

## Моделирование картин дифракции на поли- и монокристаллах в спецкурсах и задачах спецпрактикума кафедры физики твердого тела физического факультета МГУ

А.Г. Хунджуа<sup>1,\*</sup>, Е.А. Бровкина<sup>1,†</sup>, М.М. Мельников<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
физический факультет, кафедра физики твердого тела  
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д.1, стр. 2

<sup>2</sup>Ректорат Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова  
(Поступила в редакцию 07.06.2024; подписана в печать 16.09.2024)

Рассматривается комплекс моделирования картин дифракции, разработанный на кафедре физики твердого тела физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова. Комплекс включает в себя несколько разделов: 1) дифракция на поликристаллах — задачи на построение и анализ дифрактограмм от поликристаллических образцов; 2) дифракция на монокристаллах — моделирование и анализ микроэлектроннограмм, лауэграмм и эпиграмм; 3) моделирование точечных картин дифракции от двухфазных кристаллических объектов, связанных ориентационным соотношением (в том числе при мартенситных превращениях). Обсуждаются различные варианты использования программ для специального физического практикума и спецкурсов кафедры.

PACS: 01.40.-d; 61.10; 02.70.-c      УДК: 004.94:539.26

Ключевые слова: рентгеноструктурный анализ, компьютерное моделирование, физический эксперимент, лабораторные работы по физике.

### ВВЕДЕНИЕ

Специальный физический практикум традиционно занимает важное место в учебном процессе на кафедре физики твердого тела. Его развитие осуществлялось на протяжении всей истории кафедры [1].

Работа по моделированию картин дифракции и их использованию в учебном процессе ведется на кафедре около 30 лет. Автоматизация рентгеновского эксперимента в области исследования мартенситных превращений [2], которая проводилась на кафедре в 1990-е годы, стала основой для распространения тех же принципов на задачи практикума. При этом изначально было принято, что это должна быть именно визуализация картин дифракции в масштабе эксперимента, а не компьютеризация расчетной части обработки экспериментальных данных.

Основу спецпрактикума кафедры составляют задачи по рентгеноструктурному анализу моно- и поликристаллов. Среди них:

- метод Дебая-Шеррера — получение и расчет рентгенограмм поликристалла;
- метод Лауэ — съемка и обработка лауэграмм и эпиграмм;
- метод вращения и колебания — съемка и анализ рентгенограмм вращения, колебания;
- метод фотографирования обратной решетки.

Перечисленные методы (с фоторегистратией) — классика рентгеноструктурного анализа, которая ныне

используется, в основном, в учебном процессе. Их реализация не очень сложна, но требует специального оборудования: источника рентгеновского излучения, рентгеновских камер, реквизита для фоторегистрации картин дифракции. Кроме того, до проведения лабораторных работ необходимо провести инструктаж и обеспечить выполнение требований техники безопасности при работе с аппаратурой высокого напряжения и ионизирующим излучением.

При выполнении лабораторных работ применение компьютерного моделирования картин дифракции рентгеновских лучей дает ряд преимуществ. Помимо ускорения процедуры получения исходных модельных рентгенограмм наиболее интересной представляется возможность непосредственного наблюдения за изменением дифракционной картины при повороте монокристалла в рентгеновской камере или варьировании другими параметрами эксперимента.

Компьютерные программы по рентгеноструктурному анализу используются в практикумах во многих ВУ-Зах, но обычно они служат для обработки экспериментальных дифрактограмм и подменяют собой расчетную часть задачи, что фактически не требует от студентов овладеть навыками самостоятельной расшифровки рентгенограмм.

В практикуме кафедры физики твердого тела студент получает от преподавателя распечатанную в масштабе реального эксперимента модельную рентгенограмму и «вручную» (без использования стандартных компьютерных программ по обработке рентгенограмм) расшифровывает ее.

