

ВРАХУВАННЯ ДИСПЕРСІЇ РОЗПОДІЛВ МІЖАТОМНИХ ВІДСТАНЕЙ АТОМНИХ СІТОК АМОΡФНОГО КРЕМНІЮ

Ковтуненко В.С., доцент, Іваницька Г.М., аспірант
Черкаський державний технологічний університет,
Ужгородський національний університет

У роботі аналізуються результати проведених математичних розрахунків параметрів функції розподілу міжатомних відстаней різних координатійних сфер аморфного кремнію. Показано, що для різних моделей розподілів міжатомних відстаней координатійних сфер проявляються суттєві відмінності в загальній сумарній функції радіального розподілу атомів. У цілому вони стосуються ширини піків та глибини впадин між ними. Тому цікаво було виявити характер впливу таких відмінностей функцій розподілу міжатомних відстаней на експериментальні дифракційні дані та структурні фактори неупорядкованих атомних сіток. Для цього нами чисельними методами були розраховані інтерференційні функції першої та другої координатійних сфер аморфних плівок кремнію для двох видів розподілу гауссового та квадратичного.

Аналіз отриманих результатів показав, що при використанні в цих розподілах однакових параметрів, розраховані інтерференційні функції практично не відрізняються між собою для першої координатійної сфери та мають деякі відмінності для другої координатійної сфери. При цьому дані відмінності полягають у збільшенні висоти піків і глибини впадин, що закономірно відображає на них більш вузький розподіл міжатомних відстаней при представленні координатійних сфер квадратичною функцією.

Параметри структури ближнього порядку реальних аморфних плівок кремнію більш точно описуються параболічним представленням форми піків координатійних сфер. Одночасно застосування такого представлення адекватніше описує і парціальні інтерференційні функції, які утворюються при дифракційних дослідженнях аморфних речовин. Опис координатійних сфер атомних сіток аморфних речовин функціями розподілу Гаусса зумовлює зменшення ступеня розділення піків сусідніх сфер. використання ж для цього квадратичної функції значно покращує роздільчу здатність методу функцій радіального розподілу атомів.