

МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ ОКСИДНИХ МАТЕРІАЛІВ ЗА ДАНИМИ РЕНТГЕНОГРАМ МЕТОДОМ РІТВЕЛЬДА

Для оксидних матеріалів мангану дуже складною є проблема інтерпретації фазового складу електрохімічно одержаних матеріалів з причини багатофазності і високої дефектності таких зразків. Певною мірою це завдання вирішується за допомогою симуляції теоретичних рентгенограм методом Рітвельда.

Метод Рітвельда — це методика обрахунку експериментальних даних для характеристики кристалічних матеріалів методом порошкової дифракції. [1] Даний метод використовує спосіб найменших квадратів, і заснований на знаходженні ступеня відповідності між вимірною та теоретичною дифрактограмами. Обчислення і уточнення параметрів кристалічної решітки (тобто міжплощинних відстаней і кутів досліджуваної речовини) проводиться з використанням статичних моделей.

Було розглянуто параметри ґратки оксидних систем мангану за допомогою програми для комп'ютерної обробки порошкових рентгенограм Powder Cell for Windows v 2.3. [2] Дане моделювання дало можливість отримати теоретичну дифрактограму, яка б враховувала зміну інтенсивностей рефлексів від масових часток фаз у цій точці. Діоксид мангану як такий може утворювати 5 власних поліморфних модифікацій: α -, β -, γ - (ϵ -), δ -, та λ - MnO_2 і декілька споріднених структур, що відповідають природним мінералам (псіломелан, романкіт, тодоркіт тощо).

Теоретична дифрактограма зразка α - MnO_2 була розрахована за вихідними даними.

Отже, метод Рітвельда дозволяє аналізувати кристалічні структури порошоків, та отримувати надійні результати навіть з дифрактограм, в яких перекриваються рефлексії від декількох окремих кристалічних фаз. Отримані таким чином дані можна використовувати при контролі технологічних процесів, а також при синтезі нових сполук.

Список літератури

1. <http://nano.msu.ru/files/materials/IV/autumn2011/expmethods/lecture09.pdf>
2. <http://www.iucr.ac.uk>, programmed by Werner Kraus & Gert Nolze (BAM Berlin), Federal Institute for Materials Research and Testing, Lab. BAM-I.33: X-Ray Structure and Phase Analysis

Науковий керівник – Г.В.Сокольський, к.х.н., доц.