Разработанный пакет программ по моделированию успешно используется также как демонстрационный материал в спецкурсах по дифракционным методам исследования структуры вещества и фазовых превращений в материаловедении.

\* khundjua@mail.ru

† el-brov@yandex.ru

## 1. ДИФРАКЦИЯ НА ПОЛИКРИСТАЛЛАХ

Основой компьютерного моделирования рентгенограмм поликристаллов (дебаеграмм) является программа расчета межплоскостных расстояний с интерактивным окном для ввода: параметров кристаллической решетки, типа решетки Браве, длины волны рентгеновского излучения (рис. 1). Положение дифракционных линий рассчитываются по стандартным формулам, а их интегральная интенсивность нормируется с учётом фактора повторяемости, структурного и углового факторов. Модельная дифрактограмма поликристалла служит исходным материалом для решения основной задачи рентгеноанализа - определения кристаллической структуры вещества. Алгоритмы работы пакета программ приведены нами в работе [3].

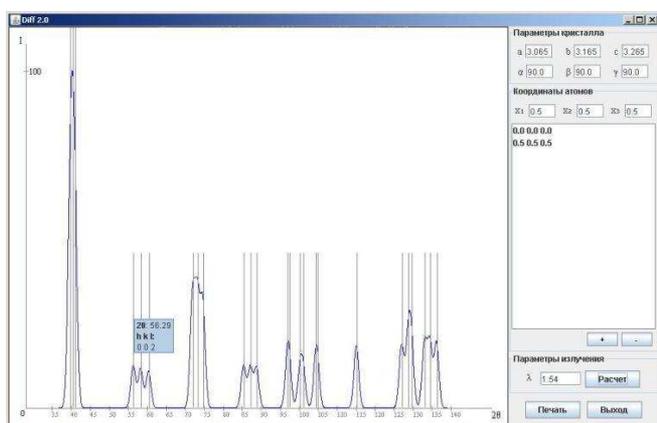


Рис. 1. Окно программы моделирования дифрактограмм поликристаллов. Демонстрация расщепления дифракционных линий при ромбическом искажении ОЦК решетки

Примером более сложной задачи может служить исследование трансформации рентгенограмм поликристаллов при фазовых превращениях дисторсионного типа. Фазовые превращения дисторсионного типа, которые имеют место в ферро- и антиферромагнетиках, сегнетоэлектриках, сплавах с эффектами памяти формы [4, 5], со структурной точки зрения сводятся к искажению исходной решетки (например, кубическая решетка испытывает тетрагональные, орторомбические, ромбоэдрические, моноклинные искажения).

Данная работа предполагает два варианта выполнения:

1. по мультиплетному расщеплению дифракционных линий определить тип дисторсии исходной решетки и рассчитать параметры решетки фазы выделения;
2. по предполагаемому искажению решетки выбрать дифракционные линии, подходящие для определения типа дисторсии решетки и проанализировать возможность разрешения отдельных линий в зависимости от ширины дифракционной линии.

*Пример задания: определение типа и параметров элементарной ячейки исходной и выделяющейся фазы при дисторсионном искажении решетки*

В качестве конкретного примера возьмем орторомбическую дисторсию (подобный вид дисторсии наблюдается, в частности, при мартенситном превращении в сплаве Mn–Ni).

Студент изначально не знает типа дисторсии. Он получает от преподавателя две распечатанные модельные дифрактограммы: одну — от исходной кубической фазы (аустенита) и вторую — от мартенсита с неизвестным ему искажением решетки.

Установив по первой рентгенограмме положение линий в значениях  $2\theta$ , необходимо, анализируя отношения квадратов синусов углов дифракции, установить тип кубической решетки Браве аустенита, индексы дифракционных максимумов и параметр элементарной ячейки.

На дифрактограмме мартенсита (рис. 1) наблюдается расщепление большинства линий исходной фазы: линия (200) ОЦК решетки расщепляется на три линии: (200), (020) и (002), что позволяет предположить орторомбическое, моноклинное или триклинное искажение. Для окончательного вывода следует рассмотреть расщепление максимума (110) или (220), который расщепляется на три линии для орторомбического, четыре — для моноклинного и шесть — для триклинного искажения.

