

# ФОРМУВАННЯ ІНТЕРФЕРЕНЦІЙНИХ ФУНКЦІЙ В ОБЛАСТІ СЕРЕДНЬОГО ПОРЯДКУ АМОРФНИХ РЕЧОВИН

**В.П. Іваницький, В.І. Сабов**

Ужгородський національний університет, 88000, Підгірна, 46, Ужгород  
e-mail: [ivanc@univ.uzhgorod.ua](mailto:ivanc@univ.uzhgorod.ua)

Досліджено закономірності формування інтерференційних функцій (ІФ) аморфних речовин в області середнього порядку. Встановлено, що визначальний вплив на формування ІФ задають зовнішні координаційні сфери кластера. Порівняння отриманих результатів з експериментальними даними показує, що за відносною інтенсивністю реально на ІФ в області середнього порядку може проявлятися лише перша, найбільш інтенсивна осциляція.

## Вступ

Однією з тенденцій розвитку сучасної електроніки та оптоелектроніки є мініатюризація як окремих електронних елементів, так і цілих електронних пристроїв. При переході мікронних меж в розмірах компонент електронних елементів на перше місце в дослідженні їх структури виходять методи електронної мікроскопії та електроннографії [1]. Одночасно з цим в електронних пристроях знаходять використання нові матеріали, в тому числі й аморфні речовини складного хімічного складу [2].

Така ситуація робить надзвичайно важливим питання аналізу достовірності та точності результатів, отримуваних різними електронномікроскопічними методами. Особливо це стосується електроннографічних досліджень складних аморфних об'єктів із використанням функцій радіального розподілу атомів. Це робить актуальним всебічний розгляд питань аналізу особливостей використання методів електроннографії для складних аморфних речовин з акцентуванням основної уваги на сутності фізичних явищ, які лежать в основі даних досліджень. Дана робота розглядає один із важливих аспектів електроннографічного методу – формування інтерференційних функцій, як основної структурної характеристики аморфних речовин.

## Метод досліджень

В процесі дифракційного експерименту на речовині отримується спектральна функція  $\Psi(\vec{s})$ , яка представляє собою суперпозицію всіх гармонічних складових функції мікророзподілу атомної густини  $\rho(\vec{r})$ . Кожна гармоніка при цьому відповідає одній фіксованій міжатомній відстані в структурі об'єкта. Але вилучити із функції  $\Psi(\vec{s})$  окремі гармоніки і однозначно проаналізувати на їх основі структуру досліджуваної речовини на сьогодні практично неможливо. В результаті будь-які експериментальні дослідження структури аморфних речовин прямими дифракційними методами дають лише наближені дані. Тому бажано було б мати різні критерії і закономірності, які дозволяли б безпосередньо з експериментальних даних визначати основні параметри структури аморфних речовин.

На нашу думку, пошук таких закономірностей може ґрунтуватися на тому, що для аморфних речовин базовим структурним елементом, який задає характер кутового розподілу розсіяного зондувального випромінювання, виступає будь-яка пара атомів. Сукупність у зразку всіх однакових пар атомів хімічних елементів двох видів із фіксованою міжатомною відстанню  $r$  при рівноімовірній їх орієнтації в будь-якому напрямку простору визначає найпростішу складову “цеглинку” дифра-

ктограми аморфних речовин – інтерференційну функцію (ІФ) пари атомів  $i(s)$  [5]. Якщо для конкретності вважати, що в нашу пару входять атом сорту 1 та атом сорту 2, то, згідно з формулою Дебая [6], інтенсивність розсіювання електронів такою парою атомів

$$I(s) = 2F_1(s) \cdot F_2(s) \cdot [i(s)+1] = 2F_1(s) \cdot F_2(s) \times [\sin(sr)/sr+1], \quad (2)$$

де  $F_1(s)$  і  $F_2(s)$  – атомні амплітуди розсіювання випромінювання для атомів сорту 1 та сорту 2 відповідно. Згідно з (2), ІФ пари атомів має осцилюючий характер (рис.1). При цьому сама форма осциляцій і амплітуди їх максимумів і мінімумів задаються функцією  $\sin(sr)/sr$ , в яку входить єдиний структурний параметр речовини – міжатомна відстань  $r$ .

