

**КОМПОЗИЦИОННЫЙ АНАЛИЗ СОСТАВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ
МЕТОДОМ РЕЗЕРФОРДОВСКОГО ОБРАТНОГО РАССЕЯНИЯ:**

ПРОГРАММНЫЕ КОМПЛЕКСЫ

Солодкий Д.М., Ташлыкова-Бушкевич И.И.

DOI: 10.12737/15424

Аннотация. Рассматриваются программные средства для проведения композиционного анализа твердых тел по данным резерфордовского обратного рассеяния. В данной работе выполнено изучение существующего ПО для обработки данных резерфордовского обратного рассеяния, проанализированы достоинства и недостатки. Показана перспективность модернизации программных комплексов, сформулированы рекомендации по созданию конкурентоспособного инструмента для исследования состава и структуры любых твердых тел методом POP.

Ключевые слова: резерфордовское обратное рассеяние, научное программное обеспечение, Origin, PlotMath, RUMP, Simnra.

Стремительное развитие информационных технологий не затрагивает специализированные научные приложения. С момента презентации компанией Apple смартфона iPhone в 2007 году вычислительные мощности потребительской электроники многократно выросли. Многие научно-исследовательские задачи уже успешно выполняются на портативных персональных устройствах. Широкое проникновение Интернета и использование «облачных» технологий позволяет быстро объединять устройства в вычислительные кластеры и делиться результатами в режиме реального времени. Некоторые социальные, медицинские и инженерные исследования проводятся напрямую с использованием смартфонов и планшетов. Однако имеются сферы, в которых специфическое программное обеспечение еще не подверглось прогрессу. В настоящей работе вкратце рассматриваются существующие на рынке научного программного обеспечения комплексы для обработки данных ионной спектроскопии.

Одним из способов изучения элементарного состава вещества является метод резерфордовского обратного рассеяния (POP). Он заключается в

исследовании энергии заряженных частиц после взаимодействия с атомами изучаемого вещества. В основе метода лежит закон сохранения энергии и кулоновского взаимодействия заряженных частиц: при облучении образца ионами с заранее известными характеристиками и последующей регистрации энергии рассеянных частиц получается характеристический график (спектр) рассеяния (рисунок 1, а). Эксперимент выполняется достаточно быстро и не приводит к изменению структура и состава исследуемого вещества [1].

Современные приборы для проведения экспериментов ROP позволяют получить спектр рассеяния в виде набора значений количества зарегистрированных ионов для каждого дискретного значения энергии рассеянных частиц. Исследуя спектр ROP, получают композиционную характеристику образца: элементарный состав, концентрацию и глубину залегания конкретных элементов (рисунок 1, б).

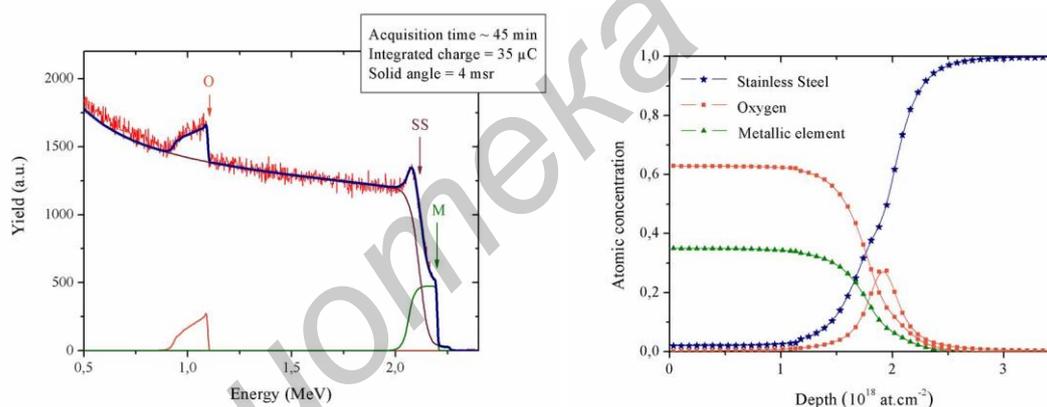


Рисунок 1 – (а) Спектр ROP для оксидированного образца стали.
(б) Результирующие профили распределения элементов по глубине образца [2].