Все вычисления при выполнении задачи проводятся без специальных программ обработки дифрактограмм, с помощью калькулятора.

## 2. МОДЕЛИРОВАНИЕ КАРТИН ДИФРАКЦИИ НА МОНОКРИСТАЛЛАХ

Моделирование дифракционных картин на монокристаллах основано на построении Эвальда и реализовано по следующей схеме [6]:

1. Нахождение координат узлов обратной решетки относительно лабораторной системы координат. Положение монокристалла задается путем указания индексов двух направлений: совпадающего с первичным лучом и вертикальным (ось рентгеновской камеры).
2. Отбор узлов обратной решетки, формирующих дифракционную картину, в соответствии с построением Эвальда.
3. Расчет координат соответствующих рефлексов на рентгенограммах.
4. Графическая визуализация в окне программы и распечатка модельной картины дифракции.

В случае сплошного спектра рентгеновского излучения (метод Лауэ) вклад в дифракционную картину вносят узлы обратной решетки, заключенные между

двумя крайними сферами радиусов  $1/\lambda_{max}$  и  $1/\lambda_{min}$ . Для таких узлов удовлетворяется интерференционное уравнение Лауэ, и их совокупность определяет число и направление дифрагированных лучей (расположение рефлексов на лауэграмме).

В методах вращения, колебания, фотографирования обратной решетки используется монохроматическое рентгеновское излучение. В формировании дифракционной картины участвуют узлы обратной решетки, пересекающие сферу Эвальда при движении кристалла. При этом алгоритм расчета отличается лишь формулами перехода от узлов обратной решетки к координатам рефлексов на дифракционных картинах.

При моделировании картин дифракции электронов в просвечивающем электронном микроскопе следует помнить, что ввиду большого радиуса сферы Эвальда (малости длины волны электронов) микроэлектроннограмма представляет собой практически плоское сечение обратной решетки (масштаб определяется постоянной микроскопа) [7].

При написании программ следует использовать общие формулы, опирающиеся на фундаментальный метрический тензор:

$\hat{g} = |\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|$ , где  $\mathbf{a}$  — вектор-строка  $(a_1, a_2, a_3)$ ,  $|\mathbf{a}\rangle$  — вектор-столбец [8].

Тогда

$$g_{ik} = g_{ki} = \mathbf{a}_i \mathbf{a}_k, |\mathbf{a}_i| = \sqrt{g_{ii}}, \cos \alpha_i = \frac{g_{ijk}}{\sqrt{g_{jj}} \cdot \sqrt{g_{kk}}}$$

Объем элементарных ячеек прямого и обратного базиса:  $V_a = (\det \hat{g})^{1/2}$ ;  $V_{a^*} = (\det \hat{g}^{-1})^{1/2}$ .

Межплоскостное расстояние:  $d_{hkl}^{-2} = \langle hkl | \hat{g}^{-1} | hkl \rangle$ .

Индексы нормали к плоскости:

$$[H_n K_n L_n] = (H K L) \hat{g}^{-1}$$

Угол между прямыми:  $\cos \phi = \frac{\langle \sigma | \hat{g} | \eta \rangle}{\sqrt{\langle \sigma | \hat{g} | \sigma \rangle} \cdot \sqrt{\langle \eta | \hat{g} | \eta \rangle}}$ .

Угол между плоскостями:

$$\cos \phi = \frac{\langle F | \hat{g}^{-1} | G \rangle}{\sqrt{\langle F | \hat{g}^{-1} | F \rangle} \cdot \sqrt{\langle G | \hat{g}^{-1} | G \rangle}}$$

Угол между прямой и плоскостью:  $\cos \phi = \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{C}^n}{|\vec{\sigma}| \cdot |\vec{C}^n|}$ .

