

# Олон мөхлөгтэй кристаллын дифракцын пикийн давхцалын зэргийг тооцоолох

Н.Төвжаргал, Э.Номин-Эрдэнэ, Ж.Даваасамбуу\*

МУИС, Шинжлэх Ухааны Сургууль, Физикийн тэнхим

## ОРШИЛ

Поликристаллын дифракцын хэмжилтийн үр дүнг мөхлөг тус бүрээр нь ангилж боловсруулахад тавигдах үндсэн хязгаарлалт нь мөхлөгүүдийн пикийн давхцалын зэрэг юм. Иймд мөхлөгүүдийн дифракцын пикийн давхцалын зэрэг мөхлөгийн тоо, туршилтын геометр болон кристалл системийн бүтцийн параметруудээс хэрхэн хамаардаг болохыг тооцоолох шаардлагатай.

Тооцооллын програмуудад дифракцын геометрийг идеалчилах хэрэгтэй болдог. Үүнд: энергийн тархалт болон дивергенцгүй монохроматик цацраг байх, эргэлтийн төвөөс детектор хүртэлх зай бэхлэгдсэн байх, цацрагт перпендикуляр  $\omega$ -тэнхлэгийг тойрон тодорхой алхмаар эргэж байгаа дээжийн хувьд дифракцын өгөгдлийг үүсгэдэг.  $N$  тооны мөхлөгтэй нэг фазтай дээжийн хувьд (эхний хувилбар) тооцооллыг хийж байгаа бөгөөд дээж хэмжилтийн бүхий л хугацаанд цацрагаар бүрэн гэрэлтүүлэгдсэн байна. Дээжийн огторгуйн групп, торын параметрууд болон элементар тор дахь атомын байрлалууд оролтын файлд өгөгдсөн байх хэрэгтэй. Мөхлөгийн кристаллографийн чиглэлүүд санамсаргүйгээр үүсгэгдэнэ.

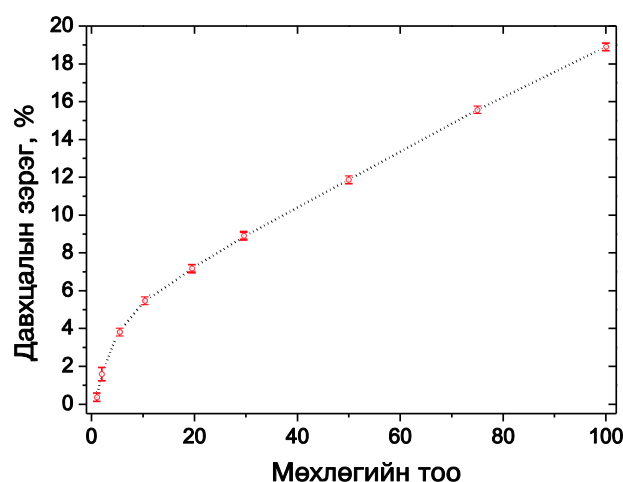
Мөн үүсгэх дифракцын пикийн хамгийн их  $\theta$  өнцөг оролтын файлд өгөгдсөн байх хэрэгтэй. Үүсэж буй дифракцын пикийн интеграл эрчим нь бүтцийн факторын квадратаар тодорхойлогдох бөгөөд лоренцын болон туйлшралын факторуудыг тооцохоор оролтын файлд тусгаж өгнө. Тооцоолол хийх оролтын файлд дээр дурдсан рентген цацрагийн энерги, дээж-детектор хоёрын хоорондох зайнаас гадна детекторын хэмжээ, пикселийн хэмжээ, детекторын төвийн байрлал, детекторын хазайлт,  $\omega$  өнцгийн эхлэл,

төгсгөл болон алхам, мөхлөгийн тоо, хэмжээ, пикүүд нь Гауссын функцийн хэлбэртэй байхаар загварчлан тусгасан. Бидний тооцооллын оролтын эхний файлууд нь 16bit TIF зурагны цуглуулга юм.

Хоёрдогч гаралтын файлууд нь тооцоолсон мөхлөгийн талаарх ерөнхий мэдээллийг агуулна. Мөхлөг тус бүрээр нь тухайн мөхлөгийн дугаар, хэмжээ, эзлэхүүн эйлерийн өнцгүүд болон чиглэл матрицийн талаарх боломжит бүх мэдээллийг тусгасан байна.

Үүнд: дифракцын пикийн дугаар, мөхлөгийн дугаар,  $h, k, l, F^2, \phi_1, \phi_2, 2\theta, \eta$ , детектор ( $y, z$ ), лоренцын фактор, туйлшралын фактор, интеграл эрчим,  $\sin \theta / \lambda$ .

Хавсралтанд оролтын файлд тусгагдах зарим параметруудийг жишээ болгон үзүүлэв. Дээрх тооцооллыг `simul_farfield` MATLAB программын тусламжтайгаар хийж гүйцэтгэсэн. Давхцалын зэрэг нь мөхлөгийн тоо нэмэгдэхэд мөн дээж-детектор хоорондох зай ихсэх тутам нэмэгдэнэ. Судалж буй дээжийн кристалл торын параметр их бол давхцалын зэрэг нь их байна.



Зураг. 1 TTF-SA кристаллын хувьд дифракцын пикийн давхцалын зэрэг мөхлөгийн тооноос хамаарах хамаарал.

