

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра ядерной физики

ТУЛУП
Павел Владимирович

АДАПТАЦИЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ БАЗЫ ДАННЫХ СОД
К ЗАДАЧАМ ПОРОШКОВОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ
ДИФРАКТОМЕТРИИ

Магистерская диссертация
специальность 1-31 80 05 «Физика»

Научный руководитель:
Углов Владимир Васильевич
доктор физико-математических наук,
профессор

Рецензент:
Чернявская Элина Александровна
доктор физико-математических наук,
профессор

Допущена к защите
«05» июня 2020 г.

Зав. кафедрой ядерной физики
кандидат физико-математических наук, доцент А.И. Тимошенко

Минск, 2020

ОГЛАВЛЕНИЕ

Перечень условных обозначений	3
Общая характеристика работы	4
Агульная характарыстыка работы	5
General description of work	6
Введение	7
Глава 1 Основы рентгеновской дифрактометрии	8
1.1 Дифракция рентгеновских лучей при прохождении	8
1.2 Определение симметрии кристаллического вещества	13
1.3 Порошковая дифрактометрия	18
1.4 Выводы по главе 1	27
Глава 2 Настольный порошковый дифрактометр «POWDIX 600»	28
2.1 Основные сведения	28
2.2 Радиационная защита дифрактометра	33
2.3 Конструкция и назначение функциональных узлов	38
2.4 Выводы по главе 2	52
Глава 3 Адаптация кристаллографической базы данных COD	53
3.1 Общие сведения о кристаллографических базах данных	53
3.1.1 База данных COD	54
3.1.2 База данных CSD	57
3.1.3 База данных ICDD-PDF	58
3.2 Структура и содержание CIF-файла	60
3.3 Разработка программного комплекса для адаптации	64
3.4 Результаты разработки и их анализ	66
3.5 Выводы по главе 3	71
Заключение	72
Список использованной литературы	74
Приложения	76

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Магистерская диссертация 89 с., 38 рис., 2 табл., 24 источника.

РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ, КРИСТАЛЛОГРАФИЯ,
КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ БАЗЫ ДАННЫХ, ДИФРАКТОМЕТРИЯ,
ПОРОШКОВАЯ РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИФРАКТОМЕТРИЯ,
ДИФРАКТОМЕТР, РЕНТГЕНСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ.

Цель магистерской диссертации – 1) ознакомиться с существующими способами получения дифракционной картины; 2) изучить структуру и параметры открытой кристаллографической базы данных COD; 3) изучить существующие алгоритмы преобразования баз данных; 4) усовершенствовать существующие алгоритмы для поиска и выделения рефлексов из рентгеновского спектра по интенсивности; 5) разработать программный комплекс для автоматического преобразования кристаллографической базы данных в формат, необходимый для внутреннего ПО «Адани»; 6) реализовать возможность использовать гибкие настройки конвертации в рамках единого приложения.

Изучены существующие методы рентгеноструктурного анализа; изучена структура и параметры открытой кристаллографической базы данных COD; изучены существующие алгоритмы преобразования баз данных; усовершенствованы существующие алгоритмы для поиска и выделения рефлексов из рентгеновского спектра по интенсивности; разработан программный комплекс для автоматического преобразования кристаллографической базы данных в формат, необходимый для внутреннего ПО «Адани», с возможностью использовать гибкие настройки конвертации в рамках единого приложения.

Результаты работы использовались при разработке ПО для настольного порошкового дифрактометра «POWDIX 600».

АГУЛЬНАЯ ХАРАКТАРЫСТЫКА РАБОТЫ

Магістарская дысертцыя 89 с., 38 мал., 2 табл., 24 кр.

РЭНТГЕНАЎСКАЯ ДЫФРАКЦЫЯ, КРЫШТАЛАГРАФІЯ,
КРЫШТАЛЯГРАФІЧНЫЯ БАЗЫ ДАДЗЕНЫХ, ДЫФРАКТАМЕТРЫЯ,
ПАРАШКОВАЯ РЭНТГЕНАЎСКАЯ ДЫФРАКТАМЕТРЫЯ,
ДЫФРАКТОМЕТР, РЭНТГЕНСТРУКТУРНЫ АНАЛІЗ.

Мэта магістарскай дысертцыі - 1) азнаёміцца з існуючымі спосабамі атрымання дыфракцыйнай карціны; 2) вывучыць структуру і параметры адкрытай крышталяграфічны базы дадзеных COD; 3) вывучыць існуючыя алгарытмы пераўтварэнні баз даных; 4) ўдасканаліць існуючыя алгарытмы для пошуку і вылучэнні рэфлексаў з рэнтгенаўскага спектру па інтэнсіўнасці; 5) распрацаваць праграмны комплекс для аўтаматычнага пераўтварэння крышталяграфічны базы дадзеных у фармат, неабходны для ўнутранага ПЗ "Адані"; 6) рэалізаваць магчымасць выкарыстоўваць гнуткія налады канвертавання ў рамках адзінага прыкладання.

Вывучаны існуючыя метады рентгеноструктурнага аналізу; вывучана структура і параметры адкрытай крышталяграфічны базы дадзеных COD; вывучаны існуючыя алгарытмы пераўтварэнні баз даных; ўдасканалены існуючыя алгарытмы для пошуку і вылучэнні рэфлексаў з рэнтгенаўскага спектру па інтэнсіўнасці; распрацаваны праграмны комплекс для аўтаматычнага пераўтварэння крышталяграфічны базы дадзеных у фармат, неабходны для ўнутранага ПЗ «Адані», з магчымасцю выкарыстоўваць гнуткія налады канвертавання ў рамках адзінага прыкладання.

Вынікі работы выкарыстоўваліся пры распрацоўцы ПЗ для настольнага парашковага дыфрактометра «POWDIX 600».

GENERAL DESCRIPTION OF WORK

Master's thesis 89 pp., 38 fig., 2 tab., 24 sources.

X-RAY DIFFRACTION, CRYSTALLOGRAPHY,
CRYSTALLOGRAPHY DATA BASES, DIFFRACTOMETRY, POWDER X-
RAY DIFFRACTOMETRY, DIFFRACTOMETER, X-RAY DIFFRACTION.

The purpose of the master's thesis is 1) to get acquainted with the existing methods for obtaining a diffraction pattern; 2) to study the structure and parameters of an open crystallographic COD database; 3) study existing database conversion algorithms; 4) improve existing algorithms for searching and extracting reflections from the x-ray spectrum in intensity; 5) to develop a software package for the automatic conversion of the crystallographic database into the format necessary for the internal «Adani» software; 6) realize the ability to use flexible conversion settings within a single application.

Existing methods of x-ray structural analysis were studied; studied the structure and parameters of an open crystallographic database COD; Existing database conversion algorithms are studied; Improved existing algorithms for searching and extracting reflections from the X-ray spectrum in intensity; a software package has been developed for the automatic conversion of the crystallographic database into the format necessary for the Adani internal software, with the ability to use flexible conversion settings within a single application.

The results of the work were used in the development of software for the «POWDIX 600» benchtop powder diffractometer.