

ІНТЕРФЕЙС ПРОГРАМИ ДЛЯ ЧИСЕЛЬНОГО МОДЕЛЮВАННЯ СПЕКТРІВ РЕНТГЕНІВСЬКОЇ ДИФРАКЦІЇ

Литвиненко Д.О., *студент*; КІ СумДУ, гр. ЕП-22к

Ніколаєнко А.О., *студент*, КІ СумДУ, гр. ЕП-22к

На сьогодні відомі різні чисельні методи, які дозволяють оцінити мікроструктуру плівкових матеріалів та її подальший вплив на фізичні властивості зразків. Більшість із таких методів обмежуються даними досліджень, отриманими за допомогою растрової або просвічуючої електронної мікроскопії, атомно-силової мікроскопії, рентгенівського дифракційного аналізу. Проте, оскільки густина дефектів в плівках дуже висока, то для їх виявлення в багатьох випадках роздільної здатності електронно-мікроскопічних зображень не достатньо. Тому замість традиційних підходів для вивчення мікроструктури плівок (розміру кристалітів, дефектів кристалічної будови) активно застосовуються передові чисельні методи.

Як приклад для моделювання спектрів рентгенівської дифракції використовують програму DIFFaX, яка написана на мові Fortran. Для обчислення середньої хвильової перешкоди від атомних шарів окремих кристалів DIFFaX експлуатує повторювані шаблони, які знаходяться у вигляді випадкових послідовностей.

Інтерфейс розроблено нами в середовищі Visual Studio (на мові C#). Він не зачіпає принципу дії програми DIFFaX, а навпаки повністю взаємодіє з нею. Діалогове вікно інтерфейсу складається з п'яти вкладок, кожна з яких відповідає за певні обчислення.

В результаті чисельного моделювання вдається отримувати дані кутової залежності інтенсивностей рентгенівської дифракції (у табличному вигляді) для кристалів, що містять узгоджені плоскі дефекти (двійники, дефекти пакування). Обчислення проводяться паралельними потоками для зразків із заданою мікроструктурою.

Порівняння розширень розрахункових профілів та експериментальних даних рентгеноструктурного аналізу дає можливість провести оцінку мікрокристалічної будови у досліджуваних плівкових матеріалах.

Керівники: Бурик І.П., *ст. викладач*; Іващенко М.М. *викладач*