

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФРАКЦИОННЫХ КАРТИН ДЕФЕКТНЫХ И НАНОРАЗМЕРНЫХ ПОРОШКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

Зимин А.А.

научный руководитель д-р физ.-мат. наук Исхаков Р. С.

*Сибирский федеральный университет*

Целью работы является реализация расчетно-эффективного алгоритма моделирования дифракционных картин наноразмерных порошковых материалов в параллельном исполнении с использованием современных видеокарт. Анализ дифракционных картин дефектных и наноразмерных материалов осложнен тем, что каждый вид дефектов дает свой вклад в профиль дифракционных отражений, разделить которые не всегда возможно. Широко используемый метод Ритвельда и его модификации базируются на модели идеального кристалла, в то время как дефекты кристаллической структуры являются фактором, «мешающим» анализу материала. Более того, профиль отражений описывают произвольными аналитическими функциями, не всегда несущими физический смысл. В этом случае необходимы подходы, рассматривающие дефекты как неотъемлемую часть структуры. Полнопрофильный анализ использует расчетные интенсивности, в то время как профиль дифракционной линии моделируется эмпирически. Моделирование не только интенсивности, но и профиля рефлексов может послужить решением вышеуказанных проблем.

Корректный расчет порошковой дифракционной картины наноматериала «из первых принципов», возможен с двух сторон и, как минимум, двумя методами: в реальном пространстве посредством уравнения Дебая и его серьезных модификаций – метод DSE [1], и в обратном пространстве через прямой аналитический расчет вклада каждого вида дефектов – метод WPPM. Эти два подхода дополняют друг друга. Однако осуществление модельных расчетов «из первых принципов» в реальной решетке (DSE) до недавнего времени занимало слишком много ресурсов – уравнение Дебая рассматривали в основном применительно к неупорядоченным либо аналитически описываемым системам. Перенос расчетных алгоритмов на массивно-параллельные системы, особенно на современные видеокарты, заметно повышает скорость расчета и привлекает в последнее время все больший интерес ведущих специалистов в кристаллографическом моделировании наноструктур [2].

В настоящей работе предпринята успешная попытка разработки такого пакета. Программа реализована на языке Python с применением пакетов численного анализа NumPy и SciPy и средств визуализации Matplotlib, пользовательский интерфейс основан на библиотеке Qt, задачи оптимизации решаются средствами свободной библиотеки OpenOpt. Непосредственный расчет дифракционной картины с использованием модифицированного уравнения Дебая реализован гетерогенно – основной код выполняется на хосте (CPU), а непосредственный расчет элементов суммы и последующее параллельное суммирование – на устройстве (GPU). Целесообразность параллелизации вычислений очевидна при работе с суммами, но нет никакой необходимости портировать весь код на GPU. Предварительная подготовка массивов данных вынесена во внешнюю фортран-библиотеку, а всё воедино связано Python-скриптом с интерфейсами к CUDA C – PyCUDA, и к фортрану – f2py. Для иллюстрации возможностей метода применительно к оценке среднего размера кристаллитов рассмотрим стандартную рентгенограмму системы Al-6%Mg, подвергнутой механоактивации в течение 6 часов. Оптимальный модельный спектр и

исходная рентгенограмма представлены на рисунке 1. Поиск минимума целевой функции в данном случае представляет собой задачу смешанной целочисленной оптимизации, решение которой осуществлено с применением генетического алгоритма, реализованного в пакете OpenOpt. Как видно из представленных графиков, наблюдается удовлетворительное соответствие модельных расчетов и экспериментальных данных. Оценка среднего размера кристаллитов системы Al-6%Mg составляет около 16x16x16 нм. Поскольку данная модель не учитывает дефекты кристаллической решетки, а касается лишь размерного уширения, наблюдается расхождение в области отражений высшего порядка и почти идеальное соответствие в области малых углов. Этот факт согласуется с зависимостью деформационного уширения от порядка отражения и независимостью от него размерного вклада.

