

doi: <https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.01.047>

УДК: 519.642:539.261

**Н.М. Роженко, О.М. Григорьев, В.В. Картузов**

Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, Київ  
E-mail: rzh.natali@gmail.com

## **Метод аналізу форми дифракційних ліній, що не потребує переходу до простору об'єкта**

*Представлено членом-кореспондентом НАН України О.М. Григорьевим*

*Представлено узагальнення методів моментів та Холла–Вільямсона, що не потребує апріорних припущень щодо закону розподілу мікрODEФОРМАЦІЙ та враховує характер функції розсіювання через наявність областей когерентного розсіювання. Розроблений підхід базується на формі відновленого із застосуванням методу регуляризації Тихонова повного фізичного профілю і дозволяє визначати функцію щільності розподілу мікрODEФОРМАЦІЙ.*

**Ключові слова:** *фізичний профіль, дефектний стан, розподіл мікрODEФОРМАЦІЙ.*

Основна практична задача фізики твердого тіла — створення новітніх матеріалів із спеціальними, наперед заданими експлуатаційними характеристиками, які значною мірою визначаються характером та розподілом дефектів у реальних кристалах. Надзвичайно важливими є експериментальні дослідження дефектного стану матеріалів кристалічної структури прямими неруйнівними методами, провідна роль серед яких належить методу рентгеноструктурного аналізу. Незважаючи на тривалу історію досліджень, розвиток методики аналізу дефектного стану кристалічних матеріалів методом рентгенографії залишається однією з найбільш актуальних серед задач, що виникають у різних областях фізики твердого тіла.

**Стан проблеми.** Наразі методи й підходи рентгенографічного аналізу дефектного стану кристалічного матеріалу базуються на моделі, згідно з якою сумісний вплив різних факторів, що зумовлюють уширення рентгенівських ліній, виражаються згорткою функцій розсіювання, зумовлених кожним із факторів [1–4]. Традиційні методи, які визначають параметри субструктури матеріалу безпосередньо за його дифракційними лініями, тобто без переходу до простору об'єкта, розраховують лише певні числові характеристики максимумів, такі як інтегральна ширина (група методів аналізу [5, 6]), центральний момент другого порядку (метод моментів [7] тощо), але не досліджують їх форму. Лише складніший у застосуванні класичний метод гармонічного аналізу форми рентгенівських ліній (ГАФРЛ) [3] передбачає дослідження форми профілю, уширення якого зумовлене виключно дефектами

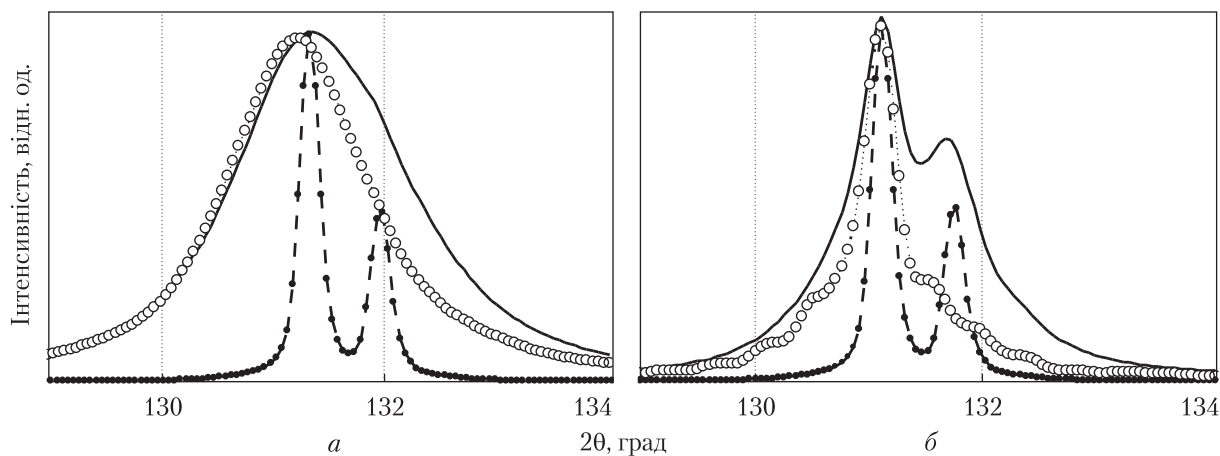
кристалічної ґратки (фізичного профілю), після переходу до простору об'єкта, тобто за його Фур'є-трансформантами.