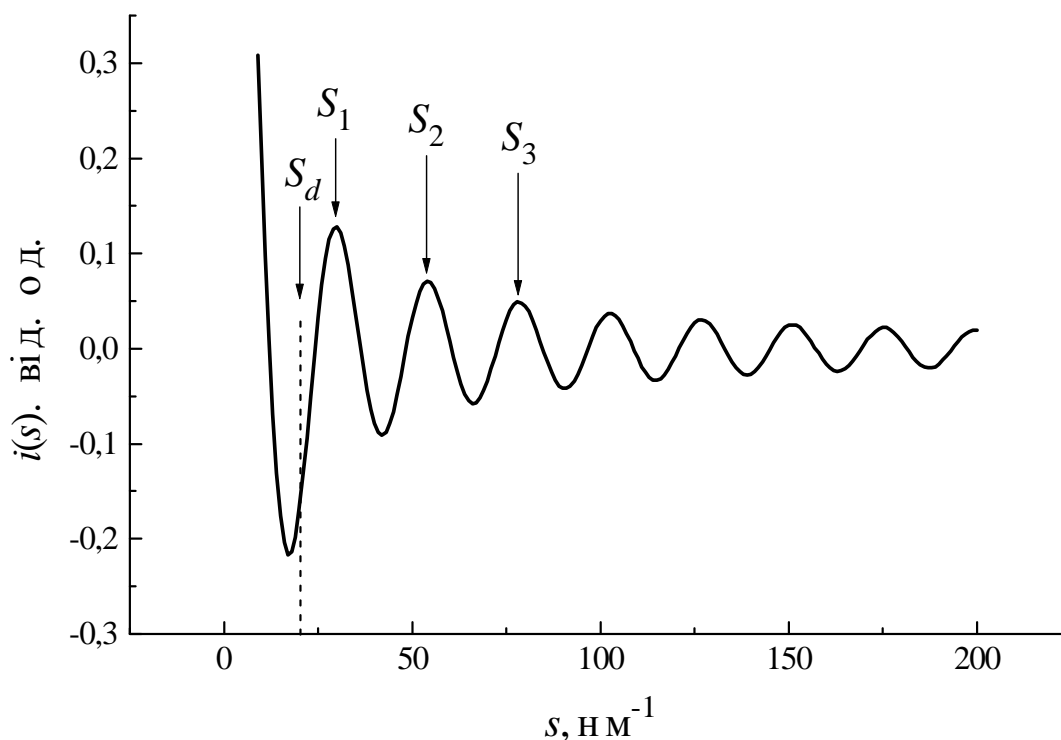


Рис.1. Інтерференційна функція окремої першої КС з радіусом  $r = 0,26$  нм

Суперпозиція ІФ всіх міжатомних відстаней, які реалізуються в структурі зразка, задає загальну спектральну функцію  $\Psi(\vec{s})$ . Таким чином, положення піків експериментальної інтенсивності розсіювання визначаються сумою великого числа ІФ різних пар атомів  $i(s)$ . Внаслідок цього різні міжатомні відстані можуть давати вклад в одні й ті ж піки експериментальної інтенсивності. Ступінь впливу ІФ даної пари атомів на загальну інтенсивність розсіювання електронів аморфною речовиною визначається видом атомів, які входять в дану пару, а точніше, їх атомними амплітудами розсіювання, та сумарною кількістю таких пар атомів в об'ємі зразка, який бере участь в формуванні

дифракційної картини. В результаті, осциляції ІФ всіх пар атомів при сумуванні накладаються одна на одну і розділити внесок кожної з міжатомних відстаней в загальному випадку дуже складно. Розрахунок функцій радіального розподілу атомів вирішує цю проблему переважно лише в області ближнього порядку. Особливості ж прояву середнього порядку аналізуються безпосередньо по кривих інтенсивності. Тому нами проведені дослідження загальних закономірностей утворення дифракційної картини в цій області.

