

# Компьютерное моделирование дифракционных рефлексов по методу Лауэ в гранецентрированной кубической решетке алмаза

Ю. Н. Потрахов<sup>1</sup>, И. М. Баранов<sup>2</sup>, А. Ю. Грязнов<sup>3</sup>

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет  
«ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

<sup>1</sup>yus87@yandex.ru, <sup>2</sup>ibaranov86@gmail.com, <sup>3</sup>ay-gryaznov@yandex.ru

**Аннотация.** В кристаллографии метод Лауэ используется для определения типа решетки монокристалла и для определения направления роста монокристалла. Неподвижный монокристалл облучается узким пучком рентгеновского излучения с непрерывным спектром. Определенные длины волн данного спектра рассеиваются на плоскостях монокристалла, которые удовлетворяют условиям Вульфа–Брегга. Рассеянное рентгеновское излучение в виде пятен (рефлексов) фиксируется на приемнике рентгеновского излучения. По расположению данных рефлексов производится анализ исследуемого монокристалла. В работе рассмотрен процесс формирования рефлексов гранецентрированной кубической решетки алмаза с использованием программного комплекса «Компас 3Д», с последующим анализом полученных смоделированных результатов в специализированной компьютерной программе «КРОС». Приведено сравнение полученных смоделированных результатов с реальными исследованиями, полученными на многофункциональной передвижной рентгеновской установке ПРДУ (IV исполнение).

**Ключевые слова:** рентгеновское излучение; метод Лауэ; кристаллография; монокристалл

## I. ВВЕДЕНИЕ

Кристаллографией называют науку, занимающуюся изучением свойств и строения как одиночных кристаллов, так и кристаллических агрегатов. Исторически кристаллография возникла в рамках минералогии, как наука, описывающая идеальные кристаллы. Кристаллы отражают способ упорядоченного закономерного расположения элементарных частиц (атомов, ионов, молекул) вещества, из которых они состоят, что определяет их правильную геометрическую внешнюю форму.

Современная кристаллография включает учения о внешней форме кристаллов (геометрическая кристаллография), об атомно-молекулярном строении кристаллов специальными методами рентгеноструктурного анализа, электронографии, нейтронографии (структурная кристаллография), об их физических свойствах (физическая кристаллография), о составе кристаллических веществ (кристаллохимия), теорию кристаллогенезиса – образования кристаллов [1].

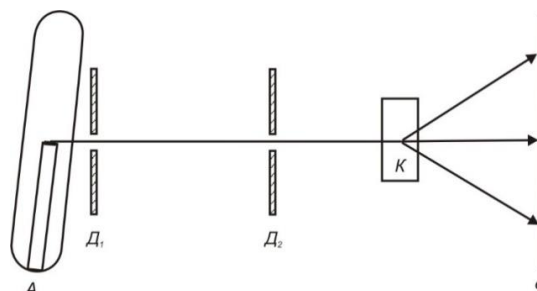


Рис. 1. Схема опыта Лауэ

Первую рентгенограмму от монокристалла, доказывающую электромагнитную природу рентгеновских лучей и демонстрирующую их дифракцию в кристалле, получил Макс фон Лауэ с сотрудниками в 1912 году. Схема их установки показана на рис. 1. Рентгеновские лучи, испускаемые анодом трубки А, проходят сквозь отверстия диафрагм  $D_1$  и  $D_2$  и падают на кристалл К. За кристаллом расположена фотопластинка Ф. Фотография, полученная при помощи установки такого рода, была названа лауэграммой, а метод ее получения – методом Лауэ. Кроме центрального пятна, являющегося следствием падения на фотопластинку первичного пучка, лауэграмма содержит систему пятен от лучей, дифрагированных кристаллом (рис. 2). Расположение пятен на лауэграмме зависит от структуры кристалла и от того, как ориентированы различные атомные плоскости относительно первичного пучка.