Практична реалізація загальнозживаних методів субструктурного аналізу потребує ап'іорних припущень про тип функцій, які характеризують розмиття рефлексу через найчастіше розглядувані фактори наявності областей когерентного розсіювання (ОКР) та мікродеформацій кристалічної ґратки. Розрахунок субструктурних характеристик методами моментів [7] та ГАФРЛ [3], враховуючи відомий явний вигляд функції розсіювання на ОКР [3, 8] здійснюється у ап'іорному припущенні, що закон розподілу мікродеформацій є нормальним. Для застосування методу Шонінга [6] обидві ці функції апроксимуються функціями Фойгта, а для графічного методу Холла–Вільямсона [5] та його модифікацій – розподілами Коші та/або Гаусса. Однак жорсткість ап'іорних припущень призводить, зокрема, до неможливості встановлення істинного закону розподілу мікродеформацій (мікронапружень) у загальному випадку [8], а також до зниження точності одержаних числових оцінок.

**Постановка задачі.** У даній роботі ставиться задача розробки й застосування методики розділення ефектів дифракції рентгенівських променів на кристалічній ґратці з мікродеформаціями та ОКР, яка не потребує ап'іорних припущень щодо закону розподілу мікродеформацій, враховує характер функції розсіювання через дисперсність і забезпечує можливість встановлення закону розподілу мікродеформацій. Представлена методика базується на цифровій обробці даних рентгенодифракційного експерименту із застосуванням стійкого математичного методу регуляризації Тихонова [4] і застосовна також у випадках незначного перевищення інтегральної ширини рефлексу дифрактограми зразка над еталонною шириною, коли застосування традиційних методів неефективне. Необхідність у дослідженні саме таких випадків виникає у ряді практично значимих задач, наприклад, при

**Таблиця 1. Порівняння основних етапів обробки дифрактограм за традиційною та розробленою методиками**

Етап	Традиційні підходи	Запропонована методика
1. Підготовка даних	Стандартна попередня обробка рентгенограм зразка й еталону	
2. Фізична інтерпретація	Розділення ефектів дифракції на ОКР та мікродеформаціях	
2.1. Відновлення фізичного профілю	Тільки ГАФРЛ у просторі об'єкта (Фур'є-трансформанти профілю)	За рефlekсами зразка й еталона методом регуляризації Тихонова (рисунок)
2.2. Розрахунок числових характеристик фізичного профілю	За рефlekсами зразка й еталона	За явним виглядом відновленого на етапі 2.1 фізичного профілю
2.3. Розрахунок параметрів субструктури	Додаткова інформація	
	Ап'іорні припущення про тип функцій розмиття на ОКР та мікродеформаціях	Форма відновленого на етапі 2.1 фізичного профілю, система (2)
2.4. Визначення профілів розсіювання, зумовлених різними факторами	В окремих (граничних) випадках	За результатами етапів 2.1 і 2.3



Етап 2.1. Розв'язки  $f(x)$  ( $\circ$ ) рівняння згортки (1), одержані методом регуляризації за обробленими дифракційними лініями еталону  $g(x)$  (штрихові криві) та зразків  $h(x)$  (суцільні криві) порошку  $W$  [11] після розмелу тривалістю 48 (а) та 4 год (б). Відносна нев'язка розв'язку рівняння згортки не перевищує 1 %

аналізі крихких високомодульних матеріалів (конструкційної кераміки) [9], якщо основною причиною уширення є поле неоднорідних пружних деформацій, в тому числі внаслідок зернограничної взаємодії.

**Розроблена методика.** У табл.1 представлено схему застосування розробленої методики аналізу дефектного стану матеріалів за їхніми XRD-дифрактограмами як послідовність етапів цифрової обробки у порівнянні із традиційним підходом.