З нашої точки зору, найзручнішим для такого аналізу методом введення в структуру зразка нових пар атомів є додавання до нього цілих координаційних сфер

(КС) [6]. Тому при розрахунках ми “стартували” від модельного кластера, який має лише одну КС. На наступному етапі до нього додається друга КС і вивчаються зміни, які проходять при цьому в інтерференційній функції кластера. Такі цикли розрахунків і аналізу проводяться поетапно при додаванні наступних КС аж до моменту досягнення кластером певних розмірів. Розрахунки проводилися нами з використанням програм, написаних для роботи в програмній оболонці Delphi. При нескладних розрахунках використовувалась і програмна оболонка Microsoft Excel. Для взаємного порівняння ІФ різних кластерів ми нормували їх інтенсивності до одного атома кластера. Для зручності аналізу отримані інтенсивності множилися на 100.

Вихідною структурою для досліджень було вибрано ідеалізовану кристалічну ґратку типу алмаза з параметром елементарної комірки  $a = 0,6$  нм, близьким до значення цього параметра в кристалічній ґратці германію ( $a = 0,566$  нм). Модель містила 915 атомів і мала сферичну форму із радіусом  $R_m = 1,81$  нм, що відповідає атомній густині  $\rho_{at} = 37$  нм<sup>-3</sup>. Для перевірки деяких закономірностей поведінки загальної ІФ використовували також більш масштабну модель із 1551 атома радіусом  $R_m = 2,15$  нм. Радіуси КС і відповідні їм координаційні числа (КЧ) вихідного кластера наведені в [6].

Виходячи із параметрів вихідної моделі, в якості базових структурних елементів досліджуваної аморфної речовини бралися пари атомів із міжатомними віддальми, рівними радіусам КС. Кількості таких пар в моделі бралися рівними КЧ відповідних КС. При цьому в межах кожної КС “розмиття” міжатомних відстаней не проводилося. Тобто, в основі аналізу покладено найпростішу ідеалізовану аморфну структуру, яка має лише повний орієнтаційний безпорядок. Один із можливих реальних проявів такої моделі аморфної речовини може бути сукупність досить великого числа вихідних кластерів розмірами  $R_m$ , рівноімовірно хаотично

орієнтованих в просторі один відносно одного.

### Результати досліджень та їх аналіз

Проведені нами дослідження показали, що особливості формування загальної ІФ кластера в області хвильових векторів  $s$ , що відповідають середньому порядку (СП), кардинально відрізняються від закономірностей утворення загальної ІФ в області хвильових векторів, які відповідають реалізації ближнього порядку аморфних речовин [6]. При цьому в області СП поведінка ІФ “зростаючого” кластера виявилася строго закономірною і корельованою. Умовно, граничною межею області ПП ми взяли точку  $s_d$ , яка приблизно відповідає середині відстані між положеннями першого мінімуму та початку першого максимуму ІФ першої КС кластера (рис.1). Для нашої моделі величина  $s_d = 21$  нм<sup>-1</sup>.

Осциляції інтерференційної функції окремої першої КС модельного кластера із радіусом  $r = 0,26$  нм майже періодично повторюються в просторі хвильових векторів з поступовим зменшенням амплітуди осциляцій. Положення максимумів осциляцій  $s_i$  відповідає простій закономірності [7]:

$$s_i r = a_i, \quad (3)$$

де  $a_i$  – ряд констант, кожен член якого відноситься до відповідного максимуму. Зокрема,  $a_1 = 7,78$ ;  $a_2 = 14,06$ ;  $a_3 = 20,46$ ;  $a_4 = 26,87$ ; ... . Відстань між двома сусідніми максимумами приблизно складає  $6,4r$  і дуже слабо змінюється, проявляючи ледь помітний ріст із збільшенням  $s$ . Зрозуміло, що у відповідності з вибором точки  $s_d$ , жодна із осциляцій цієї ІФ не попадає в область СП.