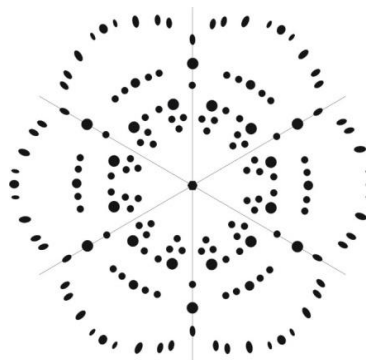


Рис. 2. Схема ориентированной лауэграммы гексагонального кристалла берилла (ось симметрии шестого порядка направлена вдоль первичного пучка).

Таким образом, метод Лауэ является первым методом рентгеноструктурного анализа, а лауэграмма – первой рентгенограммой, полученной от неподвижного кристалла в полихроматическом излучении на плоскую пленку. Основная область применения метода Лауэ – это определение симметрии и ориентировки кристалла. Съемка, анализ и интерпретация лауэграммы являются исходными пунктами структурного исследования, так как позволяют экспрессно и наглядно оценить степень совершенства кристалла, получить представления о его сингонии и виде симметрии и определить направления главных кристаллографических осей [2].

## II. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Для проведения рентгеноструктурного анализа на кафедре ЭПУ разработана многофункциональная передвижная рентгеновская установка ПРДУ. Установка предназначена для быстрого радиационно-безопасного рентгеновского исследования монокристаллических образцов и других объектов.

Аппаратура позволяет экспрессно измерять ориентацию кубических кристаллов. Для определения разориентации субзерен выполняются съемки на различных участках поверхности монокристаллических образцов. Внешний вид установки представлен на рис. 3.

Общий принцип действия установки заключается в том, что объект исследования размещается внутри рентгенозащитной камеры. Оператор подбирает параметры (режим съемки) в соответствии с особенностями объекта исследования (анодное напряжение до 30 кВ, анодный ток до 10 мА). После запуска исследования происходит генерация рентгеновского излучения (РИ). Принцип действия источника РИ основан на классическом принципе генерации ионизирующего излучения рентгеновской трубкой под действием постоянного высокого напряжения. Установка представляет собой устройство для регистрации обратной лауэграммы (эпиграммы) – дифракционной картины, получаемой при освещении неподвижного монокристалла полихроматическим первичным пучком. С этой целью узкий параллельный пучок излучения от рентгеновской трубки направляется в выбранную точку поверхности образца. Возникающее рассеянное излучение регистрируется двумерным позиционно-чувствительным детектором на основе экрана с фотостимулируемым люминофором (ФСЛ).



Рис. 3. Внешний вид изделия: 1 – панель управления, 2 – рентгенозащитная камера, 3 – информационная шильда, 4 – система перемещения (СП) стола, 5 – СП источника РИ, 6 – источник РИ, 7 – предметный стол, 8 – панель управления СП и лазерными указателями

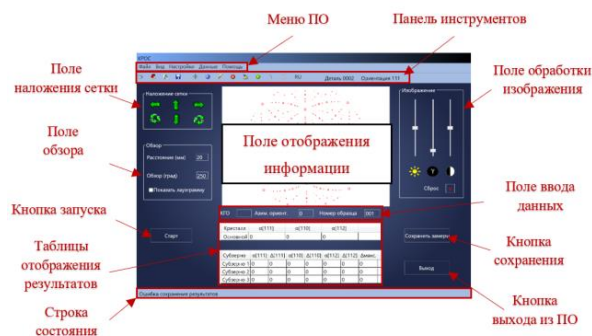


Рис. 4. Внешний вид ПО «КРОС»

По завершению дифракционная картина переводится в цифровой формат на сканере высокого разрешения и далее обрабатывается посредством специализированного программного обеспечения (ПО). Специализированное ПО проводит автоматическую обработку обратной лауэграммы (распознавание рефлексов, измерение их координат, построение стереограммы) и выводит результат. В процессе работы программа автоматически совмещает полученную стереограмму с фрагментом стандартной сферической проекции кубической решетки и создает матрицу ориентации кристалла в приборных координатах XYZ.

