

Федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Институт цветных металлов и материаловедения

институт

Композиционные материалы и физико-химия металлургических процессов

кафедра

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой

\_\_\_\_\_ А.Ф. Шиманский

подпись      инициалы, фамилия

« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20 \_\_ г.

**МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ**

«Разработка методик количественного полнопрофильного  
рентгенодифракционного анализа для производственного аналитического  
контроля»

тема

22.04.01 Материаловедение и технологии материалов

код и наименование направления

22.04.01.03 Перспективные материалы и методы их исследования

код и наименование магистерской программы

Научный руководитель

\_\_\_\_\_

подпись, дата

доцент., к.т.н.

должность, ученая степень

П.С. Дубини

инициалы, фамилия

Выпускник

\_\_\_\_\_

подпись, дата

А.В. Груздев

инициалы, фамилия

Рецензент

\_\_\_\_\_

подпись, дата

М.Н.М., К.Х.Н.

должность, ученая степень

Ю.Н. Зайцева

инициалы, фамилия

Красноярск 2018

## РЕФЕРАТ

Тема магистерской диссертации: «Разработка методик количественного полнопрофильного рентгенодифракционного анализа для производственного аналитического контроля» содержит 91 страницу текстового документа, количество таблиц 25, количество иллюстраций 13, 91 использованных источников.

**Целью работы:** Разработка и апробация нестандартных автоматизированных методик количественного рентгенофазового анализа (КРФА) по методу Ритвельда состава следующих систем: электролит алюминиевого производства и сульфидная руда ПАО «ПОЛЮС».

**Актуальность работы:** При разработке современных функциональных, композиционных и др. поликристаллических и нанокристаллических материалов, при разведке, добыче и переработке минеральных ресурсов, при решении многих исследовательских материаловедческих задач, в аналитическом контроле минерального сырья, технологических продуктов и продукции ряда производств, и т.д. необходим анализ их элементного и минералогического состава.

Однако, в последние десятилетия, с бурным развитием цифровых технологий и приборно-технической базы производственные лаборатории начинают отходить от устаревших методик и переходить на современные, экспрессные, точные методы анализа, одним из таких является рентгенофазовый анализ (РФА). Таким образом, разработка методик РФА в металлургическом производстве является перспективной, научной задачей, требующей индивидуального и тщательного подхода

**Задачами работы** являлись следующее:

1. Разработка 2-х методик нестандартного КРФА с использованием ПО Bruker (TOPAS).

2. Их апробация на анализе минерального состава образцов: 1) синтетических калий-кальцийсодержащих электролитов; 2) руд и технологических продуктов Олимпиаденского месторождения, – с получением количественных характеристик содержаний фаз.

3. Оценка точности данных КРФА и их соответствия с данными синтеза для электролитов; с данными кристаллооптического минералогического (КМА) и химического (ХА) анализов для руд.

4. Выработка рекомендаций по внедрению разработанных методик КРФА в заводских лабораториях.

Разработаны методики нестандартного автоматического КРФА по методу Ритвельда на основе программы TOPAS для анализа.

Апробация методики на синтетических образцах электролита показала, что КО и КО (KF) по методу Ритвельда соответствуют КО, рассчитанному из данных синтеза с СКО ~ 0,02 и 0,04 и не превышают требуемого на производстве отклонения в 0,04.

Апробация методики на образцах ПАО «Полюс» показала отсутствие случайной погрешности. Максимальное СКО =1,9% по градуированным графикам зависимости концентрации фазы от ее интенсивности составило для кварца, при этом СКО<sub>отн.</sub> ~ 6%.

Разработан ряд рекомендаций по внедрению методик КРФА в заводских лабораториях

Федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Институт цветных металлов и материаловедения  
институт

Композиционные материалы и физико-химия металлургических процессов  
кафедра

УТВЕРЖДАЮ  
Заведующий кафедрой

подпись

инициалы, фамилия

«        »

2018г.

**МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ**

«Разработка методик количественного полнопрофильного  
рентгенодифракционного анализа для производственного аналитического  
контроля»  
тема

22.04.01 «Материаловедение и технологии материалов»  
код и наименование направления

22.04.01.03 «Перспективные материалы и методы их исследования»  
код и наименование магистерской программы

Научный руководитель

подпись, дата

доцент, к.т.н

должность, ученая степень

П. С. Дубинин

инициалы, фамилия

Выпускник

подпись, дата

А. В. Груздев

инициалы, фамилия

Рецензент

подпись, дата

М.Н.М., К.Х.Н

должность, ученая степень

Ю. Н. Зайцева

инициалы, фамилия

Красноярск 2018