В процесі “росту” кластера ІФ в області СП поступово видозмінюється. Визначальним джерелом цих відозмін є ІФ останніх (зовнішніх) КС даного кластера. Зокрема, кількість осциляцій загальної ІФ певного кластера дорівнює числу осциляцій, які мають ІФ зовнішніх КС цього кластера (рис.2).

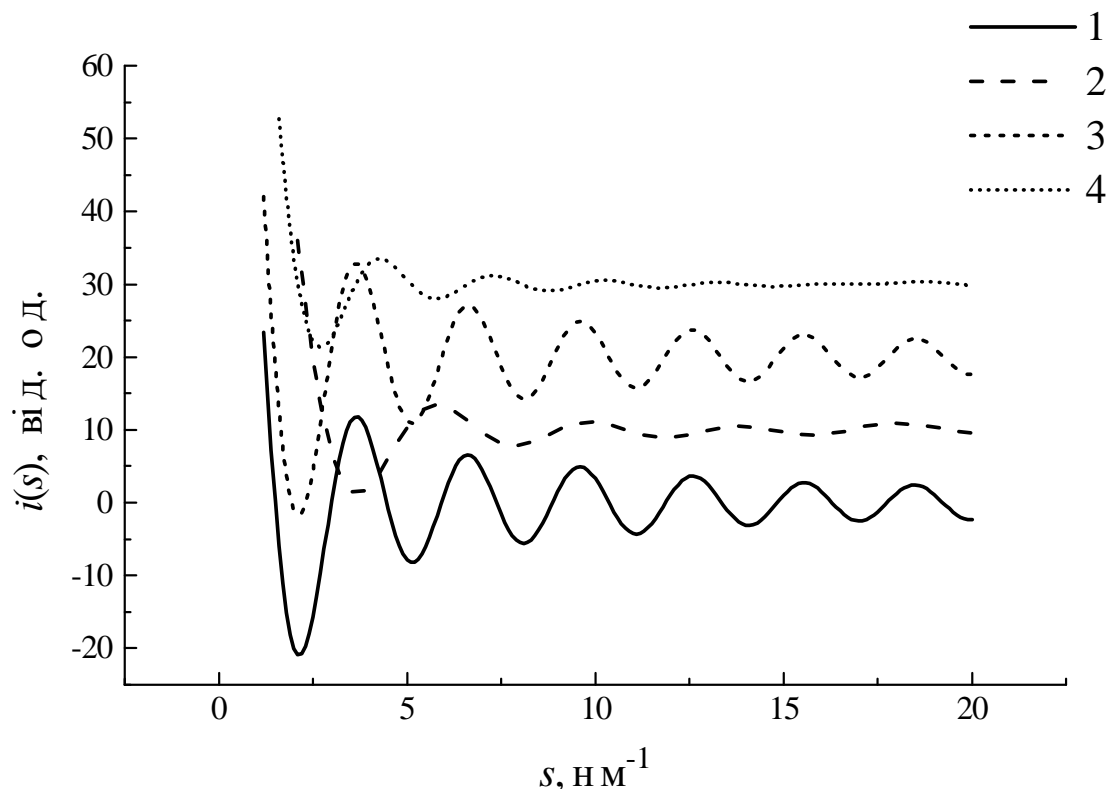


Рис.2. ІФ в області СП: 1) окремої 26-ої КС; 2) кластера із 26 КС; 3) окремої 49-ої КС; 4) кластера із 49 КС

