

## ЗАСТОСУВАННЯ КВАДРАТИЧНОГО РОЗПОДІЛУ МІЖАТОМНИХ ВІДСТАНЕЙ КООРДИНАЦІЙНИХ СФЕР АМОРФНИХ ПЛІВОК

Ковтуненко В.С., доцент

Черкаський державний технологічний університет

Традиційно в структурному аналізі аморфних речовин топологічне розупорядкування міжатомних відстаней описують за допомогою гауссових функцій радіального розподілу атомів (ФРРА) у межах кожної координаційної сфери.

З фізичної точки зору, такий підхід для задання ФРРА у межах фіксованої координаційної сфери чи підсфери не зовсім коректний. Це зумовлено тим, що гауссовий розподіл описує фізичні параметри систем із повним ідеальним безпорядком. Тому графік такого розподілу має довгі "хвости" як у сторону менших, так і в сторону більших міжатомних відстаней. Реальні ж аморфні речовини мають атомні сітки із чітким ближнім порядком. Він обумовлений тим, що геометричні параметри таких сіток в конденсованих системах встановлюються строгими квантово-механічними законами міжатомної взаємодії. В результаті, ці параметри лежать у чітко визначених діапазонах.

Для врахування таких обмежень у практичній електронографії ми спробували варіації міжатомних відстаней атомних сіток аморфних речовин у межах кожної координаційної сфери описувати не розподілом Гаусса, а близькою до нього математичною функцією з більш чіткою фіксацією "кінців" розподілу. Проведений нами аналіз показав, що в такій ролі може виступати проста квадратична функція, область визначення якої обмежена діапазоном можливих змін міжатомних відстаней у певній координаційній сфері.

На етапі розрахунку модельної ФРРА було визначено ступінь відповідності між собою гауссового та квадратичного розподілу міжатомних відстаней в атомній сітці аморфних речовин у межах однієї координаційної сфери. Обидві функції задають майже однакові розподіли в центральній області піків. У той же час, квадратична функція немає на графіках "хвостів" гауссових розподілів при дуже великих і дуже малих міжатомних відстанях, у порівнянні з радіусами відповідних координаційних сфер.