

11  
К63



Ю. Г. Андреев, А. В. Бурханов, Ф. М. Зеленюк,  
С. В. Марченко, В. Ф. Петрунин, В. А. Погонин

011-85

ВЛ 3367  
УУФН

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ  
АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ ОБРАБОТКИ  
ДАНЫХ НЕЙТРОГРАФИЧЕСКОГО  
ЭКСПЕРИМЕНТА „NEUTRON“

МОСКВА 1985

Министерство высшего и среднего специального  
образования СССР

П  
К63

Московский ордена Трудового Красного Знамени  
инженерно-физический институт

Ю.Г. Андреев, А.В. Бурханов, Ф.М. Зеленик,  
С.В. Марченко, В.Ф. Петрунин, В.А. Погонин

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ  
АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ ОБРАБОТКИ  
ДАНЫХ НЕЙТРОГРАФИЧЕСКОГО  
ЭКСПЕРИМЕНТА "NEUTRON"

Препринт ОИИ-85

Утверждено  
редсоветом института

Москва 1985

Библиотека  
МИФИ

НАУЧНАЯ  
БИБЛИОТЕКА  
МИФИ

Андреев Ю.Г., Бурханов А.В., Зеленюк Ф.М., Марченко С.В., Петрунин В.Ф., Погонин В.А. Комплекс программ автоматизированной обработки данных нейтронографического эксперимента "NEUTRON". -М.: Препринт МИФИ, ОИИ-85, 1984. - 20 с.

Подробно излагаются структура комплекса и алгоритмы, реализованные в его программах. Программы написаны на языке Фортран-IV.

© Московский инженерно-физический институт, 1985 г.

Рукопись поступила в издательский отдел 29/III-85 г.

Ответственный за выпуск А.В.Бурханов

Редактор Н.М. С о б о л е в а  
Техн. редактор З. И. Х а з о в а  
Корректор Е.В. К р ю ч к о в а

---

Л.-97269

Формат 60x84 I/16

Тираж 200 экз.

Подписано в печать 12/VI-85г.

Объем 1,25 п.л.

Цена 5 коп.

Заказ I623

Уч.-изд.л. 1,2

Изд. № ОИИ-85

---

Типография МИФИ, Каширское шоссе, 31

## Введение

В настоящее время практически во всех ядерных центрах нашей страны и за рубежом проводятся исследования с использованием дифракции нейтронов в физике твердого тела и материаловедении [1]. Современный нейтронографический эксперимент требует использования ЭВМ для накопления и обработки получаемой информации. Практика применения малых ЭВМ для этих целей не позволяет в полной мере использовать широкораспространенный метод профильного анализа Ритвелда [2, 3, 4] при обработке нейтронограмм. К тому же, последний не позволяет получать информацию о структуре аморфных веществ и жидкостей и анализировать форму дифракционных линий без аппроксимации их аналитическими функциями. Встречающиеся на практике задачи обработки экспериментальных данных, такие как гармонический анализ формы дифракционной линии, расчет функции радиального распределения ядерной плотности и другие, являются некорректно поставленными и требуют большого объема вычислений, которые, однако, можно выполнить на малых ЭВМ.

Для математического обеспечения дифракционного эксперимента был создан комплекс программ обработки нейтронографических данных. В настоящей работе описаны структура комплекса, реализованные алгоритмы и возможности различных программ.

### I. Общие данные и структура комплекса программ "NEUTRON"

Комплекс может быть реализован на ЭВМ с объемом оперативного запоминающего устройства 64 Кбайт. Комплекс имеет блочную структуру и состоит из 8 основных и 22 вспомогательных подпрограмм. Все программы написаны на языке Фортран-IV. К основным программам относятся:

- " PEAK " – программа первичной автоматической обработки нейтронограмм для определения положений дифракционных максимумов и их интенсивностей;
- " HAND " – программа обработки в диалоговом режиме участков нейтронограммы, содержащих большое число перекрывающихся пиков или пиков, измеренных с малой статистикой;
- " HELL " – программа индицирования нейтронограмм неизвестной структуры в гексагональной или тетрагональной сингониях: ,

- "MIDIS" - программа определения размера области когерентного рассеяния и микроискажений по профилю нескольких дифракционных отражений исследуемого и эталонного образцов;
- "STRUC" - программа расчета структурной амплитуды и интенсивностей рефлексов при дифракции на кристаллической решетке;
- "PARAM" - программа определения величин периодов решетки и среднеквадратичных смещений атомов;
- "LIQUID" } - программы восстановления функции радиального распределения ядерной плотности для изотропных (жидких или аморфных) систем методами статистической регуляризации и регуляризации Тихонова А.Н. с различным подходом к выбору параметра регуляризации.
- "SPHERE" }

## 2. Первичная обработка данных в автоматическом режиме

### (программа "PEAK")

Программа автоматической обработки данных "PEAK" осуществляет поиск границ дифракционного максимума, его положение, ширину на полувысоте и площадь.

Входными данными для программы "PEAK" являются:

экспериментальные значения интенсивностей для каждого канала анализатора;

начальный и конечный каналы обрабатываемой нейтронограммы;

длина "плавающего отрезка" в каналах;

параметр отсева пиков;

дисперсия функции Гаусса при разрешении мультиплетов;

параметр регуляризации.