Етап підготовки експериментальних даних стандартний і може бути проведений за допомогою одного із загальнозживаних спеціальних програмних продуктів, наприклад, пакета *New\_profile* [10], який доступний за посиланням <http://www.remaxsoft.ru>. Специфіка етапу 2.1 запропонованої методики дозволяє при попередній обробці не виділяти  $K\alpha$ -дублет у разі його наявності.

Наступним кроком методики є етап 2.1 – відновлення з XRD-дифрактограми зразка ліній, уширення яких зумовлене виключно дефектами кристалічної структури матеріалу (фізичного профілю  $f$ ).

Розв'язок задачі відновлення фізичного профілю задається моделлю, що базується на рівнянні згортки [1–4, 8]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\tau)g(x-\tau)d\tau = f(x) \oplus g(x) = h(x), \quad (1)$$

де  $f$  (шукана функція) – результат розсіювання рентгенівського випромінювання дефектами кристалічної структури матеріалу;  $h$  (права частина рівняння) – результат зйомки дифрактограми зразка після попередньої обробки;  $g$  (ядро рівняння) – функція інструментального розсіювання, яку одержують при аналізі ліній еталонного бездефектного зразка.

Відновлення явного вигляду фізичного профілю як розрахунок деконволюції рівняння (1) здійснюється із застосуванням методу регуляризації Тихонова [4]. Стандартну програмну реалізацію методу (програму *PTIKR* [4]) було адаптовано для її застосування до задачі обробки рентгенограм [11], [12]. Приклади розв'язання рівняння згортки (1) методом ре-

гуляризації у випадку значного (а) й незначного (б) перевищення інтегральної ширини дифракційної лінії зразка  $\beta_h$  над еталонною  $\beta_g$  ілюструють графіки (див. рисунок). Пік профілю  $f$  відповідає положенню складової  $K_{\alpha 1}$  використовуваного випромінювання, на відміну від  $h$  та  $g$ , які містять обидві складові,  $K_{\alpha 1}$  та  $K_{\alpha 2}$ , чим пояснюється помітний на рисунку, а зсув максимуму профілю  $f$  відносно правої частини  $h$ . На рисунку б помітні бічні осциляції, характерні для відновлення вузьких ліній методом регуляризації як наслідок компромісу між точністю та стійкістю розв'язку. Нефізичні осциляції мають бути згладжені апроксимацією профілю шаблонними кривими, наприклад, за допомогою програмного пакету New\_profile.

Щоб позбавитися від жорстких апріорних припущень про тип розподілу мікрореформацій, притаманний традиційним підходам, для розділення ефектів дифракції (етап 2.3) запропоновано систему співвідношень:

$$\left\{ \frac{\tau}{2\langle *n \rangle} + \pi^2 h_0 \tilde{\epsilon}_{II}^2 = \frac{\pi^2}{h_0} M_{h_0 \tau}^2(f); h_0 \right\}, \quad (2)$$

де  $\langle *n \rangle = 1/\langle n^{-1} \rangle$  – середня кількість площин, що містяться в ОКР;  $h_0$  – порядок від-

биття;  $\tilde{\epsilon}_{II} = \tilde{\epsilon}_{II}(\tau) = \sqrt{\int_{-1/2\tau}^{1/2\tau} (\Delta h)^2 \varphi(\Delta h) d\Delta h}$  – середнє розподілу мікрореформацій на від-

різку  $[-1/2\tau; 1/2\tau]$ ; профіль  $f$  є функцією від дифракційної координати  $\Delta h$  і нормований

до щільності розподілу;  $M_{h_0 \tau}^2(f) = \int_{-1/2h_0\tau}^{1/2h_0\tau} (\Delta h)^2 f(\Delta h) d\Delta h$  – другий центральний момент

профілю  $f$ , усіченого на скінченному інтервалі  $[-1/2h_0\tau; 1/2h_0\tau]$ ,  $\tau = \min(2\pi M_{h_0}(f)/h_0)$ .

Співвідношення (2) узагальнюють методи моментів [7] та Холла–Вільямсона [5] на довільний закон розподілу мікрореформацій  $\varphi(\epsilon)$  й ураховують тип профілю  $N(\Delta h)$ , зумовленого розмиттям через дисперсність [3, 8].