На рис. 2 приведено интерактивное окно программы по визуализации лауэграмм и эпиграмм монокристалла любой сингонии. В окне расположены блоки ввода условий съемки: параметры элементарной ячейки кристалла, тип решетки Бравэ, диапазон длин волн используемого рентгеновского излучения, ориентировка кристалла относительно первичного пучка и вертикали, углы поворота в рентгеновской камере или угол поворота вокруг выбранного кристаллографического направления в кристалле и индексы этого направления. При наведении курсора на конкретный дифракционный максимум на экране появляются индексы рефлекса и длина волны, на которой он сформирован.

*Пример задания: определение ориентировки кристалла произвольной сингонии.*

Студент получает от преподавателя распечатанную в масштабе эксперимента лауэграмму (эпиграмму), выбирает на ней несколько зональных линий и с помощью гномостереографической линейки осуществля-

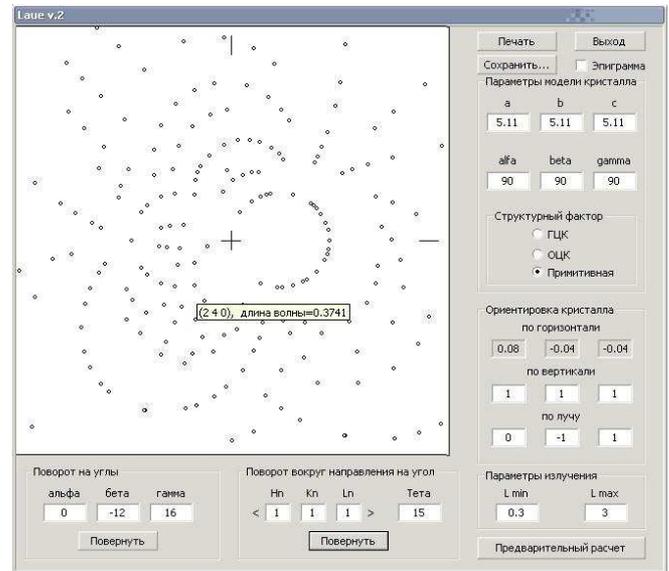


Рис. 2. Интерактивное окно программы моделирования лауэграмм и эпиграмм

ет построение стереографической проекции нормалей к плоскостям, отвечающих за образование выбранных рефлексов.

Затем с помощью сетки Вульфа проводится анализ угловых расстояний между точками проекции и делается предположение о сингонии кристалла. В случае кубической сингонии можно воспользоваться сведением проекции к стандартной и ее сравнением с сетками Закса для различных ориентаций кубического кристалла. Делается заключение о расположении выходов кристаллографических осей кристалла на проекции, после чего с помощью сетки Вульфа для лауэграммы или сетки Гренингера для эпиграммы определяются углы поворота кристалла, необходимые для реализации требуемой ориентации образца.

Далее значения углов вводятся в блок «Поворот на углы» в нижней левой части окна программы (см. рис. 2), где  $\alpha$  — угол поворота по малой дуге гониометрической головки камеры,  $\beta$  — по большой дуге,  $\gamma$  — вокруг вертикальной оси камеры. После нажатия кнопки «Повернуть» в окне программы практически мгновенно появляется соответствующая повороту дифракционная картина. По симметрии картины можно оценить правильность построения и анализа проекции, а также определения значений углов поворота. Например, картина с симметрией 4-го порядка означает, что выбранное направление  $\langle 100 \rangle$  кубического кристалла после осуществленных поворотов действительно совпадает с нормалью к плоскости рентгенограммы.

