ТЕРМОРЕНТГЕНОГРАФИЯ: ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Филатов С.К.¹, Фирсова В.А.², Волков С.Н.^{2,3}, Бубнова Р.С.²

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия,
filatovstanislav@gmail.com

²Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия

³ФИЦ Кольский научный центр, Апатиты, Россия

Данные порошковой рентгеновской дифракции позволяют решать следующие задачи – определять качественный и количественный фазовый состав образцов, с использованием метода Ритвельда уточнять структурные параметры фаз, начиная от параметров элементарной ячейки вплоть до координат и параметров смещений атомов, заселенности позиций, вычислять длины и углы связей и др. Соответственно, используя дифракционные данные, полученные в переменных термодинамических условиях (температура, давление, химический состав), можно исследовать протекающие в веществе фазовые и химические превращения, эволюцию структурных параметров, строить фазовые диаграммы, рассчитывать тензор термического расширения, барического сжатия, композиционных (химических) деформаций и устанавливать основные закономерности формирования структуры вещества.

Этим задачам посвящен практикум по терморентгенографии – будут рассмотрены возможности применения программных комплексов для обработки больших массивов терморентгендифракционных данных. Сертифицированные программные комплексы ThetaToTensor-2013 и RietveldToTensor-2018 (правообладатель ИХС РАН) и TRX-Tensors-2019 (правообладатель СПбГУ) [Бубнова и др., 2013; Бубнова и др., 2018] направлены на обработку больших массивов экспериментальных дифракционных данных, полученных при изменении различных термодинамических параметров; массивы являются исходными данными. Программы различаются методами обработки дифракционных данных и расчета параметров элементарной ячейки. В программе ThetaToTensor используется метод подбора профиля (profile fitting), в RietveldToTensor – метод Ритвельда. На завершающем этапе в программах реализован

расчет тензора расширения и построение его 3D поверхности и главных сечений. Расчет основан на анализе температурных зависимостей параметров элементарной ячейки и проводится согласно формализму, описанному в [Филатов, 1990; Белоусов, Филатов, 2007]. Формализм может быть использован для расчета коэффициентов сжимаемости или композиционных (химических) деформаций.

Практикум по программному обеспечению метода терморентгенографии будет проводиться под руководством авторов ПО – молодежной командой СПбГУ и ИХС РАН: к.г.-м.н. А.П. Шаблинским, к.х.н. Я.П. Бирюковым, к.г.-м.н. О.С. Шорец, С.В. Деминой, И.О. Левашовой.

Примеры терморентгендифракционных съемок образцов, рассматриваемых на практикуме, выполнены в Ресурсном Центре «Рентгендифракционные методы исследования» Научного Парка СПбГУ.

Работа поддержана грантом РФФ № 22-13-00317.

ЛИТЕРАТУРА

1. Белоусов Р.И., Филатов С.К. Алгоритм расчета тензора и построение фигур коэффициентов теплового расширения в кристаллах // Физика и химия стекла. 2007. Т. 33. С. 377–382.
2. Бубнова Р.С., Фирсова В.А., Филатов С.К. Программа определения тензора термического расширения и графическое представление его поверхности // Физика и химия стекла. 2013. Т. 39. С. 505–509.
3. Бубнова Р.С., Фирсова В.А., Филатов С.К., Волков С.Н. *RietveldToTensor*: программа для обработки больших массивов порошковой рентгендифракционных данных, полученных в переменных условиях // Физика и химия стекла. 2018. Т. 44. С. 46–58.
4. Филатов С.К. *Высокотемпературная кристаллохимия*. Л.: Недра, 1990. 288 с.