Выходными данными программы "PEAK" являются:

номер дифракционного максимума;

границы дифракционного максимума;

положение центра тяжести;

ошибка положения;

интенсивность;

ошибка интенсивности;

ширина на полувысоте дифракционного максимума.

Границы пиков на нейтронограмме ищутся методом "плавающего отрезка" [5, 6]. Выделенный пик обрабатывается методами, обычно

используемыми при обработке гистограмм. Если два или несколько пиков перекрываются в мультиплет, то для определения их параметров предварительно применяется процедура разрешения. Для этого ищется решение интегрального уравнения:

$$f(x) = \int f_0(x_0) g(x - x_0) dx_0, \quad (I)$$

где  $f(x)$  и  $f_0(x_0)$  - экспериментальные (неразрешенные) и получаемые (разрешенные) данные;  $g(x, x_0)$  - функция отклика, определяемая геометрией эксперимента. Задача решения интегрального уравнения (I) относительно  $f_0(x_0)$  в том случае, если  $f(x)$  задана с ошибкой, является некорректно поставленной. Поэтому для нахождения  $f_0(x_0)$  в программе реализован метод регуляризации А.Н. Тихонова [7]. Для уже разрешенных пиков определяется положение их центра тяжести и амплитуда. Площадь каждого пика определяется из суммарной площади пиков, образующих мультиплет, в зависимости от соотношения амплитуд разрешенных максимумов.

В программе "PEAK" используются следующие подпрограммы:  
"SQ" - вспомогательная подпрограмма для вычисления площади пика;  
"SORT" - подпрограмма сортировки границ пиков для выделения мультиплетов;  
"MULT" - подпрограммы разрешения мультиплетов;  
"GAUSS" - сервисная программа обращения матрицы методом Гаусса;  
"KXI" и "FXI" - сервисные программы.

### 3. Первичная обработка данных в диалоговом режиме (программа "HAND")

Программа "HAND" предназначена для обработки участков нейтронограммы, содержащих несколько сильно перекрывающихся пиков или пиков, измеряемых с малой статистикой.

Входными данными для программы "HAND" являются:  
экспериментальные значения интенсивностей для каждого канала анализатора;  
угол, соответствующий первому каналу анализатора;  
угловой шаг;  
границы обрабатываемого участка;  
число пиков на этом участке;  
приблизительные положения максимума каждого пика;  
число итераций.

Выходными данными программы "HAND" являются:  
 угловое положение максимума каждого пика;  
 интенсивность каждого пика;  
 ширина на половине высоты пика;  
 погрешности выходных данных.

В программе предусмотрена возможность графического изображения экспериментальных значений интенсивностей и функции, аппроксимирующей эти значения. Анализируемый участок нейтронограммы, содержащий  $N$  пиков, аппроксимируется выражением:

$$I(x) = \sum_{i=1}^N A_i \exp\left(-\frac{(x-x_{0i})^2}{2\sigma_i^2}\right) + F(x), \quad (2)$$

где  $x$  - номер канала;  $A_i$ ,  $x_{0i}$  и  $\sigma_i^2$  - соответственно амплитуда, положение и дисперсия  $i$ -го пика;  $F(x)$  - функция, аппроксимирующая фон. Величины  $A_i$ ,  $x_{0i}$  и  $\sigma_i^2$  являются варьируемыми параметрами и определяются подгонкой (2) к экспериментальным значениям градиентным методом без использования аналитического выражения производной функции  $I(x)$  [6].

На рис. I приведены результаты тестового испытания программы "HAND".

В программе "HAND" используются следующие подпрограммы:  
 "FUNCT" - подпрограмма вычисления аппроксимирующей функции;  
 "MINI" - подпрограмма минимизации;  
 "GRAFIC" - подпрограмма построения графиков.

Программа "HAND" является универсальной, поскольку пользователь может применять ее для обработки экспериментальных данных, получаемых различными методами (нейтронный, рентгеновский и др.), изменяя вид аппроксимирующей функции в подпрограмме "FUNCT".

#### 4. Индицирование нейтронограмм неизвестной структуры в гексагональной или тетрагональной сингониях (программа "HELL")

Программа "HELL" предназначена для индицирования нейтронограмм неизвестной структуры в гексагональной или тетрагональной сингониях.

Исходные данные:

число пиков на нейтронограмме;



границы каждого пика с учетом погрешности эксперимента;  
допустимое число непроиндексированных пиков;  
диапазон перебираемых индексов Миллера;  
границы изменения периодов решетки;  
шаг изменения периодов решетки.

Получаемые результаты:

параметры решетки;

индексы Миллера для заданного числа пиков.

Для индексирования применяется методика, аналогичная использованию графиков ХЭЛЛА [8], но не в графическом, а численном виде. Одному из наиболее интенсивных пиков присваиваются определенные индексы, что эквивалентно фиксации либо одного из периодов решетки, либо отношения между периодами в зависимости от выбранных индексов. Затем, в соответствии с выражением для квадрата межплоскостного расстояния, последовательно с заданным шагом применяются значения незафиксированного параметра решетки в заданных границах, и для каждого значения параметров производится перебор всех возможных индексов Миллера. Если в результате этого процесса удастся найти также значения параметров, при которых допустимое число непроиндексированных пиков меньше или равно заданному, то результат выдается на печать. Программа испытана на различных гексагональных и тетрагональных структурах и показала свою полную эквивалентность графикам ХЭЛЛА.