Додавання до кластера нової чергової КС практично не змінює загального вигляду ІФ, який повторює форму ІФ попереднього кластера. Відбувається лише систематичне зміщення піків ІФ в бік менших  $s$ , змінюється їх інтенсивність і закономірно збільшується число осциляцій у відповідності із кількістю піків, які має ІФ останньої заданої КС (рис.3). При цьому всі без винятку осциляції ІФ кластера залишаються чіткими, а їх амплітуда в кілька разів менша амплітуди осциляцій ІФ окремих КС, що додаються до кластера на даному етапі (рис.2). Із зростанням розмірів кластера це співвідношення трохи змінюється, але в усьому дослідженому діапазоні до п'ятидесяти КС воно лежить в межах від 3,5 до 4. При цьому для кластерів із розмірами більше 15 КС відношення амплітуди максимумів ІФ зовнішньої КС до амплітуди відповідних максимумів ІФ кластера стабілізується на величині, приблизно рівній 3,7.

Співвідношення інтенсивностей осциляцій ІФ окремих КС та кластерів визначається двома факторами. Перший із них обумовлений причинами чисто методичного характеру, оскільки всі розглядувані нами інтенсивності є нормованими до 100 атомів незалежно від того, скільки атомів містить даний кластер чи дана КС. Другий фактор обумовлений фізичними принципами утворення даних ІФ. У випадку окремої КС ми маємо стократні осциляції лише однієї гармоніки, яка відповідає радіусу цієї КС. ІФ кластера формується як суперпозиція осциляцій різних гармонік, в результаті чого відбувається часткове погашення величини осциляцій одних гармонік за рахунок осциляцій протилежного знаку інших гармонік. Таке взаємне погашення веде до сумарного зменшення інтенсивності осциляцій ІФ кластера в порівнянні з осциляціями ІФ окремої КС.

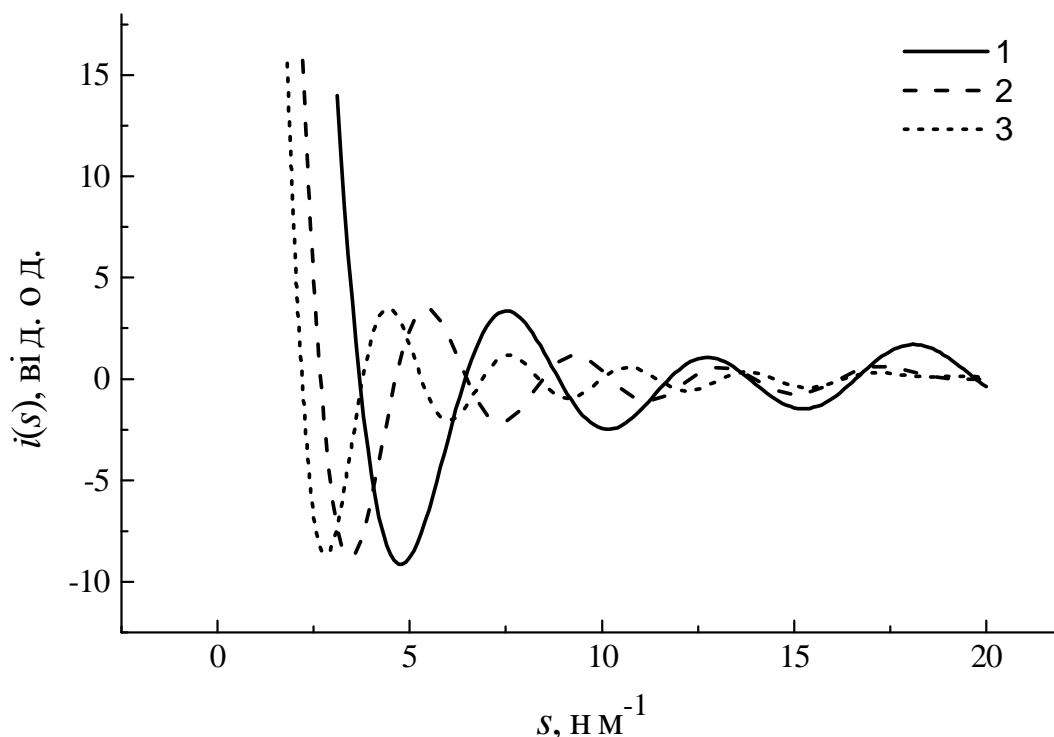


Рис.3. ІФ в області ПП: 1) кластера із 15 КС; 2) кластера із 30 КС; 3) кластера із 45 КС

