

АВТОМАТИЗАЦИЯ ОБРАБОТКИ РЕЗУЛЬТАТОВ РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННОГО АНАЛИЗА НАНОМАТЕРИАЛОВ

Крол М.А.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Республика Беларусь

Хорошко Л.С. – канд. физ.-мат. наук

Цель данной работы – разработка программного продукта для автоматизации обработки результатов рентгенодифракционного анализа наноматериалов, состоящее в создании программного продукта для определения среднего размера кристаллитов материала с использованием формулы Дебая-Шеррера. Данная разработка будет востребована как в научных, так и в производственных учреждениях ввиду расширения сфер использования наноматериалов в повседневной жизни. Автоматизация процесса исследования позволяет уменьшить требуемые трудозатраты и существенно сократить временные затраты.

Различные отрасли промышленности и сферы человеческой деятельности являются потребителями наноматериалов и нанотехнологий. Они находят широкое применение в машиностроении, химической промышленности, электротехнике, энергетике, электронике, информационных и компьютерных технологиях, биологии и медицине, в областях, связанных с охраной окружающей среды и др. На основе наноматериалов создаются новые конструкционные и инструментальные материалы с повышенными механическими свойствами. Часто основанием применения наноматериала становится какое-либо одно свойство. Так, керамические материалы, содержащие нанокристаллические частицы металла используют для поглощения электромагнитного излучения в радиодиапазоне длин волн. Суспензии частиц железа с размерами от 30 нм до 1–2 мкм в смазочном масле восстанавливают изношенные детали (не прерывая работы) двигателя. В настоящее время они широко используются в микроэлектронике, способствуя дальнейшей миниатюризации электронных приборов, в защитных системах поглощения ВЧ- и рентгеновского излучений, в качестве катализаторов (чему способствует огромная, порядка $5 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ удельная поверхность нано порошков). В атомной энергетике таблетки тепловыделяющих элементов изготавливаются из ультрадисперсного порошка UO_2 , в термоядерной технике из ультрадисперсного порошка бериллия изготавливают мишени для лазерно-термоядерного синтеза. Наноматериалы используют в качестве сверхпрочных конструкционных материалов и износостойких покрытий. В последнее время, наряду с применением наноматериалов в традиционных областях промышленности, возрос интерес к их использованию в сельском хозяйстве (растениеводство, животноводство, зоотехника), рыболовстве, медицине, пищевой промышленности, где используются биостимулирующие свойства биологически активных и чистых микроэлементов из нанопорошков. Одним из главных анализируемых параметров при исследовании твердотельных наноматериалов является размер кристаллитов, позволяющий отнести создаваемый материал к наноструктурированному.

К числу методов, широко используемых в практике исследования структуры наноматериалов относятся методы рентгеновского дифракционного и спектрального анализа. Метод Дебая-Шеррера – это метод исследования структуры мелкокристаллических (поликристаллических) материалов с помощью дифракции рентгеновских лучей; один из методов рентгеновского структурного анализа. Разработан П. Дебаем и нем. физиком П. Шеррером в 1916 [1]. Для определения среднего размера кристаллитов в этом методе используется формула Дебая-Шеррера [2], в которой фигурируют безразмерный коэффициент формы частиц (постоянная Шеррера); длина волны рентгеновского излучения; ширина рефлекса на полувысоте в единицах 2θ и угол дифракции (брэгговский угол).

Разрабатываемый программный продукт представляет из себя оконное приложение, предназначенное для автоматизации процесса обработки результатов с использованием формулы Дебая-Шеррера. В основе приложения лежит Qt – кроссплатформенный фреймворк с кодом для создания графических пользовательских интерфейсов, а также кросс-платформенных приложений, работающих на различных программных и аппаратных платформах, таких как Linux, Windows, MacOS, Android или встраиваемых системах. Преимуществами Qt являются кроссплатформенность, быстродействие, а также, в нашем случае, возможность работы с языком программирования C++ – компилируемым, статически типизированным языком программирования общего назначения. Одними из основных его преимуществ являются производительность и быстродействие, которые достаточно важны для приложений такого рода.

Разрабатываемое приложение сильно упрощает процесс обработки результатов рентгенодифракционного анализа и позволяет сократить затрачиваемое на это время.

Список использованных источников:

- 1 Большая российская энциклопедия – электронная версия [Электронный ресурс]. – Режим доступа : <https://bigenc.ru/physics/text/1943385>. – Дата доступа: 05.04.2020.
2. Специальные методы рентгенографии и электронно-микроскопического исследования материалов / В. Д. Андреева [и др.]. – СПб.: Изд-во политехнического ун-та, 2008. – 98 с.