##### 5. Гармонический анализ профиля дифракционной линии (программа "MIDIS")

Программа "MIDIS" предназначена для определения размера областей когерентного рассеяния (ОКР) и микроискажений по профилю нескольких дифракционных максимумов исследуемого и эталонного образцов. Профиль дифракционного отражения эталонного образца обусловлен геометрическими факторами дифракционной установки.

Исходными данными программы "MIDIS" являются:

число дифракционных пиков;

участки нейтрограмм, содержащие дифракционные пики исследуемого и эталонного образцов;

длина волны нейтронов;

положения центров тяжести дифракционных пиков в удвоенных углах Вульфа-Брэгга;

индексы Миллера атомных плоскостей, дифракционные отражения от которых подлежат обработке;

угловой шаг на нейтронограмме.

Выходными данными программы "MIDIS" являются:

средний размер ОКР;

величина среднеквадратичной деформации в зависимости от расстояния между атомами.

На первом этапе выполнения программы "MIDIS" проводится построение кривых распределения интенсивности, обусловленного физическими факторами  $f(x)$ . Для выделения  $f(x)$  решается уравнение

$$h(x) = \int_{\alpha}^{\beta} f(y) g(x-y) dy \equiv A \cdot f, \quad (3)$$

где  $h(x)$  и  $g(x)$  - профили дифракционных линий исследуемого и эталонного образцов. Так как исходные экспериментальные данные заданы с ошибкой, то поставленная задача является некорректной. Для нахождения устойчивого решения интегрального уравнения (3) используется метод регуляризации, основанный на определении экстремума функционала

$$M^{\alpha}[f] = \|A_n f - h_g\|^2 + \alpha \|f\|^2 \quad (4)$$

и выборе параметра регуляризации в соответствии с принципом обобщенной невязки [9]. Решение интегрального уравнения (3) ищется в виде ряда Фурье с действительными  $F_n^A$  и мнимыми  $F_n^M$  коэффициентами. На рис. 2 представлены соответственно профили дифракционных отражений от семейства плоскостей (200) ультрадисперсного порошка никеля  $h(x)$  (размер частиц 16 нм), крупного эталонного порошка никеля  $g(x)$  (размер частиц  $\gg 100$  нм), а также профиль  $f(x)$ , рассчитанный по коэффициентам  $F_n^A$  и  $F_n^M$ , полученным при  $\alpha = 0,076$ . Отражения  $h(x)$  и  $g(x)$  сняты на нейтронографической установке МКЭИ с длиной волны нейтронов 0,104 нм и с шагом по удвоенному углу Брэгга  $6'$ . Затем для каждого отражения рассчитываются значения

$$F_n = \sqrt{(F_n^A)^2 + (F_n^M)^2}, \quad (5)$$

нормированные на нулевой коэффициент Фурье  $F_0$ . Для  $i$ -го дифракционного пика номера коэффициентов Фурье  $n$  связаны с расстоянием в кристаллической решетке  $L_n$  соотношением

$$L_n = 2tg \theta_i d_{hkl} n / S \cdot N, \quad (6)$$

где  $S$  - угловой шаг на нейтронограмме;  $N$  - число точек на пике;