Значення  $M_{\tau h_0}^2(f) = \int_{-1/2h_0\tau}^{1/2h_0\tau} (\Delta h)^2 f(\Delta h) d\Delta h$  визначають за апроксимацією відновлено-

го профілю  $f$  розподілом Стюдента [13] із оптимальним значенням ступеню свободи  $n = n(f) \geq 1$ , не обмежуючись граничними випадками  $n(f) = 1$  (розподіл Коші) або  $n(f) = \infty$  (розподіл Гаусса). Вибір значення  $\tau$  у формулі (2) мінімізує чутливість до похибок зрізання фону порядку  $\leq 10\%$ . Малість інтегральної ширини профілю  $f$  дозволяє скористатися

апроксимацією  $M_{\tau h_0}^2(f) \approx \frac{\tau h_0 \beta_f}{\pi^2}$  при  $1 \leq n(f) \leq 2$  і  $M_{\tau h_0}^2(f) \approx M_{\infty}^2(f) = \frac{(\beta_{1/2, f})^2}{(2^{1/\chi} - 1)(2\chi(f) - 3)} < \infty$

при  $n(f) \geq 3$  [13];  $2\beta_{1/2, f}$  – ширина на половині висоти;  $\beta_f$  – інтегральна ширина та  $(f) = (n+1)/2$  – оптимальний цілий чи напівцілий ступінь Пірсона VII типу розраховуються програмним пакетом New\_profile [10].

Значення  $\tilde{\epsilon}_{II} = \tilde{\epsilon}_{II}(\tau)$  і  $\langle *n \rangle$  визначаються із системи рівнянь (2). Для її розв'язання зручно застосувати графічний метод, аналогічний лінеаризації Холла–Вільямсона [5], при

цьому значення показника ступеню свободи  $n = n(f) \geq 1$  розподілу Стюдента можуть бути різними для фізичних уширень різних порядків відбиття  $h_0$ , що нерідко має місце на практиці.

Результатом проведеного аналізу (завершення етапу 2.3) є значення параметрів субструктури  $\tilde{\epsilon}_{II}(\tau^*)$  і  $\langle *n \rangle$ , і, тим самим, наближення функції  $N$ , зумовленої розмиттям через дисперсність, задане як функція Коші [3, 8] з інтегральною шириною  $\beta_N = \frac{1}{2\langle *n \rangle}$ .

При подальшому аналізі (етап 2.4) встановлюється закон розподілу мікрореформацій  $\phi(\epsilon)$  повторним застосуванням адаптованої програми РТІКР до рівняння згортки типу (1), у якому правою частиною є відновлений фізичний профіль  $f$ , роль ядра рівняння відіграє наближення профілю  $N$  функцією Коші, а значення  $\tilde{\epsilon}_{II}(\tau^*)$  є додатковою інформацією про шукану деконволюцію  $\phi(\epsilon)$ . У окремих випадках (якщо вплив розсіювання через дисперсність виявляється нехтовно малим або  $\chi(f) \approx 1$  для усіх порядків відбиття) закон розподілу мікрореформацій може бути встановлений без повторного розв'язання рівняння згортки [14].

**Приклади застосування представленого підходу.** У роботах [11, 12, 14, 15] із застосуванням представлені методики проведено рентгенодифракційний аналіз дефектного стану механоактивованих порошків W та WC. Рентгенограми зразків та еталонів були одержані в режимі поточкового  $\theta-2\theta$  сканування з кроком  $\Delta 2\theta = 0,02$  або  $0,05^\circ$  і при фокусуванні по Бреггу—Брентано в  $Cu-K_\alpha$ -випромінюванні на дифрактометрах HZG-4 і ДРОН-4.

У роботі [11] досліджено вплив часу розмелу порошку вольфраму в шаровому млині в середовищі ацетону на зміну середніх значень мікрореформацій, мікронапружень та розмірів ОКР. Для усіх чотирьох досліджуваних зразків встановлено закон розподілу мікрореформацій [14] (табл. 2).