В режиме определения разориентации субзерен программа по аналогичным матрицам ориентации субзерен автоматически вычисляет угол разориентации основного кристалла и субзерна в форме единственного (минимального) угла поворота и соотношения индексов HKL оси этого поворота, также могут быть найдены разориентации с тремя субзернами. Внешний вид программы представлен на рис. 4.

Специалистами кафедры ЭПУ было предложено смоделировать процессы формирования рефлексов при проведении рентгеноструктурного анализа алмаза.

При облучении кристалла рентгеновским излучением происходит дифракция на пространственной решетке – рассеивание электромагнитной волны от системы параллельных плоскостей кристалла, то есть плоскостей, в которых лежат узлы кристаллической решетки.

Дифракция возможна при соблюдении условия Вульфа–Брэгга, межплоскостные расстояния алмаза рассмотрены в [5].

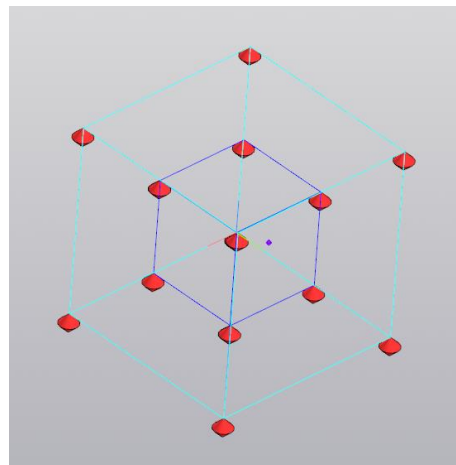


Рис. 5. Смоделированная элементарная ячейка алмаза

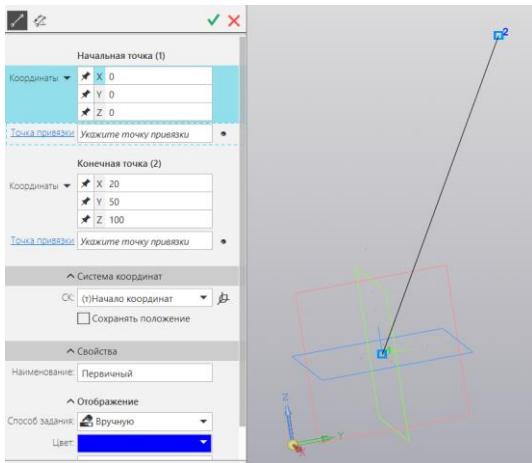


Рис. 6. Процесс построения первично пучка рентгеновского излучения

Для моделирования процесса формирования дифракционных рефлексов в программном комплексе «Компас 3Д» для наглядности строим элементарную ячейку алмаза (рис. 5).

В «Компас 3Д» существует возможность построить отрезок, соединяющий две координаты, и таким образом задать первичный пучок рентгеновского излучения (рис. 6).

Следующим шагом является построение отражения (дифракции) первичного пучка и проецирование отраженного луча на плоскость перпендикулярную первичному пучку, находящуюся на некотором расстоянии от начала координат (рис. 7).

Аналогичным образом строятся рефлексы для основных плоскостей дифракции гранецентрированной решетки. Дополнительно строятся симметричные рефлексы (рис. 8).