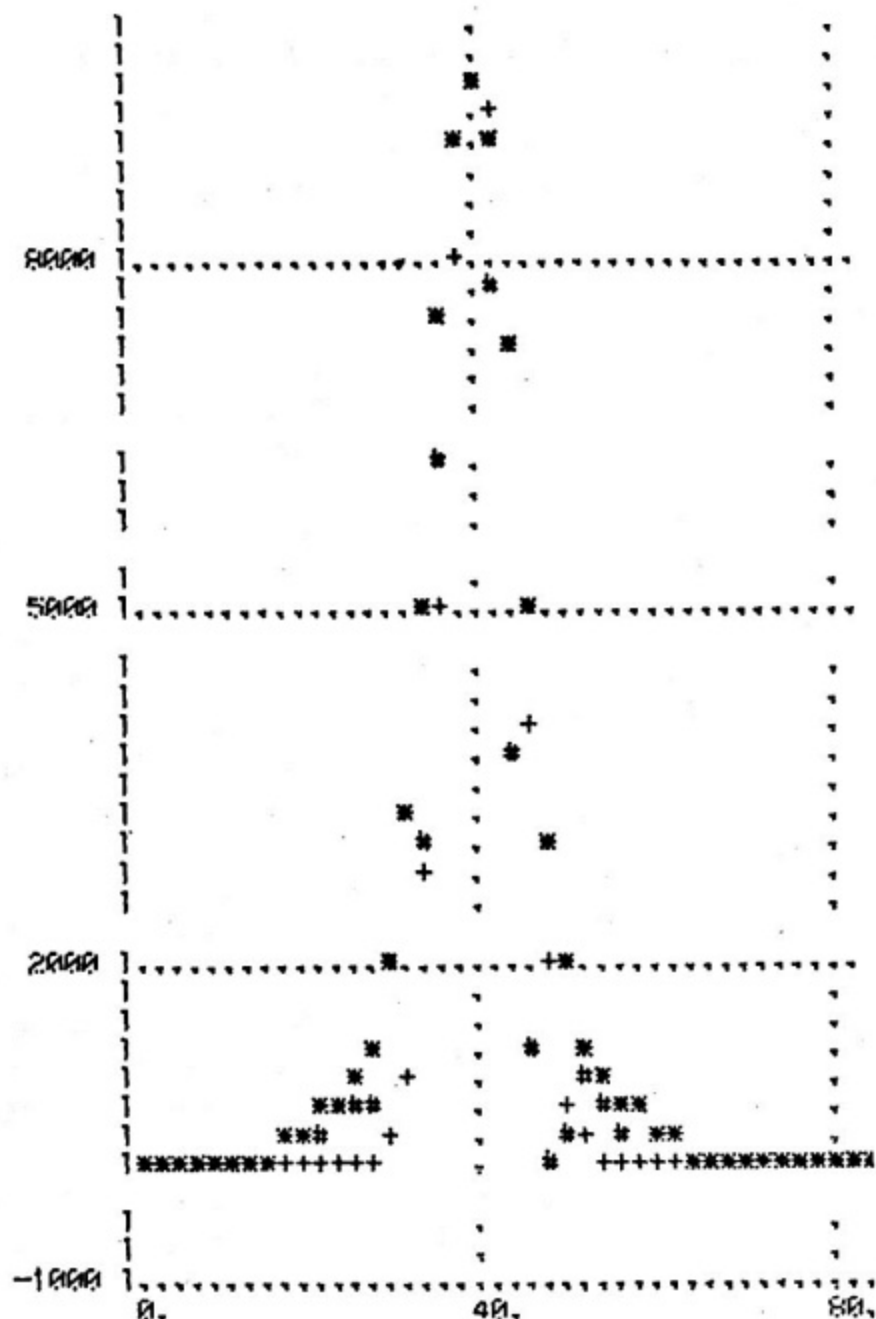


Рис. 2. Нормированные на максимальное значение интенсивности профили дифракционных отражений ультрадисперсного порошка: \* -  $h(x)$ , + -  $g(x)$ , # -  $f(x)$  (200)

$d_{hkl i}$  - межплоскостное расстояние в решетке, соответствующее  $i$ -му дифракционному пику.

По полученным данным для всех отражений методом наименьших квадратов (МНК) строится зависимость  $\ln F_{Ln} = f(h^2 + k^2 + l^2)$  и по отрезку, отсекаемому на оси ординат, определяется  $\ln F_{Ln}^{exp}$ . Величина  $F_{Ln}^{exp}$  зависит только от размера ОКР. По разности  $\ln F_{Ln}$  и  $\ln F_{Ln}^{exp}$

определяются величины  $L_n F_n^M$ , зависящие только от величины микроискажений решетки. На графике зависимости  $F_{L_n}^{OCP}$  от  $L_n^M$  с помощью МНК строится секущая, проходящая через значения  $F_{L_1}^{OCP}$ ,  $F_{L_2}^{OCP}$  и  $F_{L_3}^{OCP}$ , и по величине отсекаемого на оси абсцисс отрезка определяется размер  $D$  ОКР. Величина среднеквадратичной деформации находится в виде

$$\sqrt{\langle L_n^2 \rangle} = \frac{d_{hkl}}{\sqrt{2} \pi} \sqrt{-L_n F_n^M}. \quad (7)$$

Программа "MIDIS" предназначена для работы в диалоговом режиме и снабжена необходимыми комментариями. Используются следующие подпрограммы:

- "LINEP" – подпрограмма решения интегральных уравнений типа свертки;
- "AXB" – подпрограмма проведения прямой через заданные точки по МНК;
- "COEF" – подпрограмма определения значений  $F_n$  для различных дифракционных линий, соответствующих одинаковому значению  $L_n = L_1 \cdot n$ ;
- "NORMA" – подпрограмма вычитания фона на дифракционной картине и нормировки экспериментальных данных на значение интенсивности в максимуме;
- "GRAFIC" – подпрограмма для графического изображения исходных и получаемых данных в ходе работы программы "MIDIS".

В "MIDIS" предусмотрена возможность поправки исходных данных на так называемый "крюк-эффект" [10]. Программа испытана на рассчитанных на ЭВМ профилях нейтрон-дифракционных отражений от малых частиц с известными значениями  $D$  и  $\sqrt{\langle L_n^2 \rangle}$ .

#### 6. Расчет структурной амплитуды и интенсивностей рефлексов при дифракции на кристаллической решетке (программа "STRU")

Программа "STRU" позволяет вычислять структурную амплитуду и интенсивность рефлексов при дифракции на кристаллической решетке.

Исходными данными для программы "STRU" являются:

- тип сингонии;
- число атомов;
- координаты атомов элементарной ячейки;

амплитуды когерентного рассеяния;  
 параметры элементарной ячейки;  
 длина волны монохроматических нейтронов;  
 угловой диапазон, в который попадают искомые отражения.  
 В результате счета на цифропечать выводятся:  
 угол положения дифракционного отражения;  
 индексы Миллера данного отражения;  
 значения структурной амплитуды, ее действительная и мнимая части;

интенсивность отражения;  
 величина вектора обратной решетки;  
 фактор повторяемости.