\* Electronic address: [davaasambu@num.edu.mn](mailto:davaasambu@num.edu.mn)

Shell\_overlap MATLAB программын тусламжтайгаар дифракцын пикүүдийн хүрээүүдийн давхцалыг үнэллээ. Программд  $A$ ,  $dy$ ,  $dz$ ,  $d\omega$  параметрүүдийг зааж өгөх хэрэгтэй бөгөөд  $A$  нь simul\_farfield программын гаралтын матриц юм. Энэ матриц нь тооцоолсон рефлексүүдийн жагсаалт ба тэдгээрийн детекторын байрлалын талаарх мэдээллийг агуулна. 2 рефлексийг давхцаж буйн шалгуур нь  $dy$ ,  $dz$ ,  $d\omega$  параметрүүдээр тодорхойлогдоно. Хэрвээ 2 рефлексийн төвүүд  $dy$ ,  $dz$ ,  $d\omega$  –аас бага байвал тэдгээрийг давхцаж байна гэж үзнэ.  $dy$  нь детектор дахь  $y$ -ын дагуух зай (пиксел),  $dz$  нь детектор дахь  $z$ -ын дагуух зай (пиксел),  $d\omega$  нь омега-ын дагуух зай (градус) юм. Гаралтын файланд  $(2\theta/\lambda)^{-1}$ ,  $d[\text{Å}]$ , рефлексийн тоо, давхцаж буй рефлексийн эзлэх хувь тусгагдсан болно. Зураг.1-д TTF-CA кристаллын хувьд давхцалын зэрэг мөхлөгийн тооноос хэрхэн хамаарч байгааг харуулав.

## ТАЛАРХАЛ

Энэхүү ажлыг БСШУС Яам, ШУТС-гийн "Поликристаллын дифракцын аргыг хэрэглэх боломж" сэдэвт суурь судалгааны төслийн хүрээнд хийж гүйцэтгэв.

## НОМ ЗҮЙ

[1] H.F.Poulsen, Three-dimensional X-ray diffraction microscopy. Mapping polycrystals and their dynamics. (Springer Tracts in Modern Physics, v. 205), Berlin, 2004

- [2] S.Send, A.Aboud, N.Wiesner, M.Shokr, M.Klaus, Ch.Genzel, T.Conka-Nurdan, D.Schlosser, M.Huth, R.Hartmann, L.Strueder and U.Pietsch, J. Appl. Cryst., 49, 222-233, (2016)
- [3] J.Davaasambuu, P.Durand, S.Techert, J. Synchrotron Rad., 11, 483-489, (2004)
- [4] C.Blome, T.Tschentscher, J.Davaasambuu, P.Durand, S.Techert, J. Synchrotron Rad., 12, 812-819, (2005)
- [5] J.Hallmann, W.Morgenroth, C.Paulmann, J.Davaasambuu, Q.Kong, M.Wulff, S.Techert, J.Am.Chem.Soc., 131, 15018-15025, (2009)
- [6] S.Schmidt, Farfield Simulation Package, Risoe National Laboratory, Denmark, (2007), [http://fable.sourceforge.net/index.php/Farfield\\_Simulation](http://fable.sourceforge.net/index.php/Farfield_Simulation)
- [7] E.M. Lauridsen, S.Schmidt, R.M.Suter and H.F. Poulsen, J. Appl. Cryst. 34, 744-750, (2001)
- [8] S.Schmidt, <http://fable.sourceforge.net/index.php/Grainspotter>
- [9] J.Wright, <http://fable.sourceforge.net/index.php/ImageD11>
- [10] H.O.Soerensen, S.Schmidt, J.P.Wright, G.B.M.Vaughan S.Techert, E.F.Garman, J.Oddershede, J.Davaasambuu, K.S.Paithankar, C.Gundlach, H.F.Poulsen, Zeitschrift f. Kristallogr., 227, 63-78, (2012).

## Хавсралт: Оролтын зарим параметрүүд

% Experimental setup

Energy = 24.344

% Energy in keV

Lsam2det = 55.00

% sample-detector distance (mm)

dety0 = 1024.0

% beamcenter, y in pixel coordinates

dety0 = 1024.0

% beamcenter, z in pixel coordinates

pixelysize = 0.04677648

% Pixel size y (mm)

pixelzsize = 0.04808150

% Pixel size z (mm)

detysize = 2048.0

% detector y size (pixels)

detysize = 2048.0

% detector z size (pixels)

```
thetamax = 16.0                % Maximum theta angle for reflection generation

% Number of grains
grains = 10

mediangrainsize = 50.0        % Median grain size (diameter in microns) :
Default is 75 microns

% Unit cell parameters, space group information and structural parameters
% This present example is TTF-CA (Tetrathiafulvalene-chloranil)
cell = [7.23 7.60 14.51 90.00 99.40 90.00];    % [a(Å) b(Å) c(Å) alpha (deg) beta (deg) gamma (deg) ]
sgno = 14                % space group : P21/n1

%Structural info
atomparam(1).name = 'F';
atomparam(1).atomno = 9;
atomparam(1).pos = [0.30598 0.38512 0.07922];
atomparam(1).adp = [0.01455 0.02050 0.02320 0.00347 -0.00286 0.00464];
...
...
% Generate and calc SF or read list from file
readhkl = 0                % generate reflections
% readhkl = 1                % read reflections from file
structfact = 0            % don't calculate structure factors
structfact = 1            % do
% Do we make the frames
% makeframes = 0            %Do not make tif frames
% makeframes = 1            % Make tif frames

% Define peak shape if diffraction images are to be formed
peakshape = 0                % Represent peak as a spike 3x3 pixels
% peakshape = 1            % Make the peak Gaussian shaped
% peakfwhm = 2            % FWHM in pixels
% peakwsig = 0.2            % FWHM in omega (in deg)
```