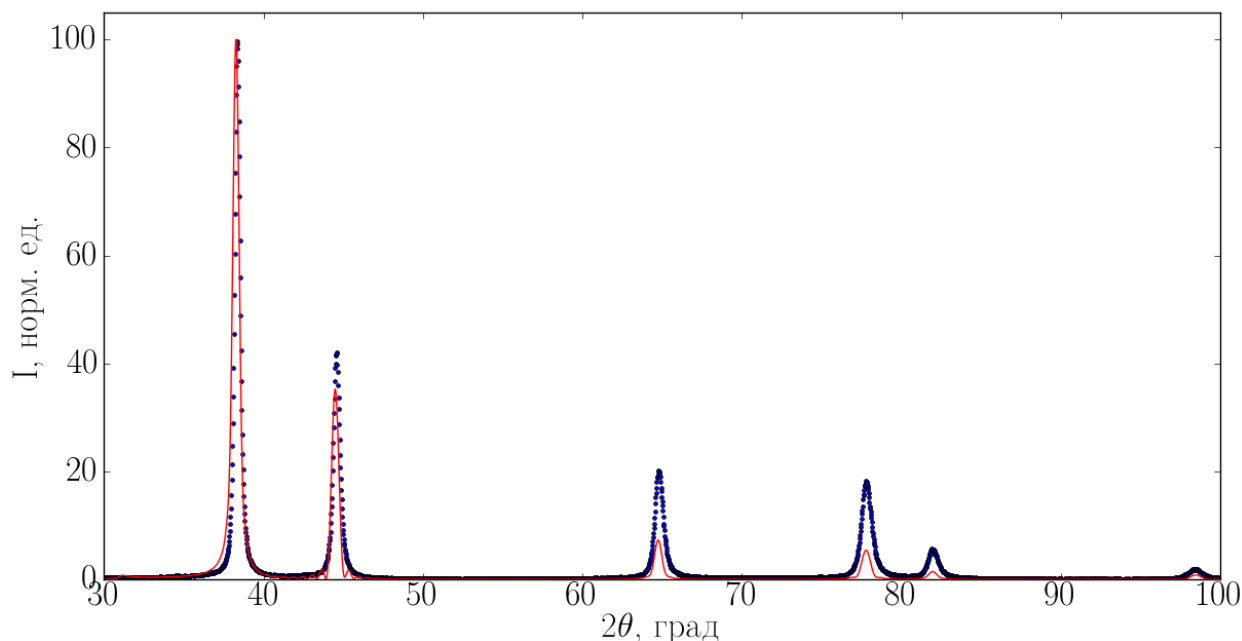


Рисунок 1 - Сопоставление модельной и экспериментальной рентгенограмм твердого раствора системы Al-6%Mg

Реализован расчетно-эффективный параллельный алгоритм моделирования дифракционных картин порошковых материалов. Верификация проведена на стандартной рентгенограмме системы Al-6%Mg, подвергнутой механоактивации в течение 6 часов. Модельные расчеты с учетом границ применимости использованных упрощений хорошо соответствуют экспериментальным данным. Разница между отдельными компиляторами (ifort, gfortran) оказывается несущественной при выполнении кода на GPU. Таким образом, лимитирующей стадией теперь является ответ от видеокарты. На возникшие по работе вопросы автор готов ответить по электронной почте: reyenka@gmail.com.

1. Thomas, N.W. A new approach to calculating powder diffraction patterns based on the Debye scattering equation / N.W.Thomas // Acta Crystallographica. – 2010. – Vol. A66. – P. 64 – 77.
2. Gelisio, L. Real-space calculation of powder diffraction patterns on graphics processing units / L. Gelisio, C. Ricardo, M. Leoni, P. Scardi // Journal of Applied Crystallography. – 2010. – Vol. 43. – P. 647 – 653.