Вычисление интенсивности рефлексов производится на основании формулы

$$I(\vec{q}) = A(\mu, \vec{q}) T(\vec{q}) |F(\vec{q})|^2, \quad (8)$$

где  $A(\mu, \vec{q})$  – фактор поглощения для цилиндрического образца;  $T(\vec{q})$  – температурный фактор Дебая-Валлера;  $\vec{q}$  – вектор рассеяния;

$$F(\vec{q}) = \sum_{j=1}^N b_j e^{i\vec{q}\vec{r}_j}, \quad (9)$$

( $\vec{r}_j$  – радиусы-векторы атомов элементарной ячейки;  $N$  – число атомов в элементарной ячейке;  $b_j$  – ядерная амплитуда рассеяния).

Вычисление структурных амплитуд предусмотрено для любой из семи сингоний. Для удобства работы и экономии времени пользователя в программе содержатся координаты наиболее распространенных структур, которые не нужно задавать. Для сокращения времени счета целесообразно ограничиться малым диапазоном двойного угла Брэгга, особенно при расчетах интенсивностей отражений, соответствующих пространственным группам низкой симметрии. Программа испытана на известных структурах [4, 8].

#### 7. Определение величин периодов решетки и среднеквадратичных смещений атомов (программа "PARAM")

Программа "PARAM" предназначена для расчета значений параметров элементарной ячейки, величин среднеквадратичных смещений атомов и фактора недостоверности в кубической, гексагональной и тетрагональной сингониях.

Входными данными для программы "PARAM" являются:

- тип сингонии;
- число обрабатываемых дифракционных пиков;
- длина волны нейтронов;
- ошибка в определении длины волны;
- ошибка в определении угла лимба дифрактометра, соответствующего рассеянию нейтронов на нулевой угол Вульфа-Брэгга;
- местоположения центров тяжести пиков в удвоенных углах Вульфа-Брэгга;
- ошибки в определении этих положений;
- индексы Миллера  $h, k, l$  атомных плоскостей, дифракционные отражения от которых подлежат обработке;
- расчетные интенсивности дифракционных отражений;
- интегральные интенсивности экспериментальных отражений;
- относительная ошибка в определении экспериментальных интенсивностей.

Выходными данными программы "PARAM" являются:

- величины периодов решетки и ошибки в их определении;
- величина среднеквадратичных смещений атомов и ошибка в ее определении;
- величина фактора достоверности.

Периоды решетки рассчитываются следующим образом.

#### Кубическая сингония

Для каждого дифракционного отражения определяется величина периода решетки  $a_i$ . Полученные данные усредняются с весовыми множителями, которые определяются как квадраты обратных величин случайных ошибок величины  $a_i$ .

#### Гексагональная и тетрагональная сингонии

Величины периодов  $a_i$  и  $c_i$  рассчитываются из каждой пары дифракционных отражений. Полученные данные усредняются со статистическим весом. Ошибки в определении средних значений  $\bar{a}$  и  $\bar{c}$  рассчитываются как ошибки среднего взвешенного. Величина среднеквадратичных смещений атомов  $(\bar{u}^2)^{1/2}$  находится из соотношения

$$\sqrt{\bar{u}^2} = \sqrt{\frac{3B}{16\pi^2}}, \quad (10)$$

где  $B$  определяется по тангенсу угла наклона прямой  $\ln(I_i^p/I_i^s) = f(d_i)$ ;  $d_i$  — межплоскостное расстояние в кристаллической решетке, соответствующее  $i$ -му дифракционному пику.

Фактор достоверности  $R$  рассчитывается по формуле

$$R = \frac{\sum_i W_i |I_i^p - I_i^e|}{\sum_i W_i I_i^e}, \quad (II)$$

где  $W_i$  - статистический вес интегральной интенсивности  $i$ -го дифракционного пика;  $I_i^p$ ,  $I_i^e$  - нормированные расчетные и экспериментальные интенсивности пиков.

Программа "PARAM" предназначена для работы в диалоговом режиме и снабжена комментариями. Программа содержит две подпрограммы:

- "AVER" - подпрограмма вычисления среднего взвешенного значения параметра и его ошибки;
- "AXB" - подпрограмма расчета параметров прямой, проведенной через неравноточные измерения МНК.

Программа испытана с помощью расчета угловых положений дифракционных пиков, а также их интегральных интенсивностей при заданных значениях  $a$ ,  $c$ ,  $\sqrt{u^2}$ .

#### 8. Восстановление функции радиального распределения ядерной плотности для изотропных (жидких или аморфных) систем (программы "LIQUID" и "SPHERE")

Для восстановления функции радиального распределения (ФРР) ядерной плотности систем, имеющих лишь ближний порядок, были разработаны два алгоритма, реализованные в программах "LIQUID" и "SPHERE". Оба алгоритма позволяют найти ФРР, устойчивую к статистическим изменениям экспериментальных данных, однако при этом используются различные методы построения регуляризованного решения и выбора параметра регуляризации.

Программа "LIQUID" предназначена для расчетов структурного фактора и восстановления регуляризованной ФРР ядерной плотности аморфной системы, содержащей до десяти различных сортов атомов, что достаточно для большинства соединений.

Входные данные программы:

- значения интерференционной функции;
- число точек нейтрограммы;
- времена экспозиции на точке исследуемого и эталонного ванадиевого образцов;
- число атомов в единице объема;
- длина волны нейтронов;
- граничные значения отрезка, на котором отсутствуют ложные пики;

радиус и высота цилиндрического образца;  
 начальный угол и шаг измерений;  
 количество различных элементов, входящих в состав исследуемого материала;  
 атомная концентрация и порядковый номер каждого элемента;  
 начальное значение параметра регуляризации, шаг изменения параметра.

