

# РОЗРОБКА ГРАФІЧНОГО ІНТЕРФЕЙСУ ПРОГРАМИ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ СПЕКТРІВ РЕНТГЕНІВСЬКОЇ ДИФРАКЦІЇ У НАВЧАЛЬНОМУ ПРОЦЕСІ

Іващенко М.М. \*, к.ф.-м.н., викл.

Бурик І.П., к.ф.-м.н., ст. викл.

Литвиненко Д.О., студ.

Ніколаєнко А.О., студ.

*Конотопський інститут Сумського державного університету*

*\* [m\\_ivashchenko@ukr.net](mailto:m_ivashchenko@ukr.net)*

Сучасні темпи розвитку інформаційних технологій ставлять суспільство перед необхідністю регулярного підвищення рівня своїх знань та відповідної кваліфікації. Це особливо стосується фізичних та технічних спеціальностей. Тому, актуальною задачею залишається використання віртуальних лабораторних робіт у навчальному процесі.

При викладанні дисципліни «Фізика твердого тіла» виникає ряд питань щодо проведення лабораторних робіт, які стосуються аналізу спектрів рентгенівської дифракції, а саме: розрахунок сталих кристалічної ґратки, параметрів субструктури плівкових матеріалів тощо. В ідеальному випадку проведення даних лабораторних робіт мало б проводитися з використанням рентгенівського дифрактометра. Однак, зважаючи на те, що такі установки залишаються технічно складними в експлуатації та порівняно дорогими, їх використання у навчальному процесі є недоцільним. Тому, більш прийнятним варіантом є використання розроблених віртуальних лабораторних робіт з даної дисципліни. Наприклад, для розрахунку параметрів субструктури плівкових матеріалів студенти отримують уяву про фізичні процеси, які відбуваються в даних структурах, та набувають досвіду з обробки результатів.

Проаналізувавши ряд публікацій з даної проблеми, ми прийшли до висновку, що для розробки віртуальних лабораторних робіт з даної дисципліни найбільш прийнятним є програмний пакет DIFFaX [1], який дозволяє з великою точністю змоделювати спектри рентгенівської дифракції, та має відкритий

код. Однак, зважаючи на те, що даний продукт має текстовий інтерфейс, даний факт ускладнює засвоєння студентами матеріалу та роботу з ним [2]. Тому, нашою задачею була розробка графічного інтерфейсу даної програми у якості надбудови до її ядра, що в остаточному рахунку, привело би до створення ряду віртуальних лабораторних робіт з інтуїтивно зрозумілим для студентів інтерфейсом.

Одним з чинників, який ускладнював вирішення даної проблеми, було те, що даний програмний пакет був написаний на мові програмування Fortran. Зважаючи на це, нами була проведена інтерпретація програмного коду на мові програмування C#. В результаті проведених заходів був розроблений графічний інтерфейс програми DIFFaX, який дозволяє студенту безпосередньо вводити початкові дані моделювання спектру з використанням процедур, зрозумілих для нього. Далі студент отримує табличні дані обробки початкових даних, використовуючи які в подальшому буде створено дифракційний спектр та проводиться розрахунок структурних та субструктурних характеристик відповідного матеріалу.

Результатом даної роботи є робоча графічна надбудова програмного продукту, за допомогою якої є можливою подальша розробка на його базі ряду віртуальних лабораторних робіт з дисципліни «Фізика твердого тіла».

### **Література:**

1. Soleimani V., Saeedi M., A. Mokhtari. The influence of heat treatment on the crystalline size, stacking faults probability and optical band gap of nanostructured cadmium sulfide films / V. Soleimani, M. Saeedi, A. Mokhtari // Materials Science in Semiconductor Processing, - V. 30, - 2015 (in press), - P. 118-127.
2. Treacy M.M.J. Deem M.W., Newsam J.M.. DIFFaX v. 1.812. Manual / M.M.J. Treacy, M.W. Deem, J.M. Newsam – Boston: InTech, 2005 – 72 p.

Електронні засоби та дистанційні технології для навчання протягом життя: тези доповідей X Міжнародної науково-методичної конференції, м. Суми, 13–14 листопада 2014 р. – Суми : Сумський державний університет, 2014. – С. 40-41.