

РОЗРОБКА ПРОГРАМНОГО ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ РОЗРАХУНКУ СТРУКТУРНОГО ФАКТОРУ ТА МОДЕЛЮВАННЯ ТЕОРЕТИЧНОЇ РЕНТГЕНІВСЬКОЇ ДИФРАКТОГРАМИ

Малєєв М.В., Решетняк М.В., Пуха В.Є.

Національний технічний університет

«Харківський політехнічний інститут», м. Харків

Рентгенографічні методи широко використовуються у різних областях науки і техніки. Сучасна кристалографія неможлива в даний час без прецизійного обладнання для дифракційних досліджень і складних комп'ютерних розрахунків, результати яких необхідно порівнювати з експериментом.

Метою данної роботи була розробка алгоритму і створення програмного забезпечення для реалізації розрахунків теоретичних дифрактограм різних структур.

В роботі був розроблений алгоритм і створена програма STR17 мовою Object Pascal в середовищі Delphi 7, що дозволяє розраховувати теоретичні дифрактограми різних структур, у тому числі і іонні кристали. Для розрахунку нам необхідно задати базис, параметри елементарної комірки і використовуване випромінювання. Розрахунок атомного фактора проводився разом з розрахунками структурного фактора за формулами (1, 2), взяті з робіт [1,2].

Розрахунок дисперсійної поправки:

$$f = f_0 + \Delta f' + i\Delta f'' \quad (1)$$

Розрахунок атомного фактора з урахуванням дисперсійного поправки:

$$f(S_x) = \sum_{i=1}^n a_i \exp(-b_i S_x^2) + c \quad (2)$$

Правильність розрахунку теоретичної дифрактограми здійснювалося шляхом порівняння з картотекою PCPDF і порівняння з результатами розрахунку відомої програми PowderCell 2.1.

Література: 1. Cromer D. T., Waber J. T. Scattering factors computed from relativistic Dirac-Slater wave functions // Acta Cryst. — 1965. — V.18. — P.104-109. 2. Cromer D. T. Anomalous dispersion corrections computed from self-consistent field relativistic Dirac-Slater wave functions // Acta Cryst. — 1965. — V.18. — P.17-23.