Выходные данные программы "LIQUID":  
 массив ФРР в зависимости от расстояния;  
 массив структурного фактора в зависимости от вектора рассеяния.

Структурный фактор  $F(\vec{q})$  определяется из [11]:

$$F(\vec{q}) = \frac{I(\vec{q})}{\alpha(\vec{q}) A(\vec{q})} - \Delta_{mn} - \Delta, \quad (12)$$

где  $|\vec{q}| = \frac{4\pi \sin \theta}{\lambda}$  - переданный импульс;  $\lambda$  - длина волны,  $\theta$  - угол рассеяния;  $I(\vec{q})$  - скорость счета на нейтронограмме;  $\alpha(\vec{q})$  - нормировочная функция;  $A(\vec{q})$  - функция, учитывающая поглощение;  $\Delta_{mn}$  - поправка на многократное рассеяние;

$$\Delta = \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L c_i c_j f_{ij}(\vec{q}) [\langle b_i \rangle \langle b_j \rangle - b_i^{HK} b_j^{HK}] + \sum_{i=1}^L c_i \langle b_i^2 \rangle, \quad (13)$$

( $L$  - число сортов атомов;  $f_{ij}(\vec{q})$  - поправки Пачека;  $\langle b_i \rangle$  и  $b_i^{HK}$  - амплитуды когерентного и некогерентного рассеяния на ядре  $i$ -го сорта). Функция поглощения для цилиндрических образцов  $A(\vec{q})$  вычисляется обычным способом [12]. Обобщенная функция радиального распределения ядерной плотности представлена в виде

$$\Psi(R) = 4\pi R^2 \rho_0 \left[ \sum_{i=1}^L c_i \langle b_i \rangle^2 + \frac{2R}{\pi} \int_0^{q_{max}} q F(q) \sin(qR) dq \right], \quad (14)$$

где  $\rho_0$  - ядерная плотность. Для вычисления  $\Psi(R)$  по формуле (14) в программе используются быстрое преобразование Фурье и метод статистической регуляризации решения [13]. Для этого подынтегральное выражение (14) умножается на стабилизатор вида

$$\frac{\gamma(\beta, q)}{\gamma(\beta, q) + \Delta F(q)}. \quad (15)$$

Здесь функция  $\gamma(\beta, q) = \beta^2/q^2 \exp(-\beta^2/q^2)$  играет роль, аналогичную параметру регуляризации в методе Тихонова [7];  $\Delta F(q)$  - среднеквадратичная ошибка функции  $F(q)$ . При выборе параметра  $\beta$  используется априорная информация о неотрицательности функции  $\Psi(R)$  и об отсутствии ложных максимумов на заданном отрезке  $[0, R_{гр}]$ .

В процессе восстановления  $\varphi(R)$  вычисляется сумма квадратов отклонений  $\varphi(R)$  от нуля на отрезке  $[0, R_{gp}]$  и величина выбирается, исходя из минимума этой суммы.

Программа "LIQUID" содержит следующие подпрограммы:

- "PASE" – подпрограмма, содержащая таблицу амплитуд когерентного и некогерентного рассеяния, сечения рассеяния и массы элементов периодической системы;
- "ABSORB" – подпрограмма расчета поправок на поглощение;
- "STAR" } – сервисные подпрограммы;
- "FUNK" }
- "POLIN" – подпрограмма аппроксимации полиномом по методу наименьших квадратов;
- "MULSC" – подпрограмма вычисления поправок на многократное рассеяние;
- "PLACEK" – подпрограмма вычисления поправок Плачека;
- "GRAFIC" – подпрограмма построения графиков.

Программа "LIQUID" была использована для построения ФРП аморфных гидрида бериллия, нитрида ниобия, стеклообразного селена. Реализованный в программе алгоритм [14] позволил эффективно подавить ложные максимумы, возникающие вследствие статистического характера данных и обрыва экспериментальной кривой. На рис.3 представлены функции радиального распределения аморфного гидрида бериллия, восстановленные различными методами.

В отличие от предыдущих примеров на функции, восстановленной по программе "LIQUID", практически подавлены ложные максимумы;  $\varphi(R)$  близка к 0 при  $R=0$ , что отвечает ее физическому смыслу. Следует отметить, что истинные максимумы остаются достаточно узкими.

Алгоритм, реализованный в программе "LIQUID", использует априорную информацию об отсутствии ложных максимумов на отрезке  $[0, R_{gp}]$ . Однако не всегда достаточно точно известно значение  $R_{gp}$ , задаваемое пользователем, поэтому в программе "SPHERE" был реализован алгоритм, при котором параметр регуляризации выбирается в соответствии с принципом обобщенной невязки.

