

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФУНКЦИИ ПАТТЕРСОНА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ

В. В. Крот

Гродненский государственный университет им. Янки Купалы, Гродно

Метод Паттерсона — это мощный инструмент для анализа рентгеновских дифракционных данных, который используется для определения структуры кристаллических материалов. Он был разработан английским физиком Эриком Паттерсоном в 1934 году и с тех пор стал важным инструментом для исследования кристаллических структур.

Основная задача метода Паттерсона — это определение относительных положений атомов внутри кристаллической структуры. Для этого он использует данные

о рассеянии рентгеновских лучей кристаллом, которые записываются в виде дифракционных образцов. Метод Паттерсона применяется на этапе интерпретации этих образцов и предоставляет информацию о том, какие атомы в кристалле находятся ближе друг к другу. Также метод Паттерсона может использоваться для определения изменений в кристаллических структурах образцов, например, изменения, вызванные облучением образца лазерным излучением. Если кристаллическая структура образца изменилась под воздействием лазерного облучения, это будет отражено в изменениях в дифракционных образцах. Путем анализа изменений в дифракционных данных, можно определить, какие атомы или молекулы подверглись изменениям в структуре, и оценить масштаб и характер этих изменений.

Принцип работы метода Паттерсона заключается в следующем:

1. Вычисление электронной плотности. Сначала вычисляется электронная плотность кристалла, используя рентгеновские данные и математические преобразования Фурье. Электронная плотность представляет собой трехмерную карту распределения электронов в кристалле.

2. Вычисление автокорреляционной функции. Вычисляется автокорреляционная функция электронной плотности, которая показывает, какие участки электронной плотности коррелируют друг с другом при различных расстояниях и углах. Это позволяет выявить симметричные элементы в структуре.

3. Поиск пиков в автокорреляционной функции. Анализируя автокорреляционную функцию, метод Паттерсона находит пики, которые соответствуют возможным парам атомов с известными расстояниями между ними.

4. Решение структуры. На основе пиков в автокорреляционной функции и с использованием дополнительной информации о симметрии кристалла и химических свойствах атомов определяется конечная структура кристалла.

Зачастую известна идеальная структурная модель кристалла, и необходимо установить изменения взаимоконфигурации атомов в кристалле, подвергшемся

лазерному (или иному) облучению. Для анализа этих изменений нами предложено использовать корреляционную функцию [1].

Таким образом, метод Паттерсона играет важную роль в кристаллографии, поскольку предоставляет информацию о структуре кристаллических материалов, что имеет широкое применение в различных областях науки и технологии, включая химию, физику и биологию.

При всей полезности этого метода, не было обнаружено ни одного программного продукта, который бы осуществлял автоматическую обработку изображений рентгенограммы и производил бы по ней расчет корреляционной функции. Таким образом, была поставлена задача по разработке программного продукта, осуществляющего обработку рентгенограмм кристаллических образцов, расчета по ним функции Паттерсона и сохранением результатов базу данных.

Вкратце рассмотрим суть программы:

1) На вход программы подается изображение рентгенограммы исследуемого образца до облучения. [рис. 1]. Также пользователь вводит дополнительные данные для расчета: диапазоны углов тета, длина волны рентгеновского излучения, химический элемент исследуемого образца

2) Программа анализирует полученное изображение и получает список пиков, в которых содержится информация об интенсивности (высоте) пика и его угле тета.

3) Программа передает этот список в метод для расчета функции Паттерсона, где и производится расчет.

4) Полученные данные сохраняются в базу данных, а также доступны для визуального просмотра в виде графика.

5) Пользователю предлагается загрузить изображение рентгенограммы образца после облучения [рис. 1] и пункты 2-4 повторяются.

После запуска программы, пользователя встречает форма для загрузки изображений, а также для введения других параметров, необходимых для расчета метода Паттерсона. Присутствует валидация введенных данных.

Если валидация пройдена успешно, то запускается алгоритм выполнения метода Паттерсона. Он состоит из трех этапов:

1) Сначала отработывает метод `ProcessImage()` класса `ImageProcessorService` по результатам которого создается список считанных пиков и передается далее для расчета метода Паттерсона в качестве одного из входных параметров метода `Execute()` класса `PattersonFunctionService`.

2) Выполняется расчет метода Паттерсона, определяются основные величины.

3) Полученные результаты выполнения метода Паттерсона отправляются на форму для отображения графиков, а также отправляются на сохранение в базу данных.

База данных состоит из четырёх таблиц. Основной таблицей является таблица `experiment`, которая олицетворяет собой один проводимый эксперимент, то есть расчет функции Паттерсона до облучения ультрафиолетовым излучением и после него.

Таблица `element` хранит в себе данные о каждом доступном для анализа элементе. Эта таблица должна быть заполнена до начала работы с приложением, при старте программы проверяется, существуют ли в базе данных все необходимые таблицы.

