

РАСКРЫТИЕ ОБЩЕЙ ПРИРОДЫ ДИФРАКЦИИ: НОВЫЙ ПОДХОД К ОБУЧЕНИЮ ОПТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Абдикамалов Бахтияр Абдиразакович

Уч. звание, должность: кандидат физико-математических наук, профессор кафедры Физики

Аннотация: Работа была выполнена с целью изучения дифракции света, рентгеновских лучей, других частиц с помощью компьютерного моделирования путем использования системы компьютерной алгебры Mathematica. Предполагается, что используя компьютерное моделирование можно преодолеть разрыв между теоретическими концепциями и практическими приложениями, предоставляя студентам возможность визуализировать и постигать тонкости дифракции в виртуальной среде. На основе моделирования дифракции света на одно- и двумерных дифракционных решетках решена задача формирования дифракционной картины в случае переменной постоянной решетки d и полученные данные сравниваются с электрограммой полисинтетических образцов ZnS. Дифракция света на обычной дифракционной решетке трактуется на основе понятий обратной решетки и сферы Эвальда. Использование при этом компьютерного моделирования в качестве средства обучения дало несколько неоспоримых преимуществ. Оно обеспечивало безопасную и контролируемую среду для экспериментов, позволяя студентам и преподавателям исследовать различные сценарии и наблюдать за влиянием различных параметров. Кроме того, использованное компьютерное моделирование предлагает визуальный и интерактивный опыт обучения, который может значительно улучшить понимание физических основ сложных оптических концепций и значительно улучшить успеваемость.

Abstract: This work was done for the purpose of studying the diffraction of light, X-rays, and other particles by computer simulation through the use of Mathematica computer algebra. It is envisioned that using computer simulations can bridge the gap between theoretical concepts and practical applications by giving students the opportunity to visualize and comprehend the intricacies of diffraction in a virtual environment. On the basis of simulations of light diffraction on one- and two-dimensional diffraction lattices the problem of diffraction pattern formation in the case of a variable lattice constant d was solved and the data obtained are compared with the electronogram of polysynthetic ZnS samples. Light diffraction on an ordinary diffraction lattice is interpreted on the basis of the notions of inverse lattice and Ewald sphere. The use of computer simulation as a teaching tool provided several undeniable advantages. It provided a safe and controlled environment for experiments, allowing students and teachers to explore different scenarios and observe the effects of different parameters. In addition, the computer simulations used

offered a visual and interactive learning experience that could significantly improve the understanding of the physical foundations of complex optical concepts and significantly improve academic performance.

Ключевые слова: *дифракция, компьютерное моделирование, дифракционная решетка, система Mathematica, дифракция рентгеновских лучей, дифракция электронов и других частиц, методы обучения, обратная решетка, построение Эвальда, уравнение Вульфа-Брэгга.*

Keywords: *diffraction, computer simulation, diffraction grating, Mathematica, X-ray diffraction, diffraction of electrons and other particles, training methods, inverse grating, Ewald construction, Wolf-Bragg equation.*

ВВЕДЕНИЕ

Оптические явления, начиная от дифракции света и заканчивая рассеянием рентгеновских лучей и электронных волн в кристаллах, уже давно захватили воображение исследователей и привели к новаторским открытиям. Эти явления, характеризующиеся сложным взаимодействием между волнами и периодическими структурами, содержат ключ к разгадке фундаментальной природы материи и электромагнитного излучения. Однако, понимание основополагающих принципов и визуализация сложной динамики дифракции часто оказывались сложной задачей как для преподавателей, так и для студентов.

В последние годы появление мощных вычислительных технологий и значительный рост вычислительной мощности произвели революцию в методологиях научных исследований и образования. Используя возможности компьютерного моделирования, мы теперь можем погрузиться в мир оптических явлений и раскрыть общую природу дифракции в периодических структурах независимо от природы задействованных волн. Этот новый подход к преподаванию не только улучшает концептуальное понимание, но и предоставляет студентам практический опыт для изучения поведения волн и их взаимодействия с различными периодическими механизмами.

Цель этой статьи - представить инновационный метод обучения оптическим явлениям с особым акцентом на общие принципы дифракции. Используя компьютерное моделирование, мы можем преодолеть разрыв между теоретическими концепциями и практическими приложениями, предоставляя студентам возможность визуализировать и постигать тонкости дифракции в виртуальной среде.