### 3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ТОЧЕЧНЫХ КАРТИН ДИФРАКЦИИ НА ДВУХФАЗНЫХ ОБЪЕКТАХ

Описанные выше программы моделирования картин дифракции на моно- и поликристаллах можно использовать и в качестве иллюстративного материала к спецкурсам, затрагивающим дифракционные методы в физическом материаловедении. Кроме того, в спецкурсах «Фазовые превращения в металлических сплавах» и «Структурная физика сплавов с эффектами памяти формы» также задействованы разработанные на кафедре программы по моделированию точечных картин дифракции от двухфазных объектов «исходная фаза + продукт фазового превращения», например, от зерна аустенита, претерпевшего мартенситное превращение. Моделирование картин дифракции на зерне основной фазы (аустенита) с выделениями второй фазы и сравнение их с экспериментальными представляется методически наиболее верным. Программы позволяют моделировать рентгенограммы и микроэлектроннограммы для заданных ориентационных соотношений между кристаллическими решетками двух фаз, что необходимо для расчетов характеристик мартенситных превращений.

При использовании рентгеновского излучения построение Эвальда для подобного рода объектов должно учитывать то, что рефлексы от основной фазы формируются на «белом» излучении, а рефлексы фазы выделения (на ранних стадиях формирования) — только на характеристическом.

Существует ряд особенностей фазовых превращений, которые также необходимо учитывать при моделировании:

1. наличие кристаллографически эквивалентных вариантов ориентационного соотношения;
2. возможное двойникование кристаллов фазы выделения (характерно для мартенситных превращений);
3. возможность поворота кристалла мартенсита как целого на некоторый угол относительно исходного ориентационного соотношения (связано с релаксацией упругой энергии).

В качестве исходных данных вводятся:

1. параметры решеток исходной фазы и фазы выделения;
2. тип центрировки элементарной ячейки исходной фазы;
3. ориентационное соотношение;
4. ориентировка кристалла аустенита относительно первичного луча;
5. интервал длин волн излучения, формирующего рефлексы;

6. плоскость двойникования кристаллов мартенсита.

Вкратце остановимся на процедуре моделирования [9, 10].

*Ориентационное соотношение (ОС).*

Кристаллические решетки исходной  $\beta$ -фазы и выделяющейся  $\alpha$ -фазы связаны строгим ОС, которое принято записывать путём указания параллельных плоскостей и направлений, лежащих в этих плоскостях:  $(HKL)[h; k; l]_{\beta} \parallel (H'K'L')[h'k'l']_{\alpha}$ . Далее рассчитывается матрица ОС  $\hat{A}(\beta \Leftrightarrow \alpha)$ , преобразующая индексы узлов, направлений и плоскостей при переходе от базиса решетки фазы выделения  $|\sigma'\rangle$  к базису исходной фазы  $|\sigma\rangle$ . Столбцы этой матрицы представляют собой проекции трех векторов базиса решетки фазы выделения на базисные векторы решетки исходной фазы. Тогда формулы преобразования индексов имеют вид:

Для направлений:  $|\sigma\rangle = \hat{A}|\sigma'\rangle$ ,  $|\sigma'\rangle = \hat{A}^{-1}|\sigma\rangle$ .

Для индексов Миллера:  $\langle\sigma'_{\text{пл}}| = \langle\sigma_{\text{пл}}|\hat{A}$ ,  $\langle\sigma_{\text{пл}}| = \langle\sigma'_{\text{пл}}|\hat{A}^{-1}$ .

В обратной решетке:  $\langle\mu'| = \langle\mu|\hat{A}$ ,  $\langle\mu| = \langle\mu'|\hat{A}^{-1}$ ,  $|\mu'_{\text{пл}}\rangle = \hat{A}^{-1}|\mu_{\text{пл}}\rangle$ ,  $|\mu_{\text{пл}}\rangle = \hat{A}|\mu'_{\text{пл}}\rangle$ .

Для построения матрицы  $\hat{A}$  следует, исходя из ОС, указать три пары параллельных векторов в решетках исходной и выделяющейся фаз, получить три матричных уравнения и, решая систему уравнений, найти все элементы матрицы  $\hat{A}$ .