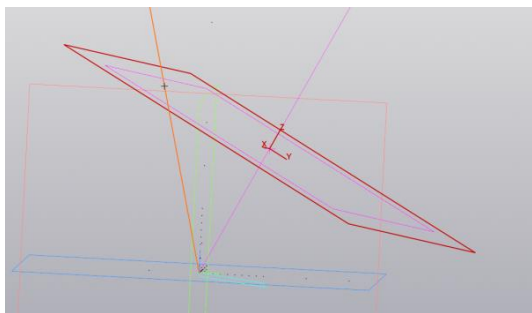


Рис. 7. Процесс построения рефлекса на условной плоскости, перпендикулярной плоскости первичного пучка РИ

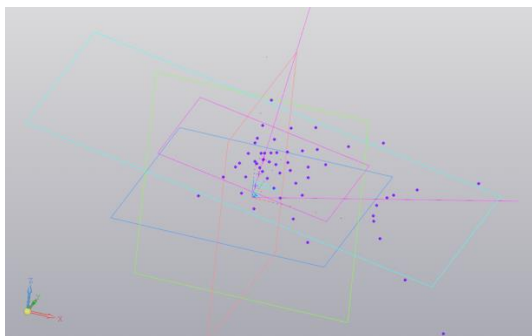


Рис. 8. Построение основных рефлексов в «Компас 3Д»

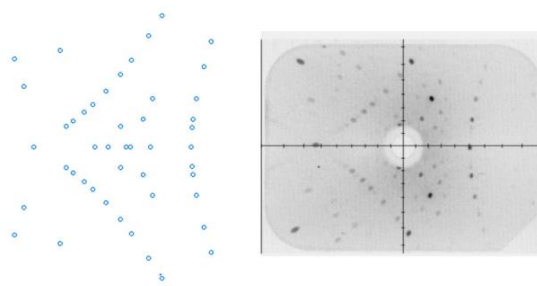


Рис. 9. Сравнение смоделированных изображений с реальными эпиграммами

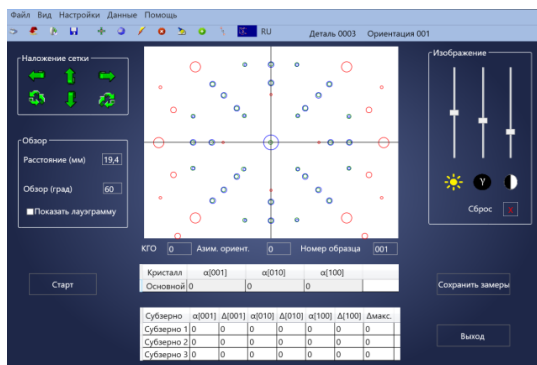


Рис. 10. Обработка смоделированных изображений в специализированной программе KROS

Смоделированные дифракционные рефлексы были преобразованы в графический вид для дальнейшего сравнения с реальными эпиграммами (рис. 9) и обработки в специализированной программе «KROS» (рис. 10).

### III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Описаны процессы формирования дифракционных рефлексов в гранецентрированной кристаллической решетке, разработан алгоритм геометрического построения дифракционных рефлексов в гранецентрированной кристаллической решетке с помощью программного комплекса «Компас 3Д». Используя данный алгоритм построения дифракционных рефлексов, можно смоделировать эпиграмму, получаемую на реальной рентгенодиагностической установке.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Черкасова Т.Ю. Основы кристаллографии и минералогии: учеб. пособие. Томск: Изд-во Томского Политехнического университета, 2014. 207 с.
- [2] Потрахов Н.Н., Лифшиц В.А., Потрахов Е.Н., Грязнов А.Ю., Бессонов В.Б., Жамова К.К. Методы исследования кристаллической структуры вещества: учеб. пособие. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2013. 32 с.
- [3] Словохотов Ю.Л. Материалы по курсу кристаллохимии. Часть 2. Кристаллические решетки и пространственные группы. Баку, 2012. 33 с.
- [4] Орлов Ю.Л. Минералогия алмаза. Изд. 2-е. М.: Наука, 1984. 170 с.
- [5] Горелик С.С., Расторгуев Л.Н., Скаков Ю.А. Рентгенографический и электронно-оптический анализ. Изд. 2-е. М.: Изд-во «Металлургия», 1970. 366 с.