У роботі [15] із застосуванням представленого підходу встановлено, що результатом розмелу порошку карбиду вольфраму протягом 72 год є формування неоднорідного дефектного стану, що характеризується бідисперсністю ОКР з нанорозмірною компонентою. Виявлено, що має місце анізотропія ОКР обох фракцій, субмікронної  $WC_I$  та нанорозмірної  $WC_{II}$ , знайдено оцінки середніх розмірів ОКР у різних кристалографічних напрямках (табл. 3). Встановлено, що у субмікронній фракції  $WC_I$  ступінь свободи розподілу мікрореформацій рівний 1 (розподіл Коші) з параметрами, представленими у табл. 3.

У роботі [12] проведено порівняння оцінок, одержаних для механоактивованих порошків W та WC із застосуванням розробленого підходу із результатами застосування

**Таблиця 2. Середні значення розміру ОКР, мікронапружень та параметри розподілу мікрореформацій другого роду, що накопичуються в зразках порошку W з роботи [11] у міру наростання тривалості розмелу**

Тривалість розмелу, год	Розмір ОКР, нм	Параметри розподілу мікрореформацій			Середнє мікронапруження, ГПа
		ступінь свободи	$\epsilon_{1/2}$ , %	$\beta_{\epsilon}$ , %	
4	300	1	0,14	0,40	0,6
8	150	2	0,21	0,55	0,8
24	>>300	2	0,31	0,80	1,2
48	>>300	2	0,30	0,78	1,2

Таблиця 3. Субструктурні характеристики порошку карбіду вольфраму після 72 год розмелу [18]

Напрямок, $(hkl)$	Розмір ОКР, нм		Параметри розподілу мікродеформацій	
			$\epsilon_{1/2}$ , %	$\beta_\epsilon$ , %
	WC <sub>II</sub>	WC <sub>I</sub>		
(100)	2	40	0,35	1,10
(101)	3–4	>100	0,46	1,43
(001)	6–9	>100	0,53	1,65
Vci	—	100	0,43	1,35

Таблиця 4. Порівняння параметрів субструктури механоактивованих порошоків W та WC, визначених різними методами

Метод розрахунку	Параметр субструктури			
	$D_{\text{ОКР}}$ нм		$\epsilon_{II}$ , %	
	Матеріал, тривалість розмелу, напрямок			
	W [11], 8 год, (110)	WC <sub>I</sub> [15], 72 год, (100)	W [11], 8 год, (110)	WC <sub>I</sub> [15], 72 год, (100)
ГАФРЛ	120	30	0,22	0,43
Метод Холла–Вільямсона	250	>100	0,24	0,50
Розроблена методика	150	40	0,21	0,44

традиційних методів (табл. 4). В якості середнього значення мікродеформацій взято  $\epsilon_{II} = \beta_\epsilon / \sqrt{2\pi}$  для коректності його порівняння із значенням середнього, визначеного методом ГАФРЛ.

Висновки щодо законів розподілу мікродеформацій підтверджуються збігом модельних та експериментальних дифракційних ліній досліджуваних зразків для усіх розглянутих напрямків  $(hkl)$  [14].

Таким чином, для розділення ефектів дифракції рентгенівських променів на ОКР та кристалічній ґратці з мікродеформаціями в статті запропоновано процедуру, яка, зберігаючи простоту застосування графічного методу Холла–Вільямсона, враховує форму фізичного профілю та характер функції розсіювання через дисперсність і не потребує апріорних припущень щодо закону розподілу мікродеформацій.

Застосування запропонованої процедури забезпечується цифровою обробкою XRD-дифрактограм реальних матеріалів кристалічної будови, яка полягає у відновленні фізичного профілю методом регуляризації Тихонова.