*Эквивалентные варианты ОС*

Обычно ОС предполагает несколько кристаллографически эквивалентных вариантов, число которых определяется числом эквивалентных плоскостей типа  $\{HKL\}$  и эквивалентных направлений типа  $\langle hkl \rangle$ , фигурирующих в ОС. При кубической структуре исходной фазы может быть не более 24-х эквивалентных вариантов ОС (если ориентироваться только на форму элементарной ячейки фазы выделения). Каждому варианту соответствует своя матрица ОС  $\hat{A}_i$ . Используя операторы симметрии  $\hat{S}_i$  решетки аустенита, можно получить все 24 матрицы, исходя из одной матрицы  $\hat{A}$ :  $\hat{A}_i = \hat{S}_i \cdot \hat{A}$ ,  $i = 1, 2, 3, \dots, 24$ .

24 оператора симметрии  $\hat{S}_i$  осуществляют поворот решетки аустенита вокруг осей симметрии 2-го, 3-го и 4-го порядка на углы, кратные  $2\pi/2$ ,  $2\pi/3$  и  $2\pi/4$ . Их можно выразить через 3 оператора поворота во-

круг осей  $X, Y, Z$  на угол  $\pi/2$ :  $\hat{X} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}$ ,

$\hat{Y} = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{vmatrix}$ ,  $\hat{Z} = \begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$ ;

$\hat{S}_1 = \hat{E}$ ,  $\hat{S}_2 = \hat{X}^2$ ,  $\hat{S}_3 = \hat{Y}^2$ ,  $\hat{S}_4 = \hat{Z}^2$ ,  
 $\hat{S}_5 = \hat{Z}\hat{X}^2$ ,  $\hat{S}_6 = \hat{Z}\hat{Y}^2$ ,  $\hat{S}_7 = \hat{Y}\hat{Z}^2$ ,  $\hat{S}_8 = \hat{Y}\hat{X}^2$ ,  
 $\hat{S}_9 = \hat{X}\hat{Y}^2$ ,  $\hat{S}_{10} = \hat{X}\hat{Z}^2$ ,  $\hat{S}_{11} = \hat{Z}\hat{X}$ ,  $\hat{S}_{12} = \hat{S}_{11}^2$ ,  
 $\hat{S}_{13} = \hat{Z}\hat{Y}$ ,  $\hat{S}_{14} = \hat{S}_{13}^2$ ,  $\hat{S}_{15} = \hat{X}\hat{Z}$ ,  $\hat{S}_{16} = \hat{S}_{15}^2$ ,  
 $\hat{S}_{17} = \hat{Y}\hat{X}$ ,  $\hat{S}_{18} = \hat{S}_{17}^2$ ,  $\hat{S}_{19} = \hat{X}$ ,  $\hat{S}_{20} = \hat{Y}$ ,

$$\hat{S}_{21} = \hat{Z}, \hat{S}_{22} = \hat{X}^3, \hat{S}_{23} = \hat{Y}^3, \hat{S}_{24} = \hat{Z}^3.$$

*Оператор двойникования*

Фазовые превращения в сплавах могут сопровождаться двойникованием кристаллов фазы выделения. Двойникование не меняет межплоскостные расстояния, и обнаружить его можно только по картинам дифракции на монокристаллах или методами электронной микроскопии. В общем случае двойникование должно приводить к появлению на дифракционных картинах дополнительной системы рефлексов. При моделировании дифракционных картин двойникование мартенситных кристаллов можно учесть, заменяя матрицу  $\hat{A}$  на  $\hat{A}\hat{D}$ , где  $\hat{D}$  — оператор двойникования.