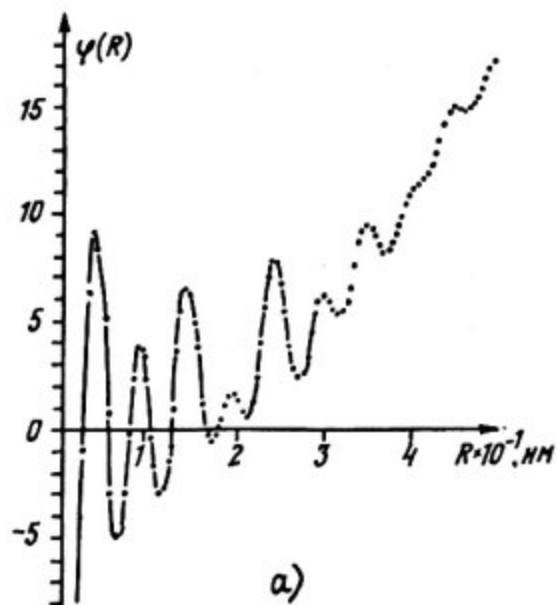
Входные данные программы "SPHERE":

значения интерференционной функции;

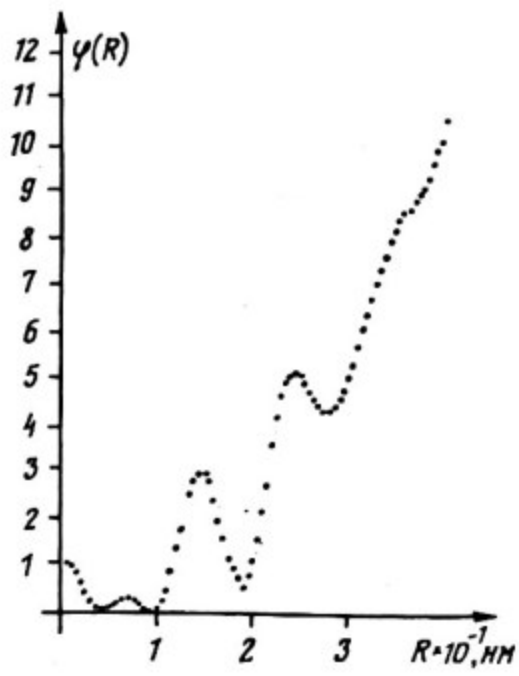
число точек на нейтронограмме;

сечение когерентного и некогерентного рассеяния;

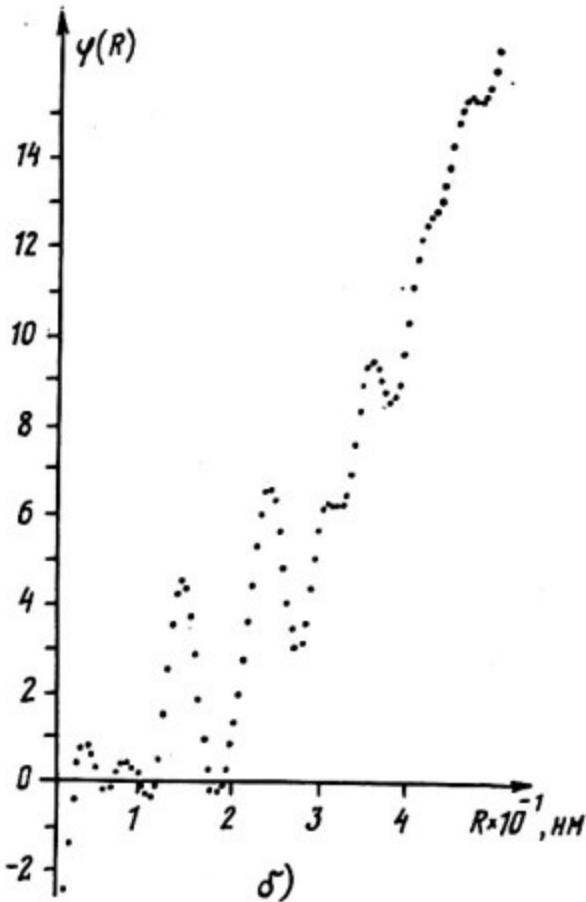
ядерная плотность материала;



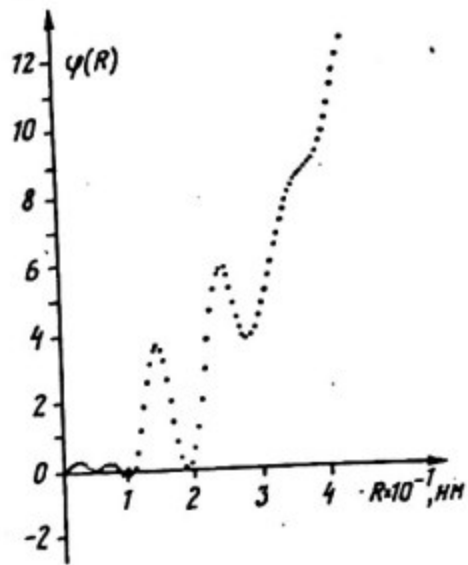
a)



б)



в)



г)

Рис. 3. Функции радиального распределения аморфного гидрида бериллия, восстановленного: без применения специальных мер, улучшающих сходимость (а); при предварительном двукратном сглаживании полиномами третьего порядка (б); по методу Лорха (в); по программе "LIQUID" (г)

величина области когерентного рассеяния (ОКР);  
 значение фона;  
 параметр нормировки.

Выходные данные программы "SPHERE":

ФРР;

оптимальный параметр регуляризации.