Чтобы подготовить почву, мы представим основополагающие принципы дифракции, подчеркнув ее значение в таких областях, как оптика, кристаллография, физика конденсированного состояния и материаловедение. Мы подчеркнем универсальность явлений дифракции, исследуя их возникновение в различных системах, таких как монохроматический свет, проходящий через дифракционную

решетку, рентгеновские лучи, взаимодействующие с кристаллическими структурами, и электронные волны, дифрагирующие в периодических расположениях. Демонстрируя сходство в поведении дифракции в этих различных областях, мы стремимся способствовать целостному пониманию этого фундаментального явления.

Опираясь на этот фундамент, мы углубимся в практическую реализацию компьютерного моделирования как мощного инструмента для обучения дифракции. С помощью серии численных экспериментов мы можем проиллюстрировать поведение волн в периодических структурах, уловив суть дифракции и позволив студентам манипулировать различными параметрами, наблюдать результаты в режиме реального времени и получить представление о лежащей в их основе физике.

Кроме того, мы рассмотрим педагогические преимущества использования компьютерного моделирования в процессе обучения. Предоставление интерактивных визуализаций, обучающих программ, основанные на моделировании, позволяют студентам развить более глубокую интуицию и активно исследовать оптические явления. С помощью виртуальных экспериментов они могут выявлять закономерности, анализировать дифракционные картины и развивать навыки критического мышления, необходимые для будущих научных исследований.

Сосредоточившись на общей природе явления дифракции, наш подход преодолевает границы между различными волновыми явлениями, позволяя студентам понять фундаментальные принципы и концепции, лежащие в основе этого универсального явления. Интеграция компьютерного моделирования в обучение дифракции не только способствует более глубокому пониманию, но и воспитывает в студентах чувство любопытства и исследовательского подхода, вдохновляя их на дальнейшие исследования и инновации в области оптики. Мы рассмотрим дифракцию Фраунгофера и для проведения компьютерного моделирования используем проприетарную систему компьютерной алгебры Mathematica [1-3].

Моделирование дифракции света в одно- и двумерных дифракционных решетках. Здесь мы не будем рассматривать дифракцию на одной щели, вопрос о графическом вычислении результирующей амплитуды в разных направлениях и сразу переходим к рассмотрению вопроса о дифракции в двух скрещенных дифракционных решетках. Использовались дифракционные решетки компании LD Didactic GmbH 6000/см (роланд). Выражение для амплитуды дифрагированного света получается на основе принципа Гюйгенса и вид его считаем общеизвестным [4]. Можно построить график зависимости интенсивности дифрагированного света от величины дифракционного угла θ . При этом можно наглядно представить взаимную связь между длиной волны λ , шириной щели d и углом θ .

При дифракции в двумерной структуре, которую можно получить при помощи двух скрещенных дифракционных решеток сформировавшаяся картина напоминает электронограмму простого кубического кристалла, снятая вдоль одной из осей $\langle 100 \rangle$.

Напомним, что для формирования электронограммы используются электронные лучи, длина которых при ускоряющем напряжении $U=100$ кВ составляет $\lambda=0,037$ Å, т.е. примерно на 100-150 раза меньше, чем постоянные кристаллической решетки a, b, c . В то же время, при оптических исследованиях, выполняемых в учебных лабораториях, отношение расстояния между штрихами к величине длины волны намного меньше, чем 100

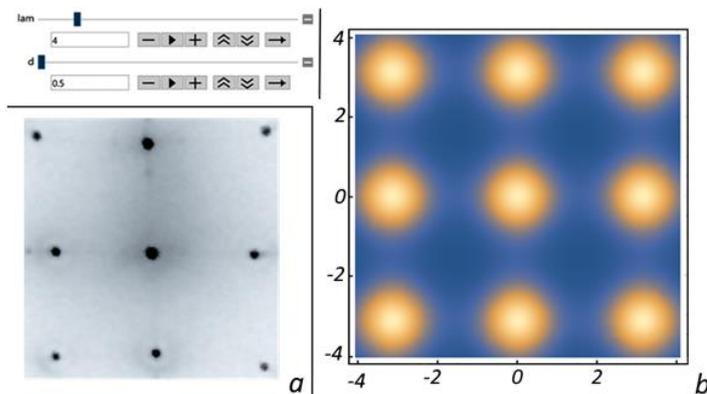


Рис. 1. Фотоснимок дифракционной картины (a) и расчетная дифракционная картина, полученная при помощи функции (1). На рис.1a контраст обратный.

