

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ОРИЕНТАЦИИ АЛМАЗА МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

Определение кристаллографической ориентации минералов актуально в рамановской упругой термобарометрии и при определении динамики роста кристаллов. Преимуществами спектроскопии комбинационного рассеяния света является тот факт, что она представляет собой неразрушающий метод, не требующий пробоподготовки и простой в постобработке результатов. Измерения можно проводить на глубине порядка 1–2 мкм, что имеет большое значение в исследовании включений в образце.

Эффект комбинационного рассеяния представляет собой рассеяние электромагнитного излучения $E = E_0 \cos(\omega t)$ материалом с изменением частоты излучения ω . В рамках классического подхода под действием электромагнитной волны в материале индуцируется дипольный момент $P = \alpha E$, где α представляет собой поляризуемость молекулы, которая в общем виде имеет вид тензора $\tilde{\alpha}$. Интенсивность, излучаемую колеблющимся диполем в телесный угол Ω , можно представить в виде:

$$I_s = I_i k \int (e_i \tilde{\alpha} e_s)^2 d\Omega, \quad (1)$$

где I_s , I_i и e_s , e_i – интенсивности и векторы электрического поля рассеянного и падающего света соответственно. Константа $k = 4\pi^2 a^2 \omega_s^4$, $a^2 = 1/137$ – постоянная тонкой структуры. Поскольку алмаз обладает симметрией O_h с двумя атомами в элементарной ячейке, в спектре комбинационного рассеяния наблюдается трижды вырожденная мода F_{2g} , а тензор рассеяния $\tilde{\alpha}$ имеет вид:

$$F_{2g}(x) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d \\ 0 & d & 0 \end{bmatrix}, F_{2g}(y) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & 0 \\ d & 0 & 0 \end{bmatrix}, F_{2g}(z) = \begin{bmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2)$$

Целью данной работы является отработка экспериментальной методики определения кристаллографической ориентации образцов алмаза, ориентированных произвольным образом относительно лабораторной системы координат. Для этого необходимо совместить систему координат, связанную с образцом, с осями лабораторной системы координат. Это осуществляется поворотом Z-Y-Z на соответствующие углы Эйлера α, β, γ . Интенсивность можно определить как:

$$I_s = C_1(\alpha, \beta, \gamma, \psi_i) + C_2(\alpha, \beta, \gamma, \psi_i)\sin(2\psi_s) + C_3(\alpha, \beta, \gamma, \psi_i)\cos(2\psi_s), \quad (3)$$

где ψ_i, ψ_s – угол падения падающего и рассеянного света соответственно, а C_i – коэффициенты, зависящие от определяемых углов Эйлера.

Методика основана на измерении угловой зависимости спектров комбинационного рассеяния и сопоставления результатов с выражением (3). Для анализа результатов создана компьютерная программа в среде MATLAB, основанная на нелинейной минимизации, с помощью функции `fmincon`, разницы между уравнением (3) и экспериментальными данными. Методика и ее программная реализация иллюстрируются на примере образцов алмаза с заданной ориентацией [100] и [111]. Полярные фигуры для ориентации [100] (рис. 1) характеризуются тремя соответствующими углами Эйлера (40, 0, 0). В данном случае для совмещения кристаллографических ориентаций с лабораторной системой координат образец необходимо один раз повернуть относительно оси Z на 40°.

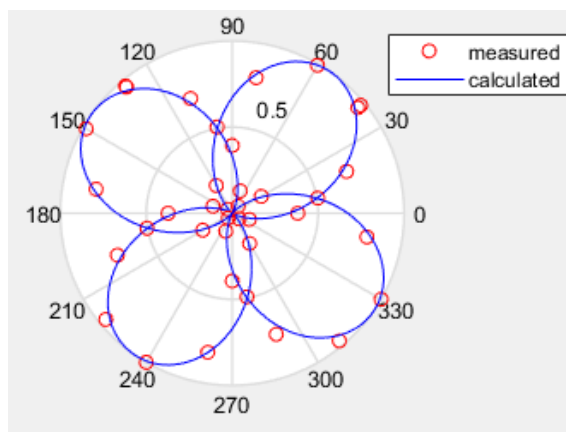


Рис. 1. Зависимость интенсивности от угла падения рассеянного света для образца с ориентацией $[100]$

Для двух ориентированных алмазных пластин с ориентацией $[111]$ (рис. 2) полученные углы Эйлера составляют $(46, 46, 44)$ и $(11, 60, 56)$, что также согласуется с заданной ориентацией. Это объясняется расположением плоскости (111) вдоль диагоналей куба.

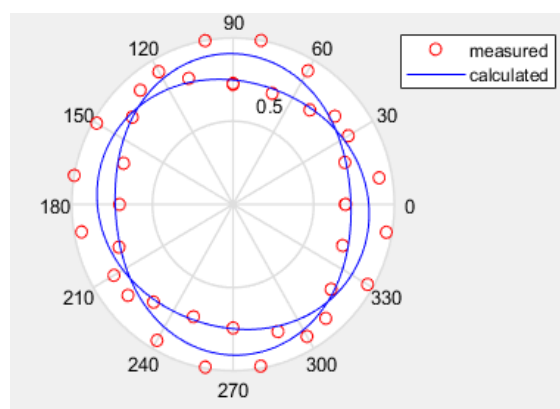
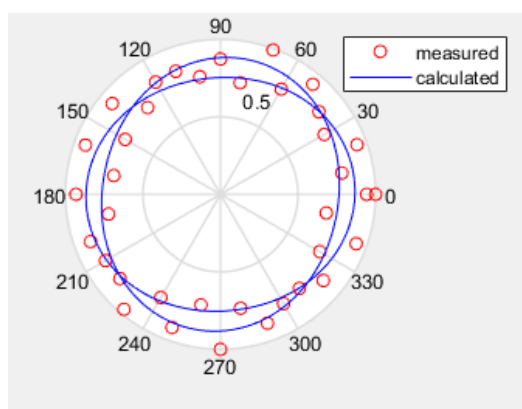


Рис. 2. Зависимость интенсивности от угла падения рассеянного света для образца с ориентацией $[111]$

Созданная программа будет использована для определения разориентировок природного алмаза для решения задач его генезиса. Кроме того, планируется адаптация действующей программы для исследования других минералов на основе учета мод, активных в комбинационном рассеянии, и соответствующих тензоров рассеяния.