Оператор двойникования определяется плоскостью двойникования и может быть найден по аналогии с матрицей ОС — путем решения системы уравнений, связывающих индексы трех некопланарных векторов, принадлежащих исходной и двойниковой обла-

стям решетки фазы. Поскольку нас интересует только взаимная ориентация базисных векторов, операцию двойникования формально можно описать как поворот на  $180^\circ$  вокруг нормали к плоскости двойникования. При этом вектор нормали к плоскости двойникования остается неизменным, а все векторы, лежащие в плоскости двойникования, меняют своё направление на  $180^\circ$ . Индексы нормали к плоскости двойникования  $[H_n K_n L_n]$ , выраженные в виде вектора-столбца  $|\sigma_n\rangle$ , связаны с индексами плоскости двойникования  $|\sigma\rangle = |HKL\rangle$  соотношением  $|\sigma_n\rangle = \hat{g}^{-1}|HKL\rangle$ , где  $\hat{g}^{-1}$  — метрический тензор обратной решетки фазы выделения.

В качестве векторов, лежащих в плоскости двойникования, можно взять любые векторы, координаты  $(x, y, z)$  которых удовлетворяют уравнению  $Hx + Ky + Lz = 0$ , например,  $|\sigma_1\rangle = |-KH\ 0\rangle$  и  $|\sigma_2\rangle = |0\ L\ -K\rangle$ .

Решая систему уравнений, находим оператор двойникования по плоскости  $(HKL)$ :

$$\hat{D}_{HKL} = \frac{1}{N} \begin{vmatrix} HH_n - KK_n - LL_n & 2H_nK & 2H_nL \\ 2HK_n & KK_n - HH_n - LL_n & 2K_nL \\ 2HL_n & 2KL_n & LL_n - HH_n - KK_n \end{vmatrix},$$

$$N = HH_n + KK_n + LL_n.$$

Отметим, что  $\det \hat{D} = 1$  и  $\hat{D}^2 = E$ .

Итак, замена матрицы  $\hat{A}$  на матрицу  $\hat{A}\hat{D}$  позволяет распространить методику моделирования на случай двойникования. Сравнение модельных и экспериментальных картин дифракции позволяет судить о наличии двойников и при необходимости определять плоскости двойникования.

Далее алгоритм аналогичен программам, описанным ранее, и включает в себя определение узлов обратных решеток двух фаз, вносящих вклад в дифракционную картину, и построение дифракционной картины в окне программы (рис. 3).

Необходимо отметить, что этот алгоритм может быть применен к любой системе, состоящей из двух монокристаллов с заданной ориентацией друг относительно друга. При этом возможно варьировать различные параметры, например, размер узла обратной решетки для каждой фазы отдельно.

Наблюдение за трансформацией рентгенограммы при различных ориентациях фаз, изменении их кристаллографических характеристик и условий съемки оказывается весьма полезным для студентов и дает наглядное представление о возможностях рентгеноструктурного анализа в исследовании кристаллических объектов.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Визуализация картин дифракции и расчеты кристаллографических характеристик помогают студентам в ознакомлении с методами рентгеноструктурного ана-

лиза при выполнении задач спецпрактикума, а также в усвоении довольно сложного учебного материала в рамках многих разделов курсов: «Введение в физику конденсированного состояния вещества», «Физическая химия», «Структурная физика сплавов с эффектами памяти формы» и других, посвященных структурным аспектам фазовых превращений в твердом состоянии.