На відміну від традиційних методів, розроблений підхід забезпечує достовірність результатів при аналізі дифракційних максимумів, перевищення ширини яких над еталонною шириною незначне та дозволяє встановлювати функцію щільності розподілу мікродеформацій.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Čerňanský M. Restoration and preprocessing of physical profiles from measured data. *Microstructure analysis from diffraction*, Snyder R.L., Bunge H.J. and Fiala J. (Eds). Oxford: Oxford Univ. Press, 1999. P. 613–651.
2. Jones F.W. The Measurement of Particle Size by the X-ray Method. *Proc. Roy. Soc.* 1938. Ser. A. **166**, № 924. P. 16–48.
3. Уоррен Б.И. Рентгенографическое изучение деформированных металлов. *Успехи физики металлов*. 1963. № 5. С. 171–237.
4. Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач. Москва: Наука, 1990. 232 с.
5. Williamson G.K., Hall W.H. X-ray line broadening from filed aluminium and wolfram. *Acta Metall.* 1953. **1**. P. 22–31.
6. Schoening F.R.L. Strain and Particle Size Values from X-Ray Line Breadths. *Acta Cryst.* 1965. **18**. P. 975–976.
7. Wilson A.J.C. On variance as a measure of line broadening in diffractometry. *Proc. Phys. Soc.* 1962. **80**. P. 286–294.
8. Васильев Д. М. Дифракционные методы исследования структур. Москва: Metallургия, 1977. 248 с.
9. Григорьев О.Н. Керамика и керметы на основе бескислородных тугоплавких соединений. *Порошк. металлургия*. 2012. № 11/12. С. 100–116.
10. Решетняк М.В., Соболев О.В. Расширение возможностей анализа структуры и субструктурных характеристик нанокристаллических конденсированных и массивных материалов квазибинарной системы W<sub>2</sub>B<sub>5</sub>-TiB<sub>2</sub> при использовании программы обработки рентгендифракционных данных “New\_profile” *Физ. инженерия поверхности*. 2008. **6**, № 3–4. С. 180–188.
11. Григорьев О.Н., Крячко Л.А., Бега Н.Д., Лаптев А.В., Головкова М.Е., Роженко Н.Н., Берсудский Е.И. Влияние шарового размола на структурные характеристики порошка вольфрама. *Электронная микроскопия и прочность материалов*. 2013. № 19. С. 114–122.
12. Григор'єв О.М., Картузов В.В., Роженко Н.М. Підвищення точності кількісних оцінок графічного методу Холла–Вільямсона за рахунок цифрової обробки XRD-дифрактограм. *Електрон. мікроскопія і міцність матеріалів*. 2017. № 23. С. 16–35.
13. Королюк В.С., Портенко Н.И., Скороход А.В., Турбин А.Ф. Справочник по теории вероятностей и математической статистике Москва: Наука, 1985. 640 с.
14. Роженко Н.М., Картузов В.В., Гусачук Д.А. Визначення методом рентгенографії функції розподілу мікродеформацій у механоактивованих порошках вольфраму. *Наук. нотатки*. 2017. № 57. С. 161–167.
15. Бега М.Д., Винокуров В.Б., Галанов Б.О., Григор'єв О.М., Картузов В.В., Мазур П.В., Роженко Н.М., Степаненко А.В. Дослідження методами рентгенографії субструктури порошку карбіду вольфраму після розмелу. *Електрон. мікроскопія і міцність матеріалів*. 2016. № 22. С. 58–72.

Надійшло до редакції 08.11.2018

REFERENCES

1. Čerňanský, M. (1999). Restoration and preprocessing of physical profiles from measured data. Snyder, R.L., Bunge, H.J. and Fiala, J. (Eds.) *Microstructure analysis from diffraction* (pp. 613-651). Oxford: Oxford Univ. Press.
2. Jones, F. W. (1938). The Measurement of Particle Size by the X-ray Method. *Proc. Roy. Soc. Ser. A.*, 166, No. 924. pp. 16-48.
3. Warren, V. E. (1963). X-ray study of deformed metals. *Uspekhi fiziki metallov*, No. 5, pp.171-237 (in Russian).
4. Tikhonov, A. N., Goncharskiy, A. V., Stepanov, V. V. & Yagola, A. G. (1990). Numerical methods for solving ill-posed problems. Moscow: Nauka (in Russian).
5. Williamson, G. K. & Hall, W. H. (1953). X-ray line broadening from filed aluminium and wolfram. *Acta Metall*, 1, pp. 22-31.
6. Schoening, F. R. L. (1965). Strain and Particle Size Values from X-Ray Line Breadths. *Acta Cryst.*, 18, pp. 975-976.
7. Wilson, A. J. C. (1962). On variance as a measure of line broadening in diffractometry. *Proc. Phys. Soc.*, 80, pp. 286-294.