Обработка спектра заключается в подборе таких значений характеристик исследуемого образца, при которых теоретические данные будут совпадать с экспериментально полученным спектром в пределах некоторой погрешности. Расчет типовой задачи по залеганию элемента-примеси в бинарном сплаве по графику ROP в ручном режиме занимает около часа при использовании известных алгоритмов.

Анализ массивов дискретных данных в целом и спектра рассеяния в частности возможен с применением программного комплекса *Origin*, разработанного OriginLab Corporation. Для композиционного анализа используются базовые возможности: построение нескольких графиков по данным, запись координат точек в виде переменных и выполнение метапрограмм для получения результатов вычислений. Лицензия составляет \$1299 для исследовательских центров, \$550 для частного использования и \$100 для студентов. Поддерживаемая платформа: Microsoft Windows.

Кроме программных комплексов общего назначения имеются пакеты, рассчитанные исключительно для обработки спектров рассеяния. Один из них – *Simnra*, созданный Matej Mayer. Лицензия на индивидуальное использование составляет \$250, операционная система – Windows.

Другой пакет – *RUMP* (разработанный Mike Thompson, в настоящее время собственность Корнельского Университета) широко применяется в области физики конденсированного состояния. Требуется значительных затрат времени на настройку и предварительный расчет параметров исследуемого образца. В отличие от рассмотренных ранее программ, моделирование теоретического спектра выполняется до тех пор, пока графики теоретического и реального распределений не совпадут. Поддерживаемые системы и цена лицензий: Windows (\$275), Linux (\$350).

Проведенный анализ демонстрирует нехватку современного и кросс-платформенного программного обеспечения для выполнения научных и исследовательских работ. В первую очередь следует отметить ограниченность программных комплексов только системами семейства Windows, составляющей 84% рынка операционных систем настольных компьютеров. Мобильные устройства и серверные ОС (в случае веб-версий) не поддерживаются ни одним из комплексов. Все приложения не позволяют одновременно работать нескольким исследователям; пользовательский интерфейс исключительно на английском языке; ценовая политика не способствует популяризации ПО среди индивидуальных исследователей.

Поэтому авторами данной работы в настоящее время разрабатывается современный программный комплекс, доступный по подписке в сети Интернет и на мобильных устройствах. Уже создано программное обеспечение *PlotMath* для анализа экспериментальных данных РОР, предоставляющее одновременную работу с несколькими графиками, включая автоматическую обработку экспериментальных значений с помощью пользовательских сценариев на языке С# [3]. Распространяется бесплатно (open source), совместимо с ОС Windows. В перспективе комплекс будет решать задачи по композиционному анализу любых твердых тел на основе данных, полученных ионной спектроскопией. Целевая аудитория состоит из научных сотрудников и инженеров, исследующих структуру и свойства материалов с использованием РОР.

Список литературы

1. Alford, T. L. Fundamentals of Nanoscale Film Analysis / T. L. Alford, L.C. Feldman, J. W. Mayer. – Springer: NY, 2007. – 349 p.
2. Colaux, J. L. SIMTarget / J. L. Colaux. – web resource: <http://goo.gl/ZTh3gy>.
3. Яковенко, Ю.С. Исследование смачиваемости алюминия и его сплавов, получаемых методом высокоскоростной кристаллизации / Ю.С. Яковенко, Д.М. Солодкий // Физика конденсированного состояния: сб. науч. статей. Гродно: ГрГУ им Я.Купалы, 2012. с. 325-327.

Солодкий Дмитрий Михайлович, магистрант Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники, г. Минск, Беларусь

Научный руководитель - Ташлыкова-Бушкевич Ия Игоревна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники, г. Минск, Беларусь