°31
12	31 $\bar{1}$	1 $\bar{1}$ 3	60°00	58°31
13	$\bar{1}$ 3 $\bar{1}$	11 $\bar{3}$	330°00	79°58
14	1 $\bar{1}$ 3	1 $\bar{3}$ 1	210°00	79°58

ния (таблица 1). Расчет полярных координат основных плоскостей и направлений в двойниках I, II, III порядка проводился с использованием формул, приведенных в /5,6/:

$$\cos \rho = \frac{Hh + Kk + Ll}{(H^2 + K^2 + L^2)^{1/2} \cdot (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}}, \quad (1)$$

$$\begin{pmatrix} h_2 \\ k_2 \\ l_2 \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} h_1 \\ k_1 \\ l_1 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

$$\left. \begin{aligned} h_2 &= (H^2 + K^2 + L^2)h_1 - 2H(Hh_1 + Kk_1 + Ll_1), \\ k_2 &= (H^2 + K^2 + L^2)k_1 - 2K(Hh_1 + Kk_1 + Ll_1), \\ l_2 &= (H^2 + K^2 + L^2)l_1 - 2L(Hh_1 + Kk_1 + Ll_1), \end{aligned} \right\} (3)$$

где h_1, k_1, l_1 - индексы символа плоскости матричного кристалла; h_2, k_2, l_2 - индексы символа плоскости в двойниковом кристалле, HKL - символ плоскости двойникования.

Изменение символа плоскости в двойниковом положении означает, что данная плоскость в двойнике принимает новую ориентировку. Так, например, плоскость (111) в двойнике I порядка примет ориентацию (511), (011) - (114), а (001) - (221). В двойнике II порядка эти же плоскости займут положения, соответствующие символам (1.11.11), (778), (148), и другие. В двойниках III порядка набор возможных ориентировок, описываемых уже символами высоких индексов, увеличится еще больше (таблица 1).

Переориентировка двойниковых индивидов, включая и определение новых символов, была частично расшифрована в ряде работ /1,2,5-8/, од-

нако вывод и расчет новых ориентаций включал не все плоскости основных семейств, то есть не все восемь граней семейства $\{111\}$, или двенадцать граней семейства $\{110\}$, или двадцать четыре грани семейства $\{112\}$. В наших расчетах мы рассматривали каждую грань каждого семейства. В итоге было обнаружено, что четыре грани из семейства $\{110\}$ не превращаются в $\{114\}$, а остаются принадлежащими к $(01\bar{1})$, $(0\bar{1}1)$, (110) и (101) ; одна грань из семейства $\{111\}$ не превращается в $\{115\}$, а остается $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$, три грани из семейства $\{112\}$ продолжают принадлежать к (211) , $(12\bar{1})$ и $(1\bar{1}2)$ и т.д. Перечень сохраняющих свое положение граней, а также их полярные координаты приведены в таблице 2. Аналогичное свойство сверхструктуры экспериментально обнаружено нами в кристаллах тригональной и гексагональной симметрии (апатит, витлокит, кальцит). Практическое значение найденной закономерности состоит в том, что появляется возможность использовать сдвойникованные кристаллы для изготовления рабочих блоков приборов, вырезая их вдоль плоскостей сверхструктуры /3/. Набор плоскостей сверхструктуры достаточно велик, особенно для двойников I порядка, что создает возможность использования альтернативных схем раскрытия. Близость физико-химических характеристик (скорости травления, прочности) позволяет применять свойство сверхструктуры при выявлении треков осколков спонтанного деления или треков ядер группы Fe в сдвойникованных кристаллах внеземного происхождения (кварц, апатит, витлокит, слюды).

Литература

1. Матаре Г. Электроника дефектов в полупроводниках. М., Мир, 1974.
2. Kohn J.A. Twinning in Diamond-Type Structure: High-Order Twinning in Silicon. Amer. Mineralogist, 41, N 9/10, 778-784 (1956).
3. Доливо-Добровольская Г.И. и др. В сб.: XXI Всесоюзная метеоритная конференция. Тезисы докладов. М.: Наука, 1990, с.60.
4. Мокиевский В.А. Группы симметрии двойников. Проблема кристаллохимии минералов и эндогенного минералообразования. Наука., Л., 1967.
5. Andrews K.W., Jonson W. Brit. J. Appl. Phys., V.6, p.92, 1955.
6. Келли А., Грове Г. Кристаллография и дефекты в кристаллах. М., Мир, 1974.
7. Доливо-Добровольская Г.И., Смирнов Ю.М. Морфологические особенности кристаллов системы германий-кремний. Известия АН СССР, сер. Неорган. мат-лы, т.11, № 7, 1975.
8. Чащинов Ю.М., Доливо-Добровольская Г.И., Мокиевский В.А. Закономерности многократного двойникования. Записки Всес. минер. об-ва, ч.106, вып.3, 1977.

Рукопись поступила в издательский отдел
11 июня 1990 года.