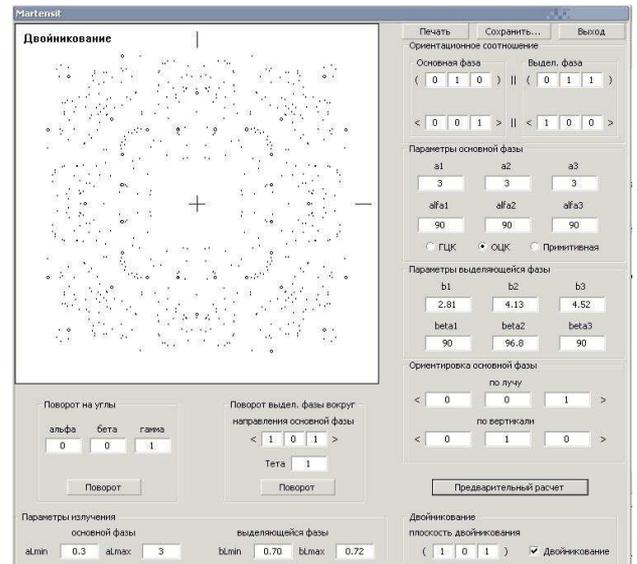


Рис. 3. Окно программы моделирования картин дифракции на зерне аустенита, претерпевшего мартенситное превращение

- [1] *Илюшин А.С., Орешко А.П.* Кафедра физики твердого тела Московского университета в зеркале столетия. М.: Белый ветер, 2018.
- [2] *Илюшин А.С., Сорокин А.В., Хунджуа А.Г., Пестов И.В.* // Вестн. Моск. Ун-та, с. 3. физ. астроном. 1990. Т.31. № 2. С. 98
- [3] *Хунджуа А.Г., Бровкина Е.А., Мельников М.М.* // Физическое образование в вузах. 2012. Т.18, №4. С.133
- [4] *Otsuka K., Wayman C.M.* Shape Memory Materials. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1998.
- [5] *Лободюк В.А., Эстрин Э.И.* Мартенситные превращения. М., 2009.
- [6] *Хунджуа А.Г., Бровкина Е.А., Мельников М.М.* // Физическое образование в вузах. 2008. Т.14. №3. С.133.
- [7] *Хириш П., Хови А., Николсон Р., Пэшли Д., Уэлан М.* Электронная микроскопия тонких кристаллов. М.: Мир, 1968.
- [8] *Васильев Д.М.* Физическая кристаллография. М: Металлургия, 1981.
- [9] *Хунджуа А.Г., Бровкина Е.А., Мельников М.М.* // Вестн. Моск. Ун-та, с. 3. физ. астроном. 2012. № 5. С. 35.
- [10] *Хунджуа А.Г., Володин Б.А., Бровкина Е.А., Мельников М.М.* // Ученые записки физического факультета Московского Университета. 2017. № 4. С. 1741003-1

## Simulation of diffraction patterns on poly- and single crystals in the special courses and cours of laboratory work and of the Department of Solid State Physics, Faculty of Physics, Moscow State University

A.G. Khundjua<sup>1,a</sup>, E.A. Brovkina<sup>1,b</sup>, M.M. Melnikov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Department of Solid State Physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University  
Moscow 119991, Russia*

<sup>2</sup>*Rectorate of Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia  
E-mail: <sup>a</sup>khundjua@mail.ru, <sup>b</sup>el-brov@yandex.ru*

The complex of modeling diffraction patterns developed at the Department of Solid State Physics of the Faculty of Physics of Lomonosov Moscow State University is considered. The complex includes several sections: 1) diffraction on polycrystals — tasks for the construction and analysis of diffraction pattern on polycrystalline samples; 2) diffraction on single crystals — modeling and analysis of electron diffraction and Laue patterns; 3) modeling of point patterns of diffraction on two-phase crystalline objects related by orientation ratio (including martensitic transformations). Various options for using computer programs for a course of laboratory work and special courses of the department are discussed.

PACS: 01.40.-d; 61.10; 02.70.-c

*Keywords:* computer simulation; physical experiment; laboratory works on physics; condensed matter physics; X-ray structural analysis.

*Received 07 June 2024.*

### Сведения об авторах

- Хунджуа Андрей Георгиевич — доктор физ.-мат наук, профессор; тел.: (495) 939-30-26, e-mail: khundjua@mail.ru.
- Бровкина Елена Анатольевна — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (495) 939-10-73, e-mail: el-brov@yandex.ru.
- Мельников Максим Михайлович — зам. начальника Управления делами и делопроизводства Рectorата МГУ; e-mail: хепоморpha@list.ru.