При компьютерном моделировании учитывается, что дифракционная картина двумерной структуры состоит из суперпозиции двух одномерных картин и при построении дифракционной картины следует пользоваться командой "DensityPlot". Для наглядной демонстрации зависимости полученной картины от длины волны λ , количества щелей n и ширины щели d следует пользоваться командой "Manipulate". Составленная функция имеет вид:

$$\text{Manipulate}[\text{DensityPlot}\left[\left\{\left(\text{Sinc}\left[\frac{\text{Pid}}{\text{lam}} \text{Sin}[x]\right]\right)^2 \left(\frac{\text{Sin}\left[\frac{n\text{Pid}}{\text{lam}} \text{Sin}[x]\right]}{\text{Sin}\left[\frac{n\text{Pid}}{\text{lam}} \text{Sin}[x]\right]}\right)^2\right.\right. \\ \left.\left.\left(\text{Sinc}\left[\frac{\text{Pid}}{\text{lam}} \text{Sin}[y]\right]\right)^2 \left(\frac{\text{Sin}\left[\frac{n\text{Pid}}{\text{lam}} \text{Sin}[y]\right]}{\text{Sin}\left[\frac{\text{Pid}}{\text{lam}} \text{Sin}[y]\right]}\right)^2\right\}, \{x, a1, b1\}, \{y, a1, b1\},\right. \\ \left.\text{Exclusions} \rightarrow x == 0 \ \&\& \ y == 0, \{\text{lam}, 3, 10, 1\}, \{d, 0.5, 1, 0.1\}\right] \\ \text{Полученная картина представлена на рис. 1}$$

Полученная картина представлена на рис. 1

Интересный случай получается при наличии изменяющейся d . Дело в том, что некоторые кристаллы, выращенные из расплава (например, ZnS и ZnSe) имеют полисинтетическую структуру, состоящую из тонких слоев (структурных доменов) сфалерита, которые перпендикулярны "особой" кристаллографической оси [111], параллельной оси [0001] высокотемпературной гексагональной (вюрцитной) модификации [5]. Средняя толщина доменов (слоев сфалерита) в образцах ZnS равна ~ 30 Å. Наличие такой субструктуры приводит к уширению рентгеновских и

электронных дифракционных рефлексов вдоль кристаллического направления [111], перпендикулярного поверхности тонких структурных доменов. В этой связи представляется уникальная возможность демонстрации оптического аналога упомянутого явления. При этом основная суть задачи сводится к моделированию дифракционной картины, вдоль одного направления которой величина d должна измениться в заданном диапазоне с малыми шагами. В первом приближении это достигается путем суперпозиции дифракционных картин с различными значениями d . Соответствующая функция DensityPlot пишется так:

$$\text{DensityPlot}\left[\left(\text{Sinc}\left[\frac{\text{Pi}d}{\text{lam}} \text{Sin}[x]\right]\right)^2 \left(\frac{\text{Sin}\left[\frac{n\text{Pi}d}{\text{lam}} \text{Sin}[x]\right]}{\text{Sin}\left[\frac{\text{Pi}d}{\text{lam}} \text{Sin}[x]\right]}\right)^2 \left(\text{Sinc}\left[\frac{\text{Pi}d}{\text{lam}} \text{Sin}[y]\right]\right)^2 \text{Table}\left[\left(\frac{\text{Sin}\left[\frac{n\text{Pis}}{\text{lam}} \text{Sin}[y]\right]}{\text{Sin}\left[\frac{\text{Pis}}{\text{lam}} \text{Sin}[y]\right]}\right)^2, \{s, 0.1, 1, 0.01\}\right], \{x, a1, b1\}, \{y, a1, b1\}, \text{Exclusions} \rightarrow x == 0 \& \& y == 0\right] \quad (2)$$

```
DensityPlot[{{(Sinc[Pi d/lam Sin[x]])^2 ((Sin[(nPi d)/lam Sin[x]])/(Sin[(Pi d)/lam Sin[x]]))^2
(Sinc[Pi d/lam Sin[y]])^2 Table[(Sin[nPis/lam Sin[y]]/Sin[Pis/lam Sin[y]])^2,{s,0.1,1,0.01}}},
{x,a1,b1},{y,a1,b1},Exclusions->x==0&&y==0]
(2)
```

Полученная картина показана на рис. 2а. Для сравнения, на рис. 2б представлена электронограмма полисинтетического образца ZnS, снятого с тонкой фольги, параллельной кристаллографической плоскости (110).

Здесь следует обратить внимание на распределение интенсивности дифрагированного излучения вдоль направления изменения d . В случае, если распределение d однородное, тогда получается дифракционная картина, показанная на рис. 2а. В случае, если вероятность наличия определенных d выше, получается изображение, показанное на рис. 2б. Как показано в соответственных исследованиях [6], среди структурных доменов ZnS, домены, которые имеют толщину около $a\sqrt{3}$, где $a=0,54109$ нм, встречаются чаще. Такая ситуация и определяет неравномерное распределение интенсивности как электронограмм, так рентгенограмм или рентгеновских дифрактограмм. Однако, при преподавании оптики подробное изложение особенностей вытянутости дифракционных рефлексов не требуется и, поэтому, соответствующего математического выражения приводить не будем.

