

**Компьютерная симуляция реального рентгеноструктурного
эксперимента на четырехкружном дифрактометре с
двухкоординатным детектором**

Паулиш Н. А.

Новосибирский государственный университет

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН

Целью работы является создание компьютерной модели дифракции рентгеновского излучения на кристалле в экспериментах на четырехкружном дифрактометре с двухкоординатным детектором. Существующие модели (например, реализованные в ПО Bruker APEXII [1]) не достаточно точно учитывают аппаратные особенности дифрактометра и, в частности, позволяют определять параметры элементарной ячейки с точностью $\approx 0,05\text{--}0,01 \text{ \AA}$. Однако, для некоторых задач требуется более высокая точность. Задачей разрабатываемой модели является фиксация малых изменений параметров элементарной ячейки кристалла на уровне $0,001 \text{ \AA}$. Для достижения этого необходимо учитывать реальный профиль рефлекса в дифракционной картине, на который влияют геометрические размеры кристалла и поглощение им излучения, немонохроматичность излучения, дифракция, не связанная с исследуемым образцом (держатель кристалла, воздух и т.д.) и другими причинами.

Четырехкружный дифрактометр состоит из источника рентгеновского излучения, дополненного монохроматором и коллиматором; гониометра, обеспечивающего вращение образца вокруг трех осей, проходящих через его центр; двухкоординатного CCD детектора, который перемещается по окружности, в центре которой находится кристалл, при этом радиус этой окружности может меняться.

На первом этапе была написана программа, которая по заданным параметрам элементарной ячейки, форме кристалла и коэффициенту линейного поглощения рассчитывает распределение интенсивности (профиль) от заданного рефлекса на детекторе и в обратном пространстве. Для проверки правильности модели проводились эксперименты на слабо- (алмаз) и сильнопоглощающих ($\text{LuBaCo}_4\text{O}_7$) образцах. Результаты сравнения модели и эксперимента показали удовлетворительное согласие профилей рефлексов и позволили выбрать дополнительные приборные факторы, необходимые для их более точного описания. Включение выявленных факторов в модель позволит в дальнейшем исследовать кристаллы на более высоком методическом уровне и изучать более «тонкие» явления.

[1] Bruker AXS Inc. (2004). APEX2 (Version 1.08). Madison, Wisconsin, USA.
Научный руководитель – канд. хим. наук, Комаров В. Ю.