Следующие две таблицы хранят данные непосредственно о самом эксперименте. В таблице `peak_data` хранятся данные, необходимые для расчета метода Паттерсона, а в таблице `patterson_peak` хранятся результаты этого метода.

Для тестирования работы программного комплекса был проведен расчет изменения кристаллической структуры титана, подвергнутого лазерному облучению. Рассмотрим воздействие лазерного излучения на образец α -Ti. Каждый максимум интенсивности на рентгенограмме – это отражение n -го порядка от серии плоскостей (hkl) с межплоскостным расстоянием d_{hkl} , соответствующим углам скольжения ϑ . Из уравнения Вульфа-Брэггов устанавливается связь между d_{hkl} и длиной волны излучения, в котором получена рентгенограмма [2].

$$\frac{d}{n} = d_{hkl} = \frac{\lambda}{\sin \vartheta} \quad (1)$$

Сперва необходимо определить максимумы интенсивности и соответствующие им значения углов 2ϑ . По формуле (1) определить d_{hkl} .

Для детального изучения характера структурных изменений необходимо исследовать не только положения, но и интенсивности рентгеновских рефлексов, для чего был использован метод межатомной функции (метод Паттерсона).

По экспериментальным значениям интенсивностей определим $|F|^2$:

$$I(hkl) = |F|^2 \cdot PLG \cdot K \quad (2)$$

где PLG – «пээльжэ-фактор», K – совокупность ряда факторов.

PLG фактор, а также фактор поглощения P рассчитываются с использованием формул [3]:

$$PLG = \frac{1 + \cos^2 2\vartheta}{2 \sin 2\vartheta} \quad (3)$$

$$P = \frac{1 + \cos^2 2\vartheta}{2 \sin 2\vartheta} \quad (4)$$

По вычисленным значениям $|F|^2$ проводили расчет $P(\vec{u})$. Положения корреляционных сфер сравнивали с величиной межатомного расстояния, определенной по структуре кристалла.

Нами было рассмотрено 2 варианта расчета $P(\vec{u})$:

$$P(u) = \sum_i |F_i|^2 \frac{\sin 2\pi su}{2\pi su} \quad (5)$$

$$P(u) = \sum_i |F_i|^2 \cos 2\pi su \quad (6)$$

Расчет $P(\vec{u})$ проводили в диапазоне $u=1\text{\AA} - 10\text{\AA}$ с интервалом $\Delta u=0,1\text{\AA}$. Результаты расчетов показывают, что при воздействии на титановый образец излучения рубинового лазера с $q \sim 5 \cdot 10^4 \text{ Вт/см}^2$ расщепления максимума $P(u)$ не

наблюдается, в то же время как ширины максимумов рентгеновских дифрактограмм, так и форма функции $P(u)$ существенно меняется. Это свидетельствует о значительном изменении концентрации дефектов кристаллической решетки в обработанной лазерным излучением зоне. Получено хорошее согласие рассчитанных и полученных в ходе экспериментальных исследований результатов.

Список литературы:

1. A. Y. Ivanov [et al.] Structure changes in metals after their laser treating in different conditions // Energy Fluxes and Radiation Effects (EFRE–2022): Proceedings of 8th International Congress (Tomsk, 2-8 okt. 2022). Томск : IEEE, 2022. С. 1-6.
2. Горелик С.С., Расторгуев Л.Н., Скаков Ю.А., Рентгенографический и электроннооптический анализ. М.: Металлургия, 2002.
3. Лиопо В.А., Авдейчик С.В., Овчинников Е.В., Малай Н.В., Струк В.А. Оценка параметров наночастиц на основе корреляционных функций // Прикладная математика & Физика. 2013. Т. 33. № 26 (124). С. 181-186.

УДК 004.031.6

АВТОМАТИЗИРОВАНИЯ СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ МАРШРУТНЫХ ТАКСИ, КОМПОНЕНТА ВОДИТЕЛЯ

А. А. Левчук

БРГТУ, Брест

Научный руководитель: к.т.н., доцент В. Н. Шуть

Главные недостатки маршрутного транспорта связаны со значительными эксплуатационными затратами, небольшой вместимостью транспортных средств, загрязнением окружающей среды, высоким уровнем шума, непостоянным графиком работы. Но благодаря преимуществам маршрутного транспорта перед другими видами и, несмотря на присущие ему недостатки, оно получило значительное распространение.

В данный момент организации транспорта городов Беларуси не имеют достоверной информации о перевозимых пассажирах по часам суток. Это вызывает определенные трудности в планировании графика движения, так как неизвестно, сколько может понадобиться маршруток на перевозку.

Одно из возможных решений – создать систему, позволяющую пользователям регистрировать в системе заявки на проезд маршрутным транспортом [1,2]. Это позволит рассчитывать загруженность маршрута на ближайшее время и, как следствие, корректировать количество транспортных средств на конкретном маршруте.

Основной задачей данного проекта является реализация системы на перевозку пассажиров городским общественным транспортом.