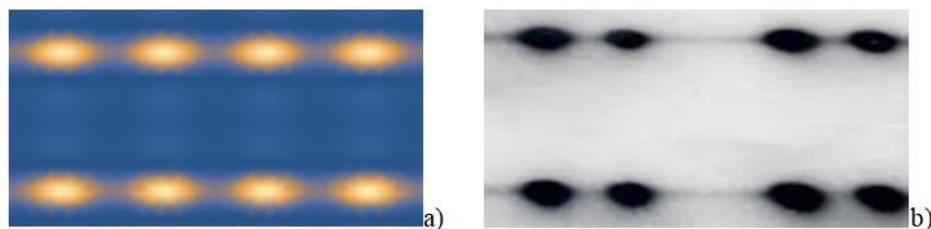


Рис. 2. Изменение формы дифракционных максимумов при наличии вариаций d .

а - расчетная дифракционная картина, б - фрагмент электронограммы полисинтетического образца ZnS. Неравномерное расположение рефлексов связано с структурным фактором (по терминологии рентгеновской кристаллографии $|F|^2$ телом).

Приведенные выше факты показывают, что преподаватель должен знать о тонкостях формирования дифракционных пятен при наличии различных субструктур или дефектов как в исследуемых кристаллах, так и в дифракционных решетках.

Интерпретация дифракционных картин в терминах обратной решетки. Известно, что понятие обратной решетки удобно для описания дифракции рентгеновских лучей, электронов или других частиц на кристалле. Обратная решетка (обратное пространство) является Фурье-образом прямой кристаллической или другой дифракционной решетки (прямого пространства). Важно знать, что картины, которые получаются при дифракции волн любой природы, представляют собой проекцию обратной решетки на поверхность экрана или фотопленки [7-9]. Обратная решетка является чисто математической конструкцией, которая представляет допустимые векторы рассеяния для кристалла. При этом условие дифракции, которое для прямой решетки выглядит как условие Вульфа-Брэгга $2d \sin\theta = n\lambda$, пишется в виде $k_0 - k' = g$. Здесь k_0 - волновое число падающего, k' - волновое число дифрагированного излучения, g - вектор обратной решетки.

Отметим, в рентгеновской кристаллографии широко известно так называемое построение Эвальда, которое позволяет наглядно интерпретировать дифракцию рентгеновских лучей, электронов или нейтронов [10-11]. Это построение основано на равенстве $k_0 - k' = g$ и устанавливает связь между волновым вектором падающего и дифрагированного лучей при известных обратной решетке и направлении падающего излучения относительно неё (рис. 3). В то же время, как правило, при рассмотрении дифракции света на дифракционных решетках обратная решетка обычно не используется и ограничивается рассмотрением вида $d \sin\theta = n\lambda$. Отметим, что наличие 2 в уравнении Вульфа-Брэгга связано с тем, что дифракцию рентгеновских лучей или других частиц рассматривают как отражение волн на атомных плоскостях с определенным d . Тем не менее, как показывает опыт, дифракцию в прозрачных оптических дифракционных решетках (в данном случае прозрачных) можно с успехом проиллюстрировать при помощи обратной решетки и при этом очень важно

определить вид её узлов, соответствующих одномерному расположению щелей и штрихов.

Анализ показывает, что в случае, если в качестве исходного соотношения берется формула Вульфа-Брэгга $d \sin\theta = n\lambda$, можно установить полную аналогию между дифракцией оптической дифракционной решетки с дифракцией рентгеновских лучей (или других частиц) в периодических структурах. Можно легко определить, что одномерной дифракционной решетке соответствуют узлы обратной решетки в виде линии, лежащие в одной плоскости с вектором k_0 и параллельные к нему. Расстояние между линиями равно nd (n - порядок дифракции). В случае наличия второй такой же дифракционной решетки, перпендикулярной первой, получаются серия узлов обратной решетки (линии), направленные вдоль k_0 и образующий в перпендикулярной плоскости квадратную сетку. Отметим, что для построения схемы формирования дифракционной картины следует переходить в обычные сантиметры путем приравнения радиуса сферы Эвальда $1/\lambda$ в, скажем, 10 см.