8. Vasil'ev, D. M. (1977). Diffraction methods of research structures. Moscow: Metallurgiya (in Russian).
9. Grigor'ev, O. N. (2012). Ceramics and cermets based on oxygen-free refractory compounds. Poroshkovaya metallurgiya, No.11/12, pp. 100-116 (in Russian).
10. Reshetnyak, M. V. & Sobol', O. V. (2008). Enhancement of structure and substructure analysis of W<sub>2</sub>B<sub>5</sub>-TiB<sub>2</sub> quasi-binary nano-crystalline condensed and bulk materials with application of "New\_profile" soft-ware for X-ray diffraction data treatment. Fizicheskaya inzheneriya poverhnosti, 6, No. 3-4, pp. 180-188 (in Russian).
11. Grigor'ev, O. N., Kryachko, L. A., Bega, N. D., Laptev, A. V., Golovkova, M. E., Rozhenko, N. N. & Bersudskiy, E. I. (2013). Effect of ball milling on structural characteristics of tungsten powder. Elektronnaya mikroskopiya i prochnost' materialov, No. 19, pp. 114-122 (in Russian).
12. Grigor'ev, O. M., Kartuzov, V. V. & Rozhenko, N. M. (2017). Increase of exactness of quantitative estimates of the Hall–Williamson graphic method due to digital processing of X-ray patterns. Elektronna mikroskopiya i mitsnist' materialiv, No. 23, pp. 16-35 (in Ukrainian).
13. Korolyuk, V. S., Portenko, N. I., Skorokhod, A. V. & Turbin, A. F. (1985). A Handbook on Probability Theory and Mathematical Statistics. Moscow: Nauka (in Russian).
14. Rozhenko, N. M., Kartuzov, V. V. & Gusachuk, D. A. (2017). Determination of density function of microstrains into mechanically activated tungsten powders by method of X-ray diffraction. Naukovi notatki, No. 57, pp. 161-167 (in Ukrainian).
15. Bega, M. D., Vinokurov, V. B., Galanov, B. O., Grigor'ev, O. M., Kartuzov, V. V., Mazur, P. V., Rozhenko, N. M. & Stepanenko, A. V. (2016). Study of the substructure of the tungsten carbide powder during milling by radiography methods. Elektronna mikroskopiya i mitsnist' materialiv, No. 22, pp. 58-72 (in Ukrainian).

Received 08.11.2018

Н.Н. Роженко, О.Н. Григорьев, В.В. Картузов

Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины, Киев  
E-mail: rzh.natali@gmail.com

#### МЕТОД АНАЛИЗА ФОРМЫ ДИФРАКЦИОННЫХ ЛИНИЙ, НЕ ТРЕБУЮЩИЙ ПЕРЕХОДА К ПРОСТРАНСТВУ ОБЪЕКТА

Представлено обобщение методов моментов и Холла–Вильямсона, не нуждающееся в априорных предположениях относительно закона распределения микродеформаций и учитывающее характер функции рассеивания из-за наличия областей когерентного рассеивания. Разработанный подход базируется на анализе формы восстановленного с применением метода регуляризации Тихонова полного физического профиля и позволяет определять функцию плотности распределения микродеформаций.

**Ключевые слова:** физический профиль, дефектное состояние, распределение микродеформаций.

N.M. Rozhenko, O.N. Grigor'ev, V.V. Kartuzov

I.M. Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of the NAS of Ukraine, Kiev  
E-mail: rzh.natali@gmail.com

#### A METHOD OF ANALYSIS OF THE SHAPES OF X-RAY DIFFRACTION LINES NOT REQUIRING A TRANSITION TO THE SPACE OF AN OBJECT

Generalizations of the method of moments and the Hall–Williamson one are presented without *a priori* assumptions about the distribution law for microstrains with regard for the nature of a dispersion function due to the presence of coherent scattering. The developed approach is based on the analysis of the shape of the complete physical profile restored using the Tikhonov regularization method and allows one to determine the distribution function of microstrains.

**Keywords:** physical profile, defective condition, distribution of microstrains.