Задача восстановления ФРР из дифракционных данных сводится к решению интегрального уравнения

$$A\psi = \int_0^R \psi(r) K(r, q) dr = x(q), \quad (I6)$$

где  $A$  — известный оператор;  $K(r, q) = \sin qr$  — ядро интегрального уравнения;  $x(q) = q[S(q)-1]/4\pi$ ;  $S(q)$  — интерференционная функция; функция  $\psi(r)$  связана с искомой ФРР  $\rho(r)$  соотношением  $\psi(r) = r[\rho(r)-\rho_0]$  [16];  $R$  — величина ОКР исследуемого материала. Решение уравнения (I6) ищем в виде ряда

$$\psi(r) = \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n \varphi_n(r) / (1 + \alpha \lambda_n) \quad (I7)$$

методом регуляризации Тихонова [7], где

$$\beta_n = \int_0^{R_{max}} \psi(r) \varphi_n(r) dr - \quad (I8)$$

коэффициенты Фурье разложения функции  $\psi(r)$  на отрезке  $[0, R_{max}]$ . Нужно отметить, что функция  $\psi(r)$  осциллирует и затухает при возрастании  $r$ . Физически это означает, что ОКР имеют ограниченную протяженность, определяемую по уширению дифракционного пика для каждого конкретного материала [7].

$$\varphi_n = A_n \sin(\sqrt{\lambda_n} \cdot r) = A_n \sin q_n r \quad (I9)$$

являются собственными функциями задачи Литурма-Лиувилля, а

$$\lambda_n = (\pi/R_{max})^2 n^2 - \quad (20)$$

собственными значениями, определяемыми средним размером ОКР.

#### Список литературы

1. Нозик Ю.З., Озеров Р.П., Хенниг К. Структурная нейтронография. — М.: Атомиздат, 1979.
2. Rietveld H.M. Line profiles of neutron powder diffraction peaks for structure refinement, *Acta Cryst.*, 1967, 22, p. 151-152.

3. Rietveld H.M. *A profile refinement method for nuclear and magnetic structures*, *J. Appl. Cryst.*, 1969, vol. 2, p. 65-71.
4. Albinati A, Willis B.T.M. *The Rietveld Method in Neutron and X-ray Powder Diffraction*, *J. Appl. Cryst.*, 1982, vol. 15, p. 361-374.
5. Волков Н.Г., Чубченко В.Г., Чураков А. К. - Дубна: ОИЯИ, БИ-10-80-745, 1980.
6. Чураков А.К., Бялко А.А., Волков Н.Г. и др. Пакет программ "АИТОР" для автоматизированной обработки спектральной информации на малых ЭВМ. - Дубна: ОИЯИ, 10-83-852, 1983.
7. Тихонов А.Н., Арсенин В.Д. Методы решения некорректных задач. - М.: Наука, 1974.
8. Миркин Л.И. Рентгеноструктурный анализ. Индексирование рентгенограмм: Справочное руководство. - М.: Наука, 1981.
9. Тихонов А.Н., Гончаровский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Регуляризирующие алгоритмы и априорная информация. - М.: Наука, 1983.
10. Русаков А.А. Рентгенография металлов. - М.: Атомиздат, 1977.
11. Физика простых жидкостей/Под ред. Г.Темперли. - М.: Мир, 1973.
12. Bleck I.A., Averbach B.L. *Multiple Scattering of neutrons in vanadium and copper*. - *Phys. Rev.*, 1965, vol. 137, p. 113-116.
13. Турчин В.Ф. Решение уравнения Фредгольма I рода в статистическом ансамбле гладких функций. - ЖВМ и МД, 1967, т. 7, № 6, с. 1270-1284.
14. Марченко С.В., Петрунин В.Ф. Восстановление истинной функции радиального распределения ядерной плотности: Тезисы докладов Республиканской научно-технической конференции. Интегральные уравнения в прикладном моделировании. - Киев, 1983.
15. Lorch E. *Conventional and elastic neutron diffraction from vitreous silica*. - *J. Phys. C: solid State Phys.*, 1970, vol. 3, №6, p. 1314-1322.
16. Yarnel J.W., Katz M.J., Werzel R.G. *Structure factor and radial distribution function of liquid argon of 85°K*. - *Phys. Rev. A*, 1973, vol. 7, №6, p. 2130-2144.
17. Федотов А.И. Линейные некорректные задачи со случайными ошибками в данных. - Новосибирск: Наука СО АН СССР, 1981.

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение . . . . .	3
1. Общие данные и структура комплекса программ "NEUTRON"	3
2. Первичная обработка данных в автоматическом режиме (программа "PEAK") . . . . .	4
3. Первичная обработка данных в диалоговом режиме (программа "HAND") . . . . .	5
4. Индексирование нейтронограмм неизвестной структуры в гексагональной и тетрагональной сингониях (программа "HELL") . . . . .	6
5. Гармонический анализ профиля дифракционной линии (программа "MIDIS") . . . . .	8
6. Расчет структурной амплитуды и интенсивностей рефлек- сов при дифракции на кристаллической решетке (программа "STRUC") . . . . .	II
7. Определение величин периодов решетки и среднеквадра- тичных смещений атомов (программа "PARAM") . . . . .	I2
8. Восстановление функции радиального распределения ядер- ной плотности для изотропных (жидких или аморфных) си- стем (программы "LIQUID" и "SPHERE") . . . . .	I4
Список литературы . . . . .	I8