На рис. 3 показана схема формирования дифракционной картины, соответствующей дифракцию света в одномерной дифракционной решетке с постоянной d (в нашем случае $|g|=1/d$). Видно, что пучок света падает с левой стороны вдоль узла обратной решетки O . Дифрагированные лучи распространяются из центра сферы Эвальда. Стрелками отмечены дифракционные лучи. $n|g|$ соответствуют модулям вектора обратной решетки. n - порядок дифракции. Цифры на правой стороне рисунка означают "индексы" узлов обратной решетки, которые в данном случае имеет вид бесконечно длинных прямых линий. Точка A является началом координат обратной решетки

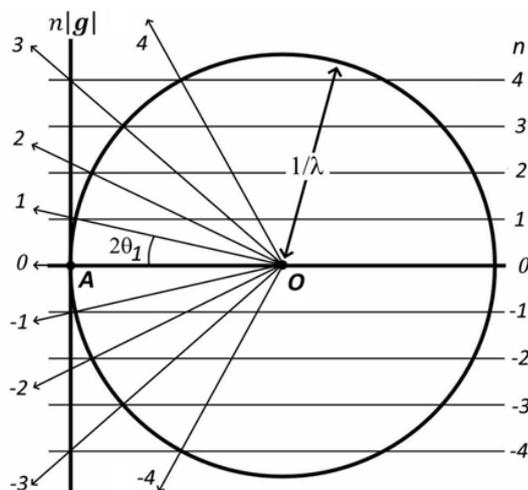


Рис. 3.
Объяснение дифракции
монохроматического света при
помощи построения Эвальда.
Узлы обратной решетки
изображены в виде линий с
 $n = 1, 2, 3, \dots$ Стрелки
соответствуют
дифрагированным лучам. O -
центр сферы Эвальда. $|g|$ -
модуль вектора обратной
решетки.

Выводы. В этом исследовании нашей целью была разработка нового подхода к изучению оптических явлений с помощью компьютерного моделирования. Чтобы достичь этого, была использована методологическая основа, которая подчеркивала общую природу различий в понимании и моделировании оптических явлений. Приняв методологию, основанную на общей природе различий, можно расширить

понимание того, как формируются дифракционные картины. Использование при этом компьютерного моделирования в качестве средства обучения дало несколько неоспоримых преимуществ. Оно обеспечивало безопасную и контролируемую среду для экспериментов, позволяя студентам и преподавателям исследовать различные сценарии и наблюдать за влиянием различных параметров. Кроме того, использованное компьютерное моделирование предлагает визуальный и интерактивный опыт обучения, который может значительно улучшить понимание физических основ сложных оптических концепций и значительно улучшить успеваемость. Предлагаемое компьютерное моделирование безусловно может стать мощным инструментом для изучения многих оптических явлений. Это позволяет преподавателям, а также студентам визуализировать сложные концепции, взаимодействовать с ними таким образом, который невозможен при традиционных методах обучения и, самое главное, понять суть изучаемого физического явления.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Zimmerman, R. L., & Olness, F. I. (2016). *Mathematica for Physics* (2nd ed.). Publisher: Addison-Wesley. 645 p.
2. Grozin, A. (2013). *Introduction to Mathematica® for Physicists*. Springer.
3. Kumar, K.B. Vijaya, Monteiro, Antony P. (2023). *Mathematica for Physicists and Engineers*. Wiley-VCH, Berlin. 416 p.
4. https://en.wikipedia.org/wiki/Diffraction_from_slits.
5. Абдикамалов Б.А., Ережепов М.Т., Ерназаров У.К. Наблюдение структуры полисинтетических кристаллов сульфида и селенида цинка. *Физика твердого тела*, Том 34, № 5, 1992, с. 1425-1428.
6. Абдикамалов Б.А., Абдикамалов Б.А., Ерназаров У.К., Киятов К.К. Дискретное малоугловое рассеяние рентгеновских лучей в полисинтетических кристаллах сфалерита ZnS. *Физика твердого тела*. Том 30. № 6, 1988, с. 1821-1822.
7. Горелик С.С., Скаков Ю.А., Расторгуев Л.Н. *Рентгенографический и электронно-оптический анализ*. 3-е издание. Москва. МИСИС. 1994. 328 с.
8. Waseda, Y., Matsubara, E., & Shinoda, K. (2011) *X-Ray Diffraction Crystallography Introduction, Examples and Solved Problems*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
9. ZhiLi, D. (2022). *Fundamentals of Crystallography, Powder X-ray Diffraction, and Transmission Electron Microscopy for Materials Scientists* (1st ed.). CRC Press.
10. Blundell, S. J., & Blundell, K. J. (2012). *Introduction to X-Ray Crystallography*. Oxford University Press.
11. Cowley, J. M. (2016). *X-Ray Diffraction and the Structure of Materials*. Cambridge University Press.