Лише для ІФ кластера із двох та трьох перших координаційних сфер положення  $s_i$  піків приблизно задовільняє закону (3), якщо в якості  $r$  брати значення радіуса останньої (зовнішньої) координаційної сфери кластера, яке надалі позначатимемо через  $R$  (таблиця 1). Для ІФ кластерів, які складаються із чотирьох і більше КС, піки зміщені в бік більших  $s$ , в порівнянні із положенням піків ІФ зовнішньої КС даного кластера (рис.2). Цікавим виявилось те, що таке зміщення не є випадковим. Положення  $s_i$  піків ІФ кластерів з точністю 2-3 % підкоряється правилу

$$s_i R = b_i \quad (4)$$

де  $b_i$  – новий ряд певних констант, подібний до ряду, наведеному в (3).

Визначені нами середні значення членів цього нового ряду є наступними (таблиця 2):  $b_1 = 8,98$ ;  $b_2 = 15,4$ ;  $b_3 = 21,6$ ;  $b_4 = 28,0$ ; ... . Відстань між двома сусідніми максимумами при цьому дорівнює  $6,4/R$ .

Константи  $b_i$  приблизно на 1,2 більші від відповідних констант  $a_i$ . Причиною цього є вплив різкого підйому тих ділянок ІФ попередніх КС, які відповідають пря-

муванню  $s$  до нуля. В результаті осциляції ІФ зовнішніх КС кластера накладаються на плавну, різко зростаючу в напрямку  $s \rightarrow 0$  ділянку інтенсивності, що зумовлює зсув положень піків ІФ кластера  $s_i$  до більших значень, а відповідно і ріст добутку  $s_i R$ , тобто, констант ряду  $b_i$ .

Інтенсивності перших двох піків  $I_1$  та  $I_2$  ІФ сильно змінюються випадковим чином в процесі “росту” кластерів до 15 перших координаційних сфер.

Після цього величини інтенсивностей змінюються слабо і починаючи приблизно з 15-ої КС, виходять на стабільні значення, які з точністю до 8 – 10 % лишаються сталими при додаванні наступних КС (рис.4). Інтенсивності третього  $I_3$  і четвертого  $I_4$  піків сильно змінюються аж до виходу на стабільні значення при “зростанні” кластерів до суттєво більших величин (рис.4): для  $I_3$  це 26 КС, а для  $I_4$  – 37 КС. Інтенсивності ж наступних піків, положення яких попадає в область, граничну з областю БП, змінюються в широких межах по осцилюючому закону і на стабільні значення не виходять навіть при рості кластера до 50-60 КС.

Таблиця 1

Положення піків ІФ  $s_i$  в області ПП для кластерів різних розмірів  $R$

Номер КС	$R$ , нм	$s_1$ , нм <sup>-1</sup>	$R*s_1$	$s_2$ , нм <sup>-1</sup>	$R*s_2$	$s_3$ , нм <sup>-1</sup>	$R*s_3$	$s_4$ , нм <sup>-1</sup>	$R*s_4$
1	0,260								
2	0,424	18,45	7,826						
3	0,497	16,70	8,307						
4	0,600	16,00	9,600						
5	0,654	14,25	9,317	20,00	13,076				
6	0,735	11,65	8,560	19,20	14,108				
7	0,779	10,90	8,495	18,75	14,614				
8	0,849	10,50	8,909	18,25	15,485				
9	0,887	9,85	8,741	17,25	15,308				
10	0,949	9,30	8,822	16,35	15,510				
11	0,984	9,05	8,902	15,95	15,688	20,95	20,606		
12	1,039	8,95	9,301	15,70	16,315	20,55	21,356		
13	1,071	8,50	9,105	14,80	15,854	19,35	20,728		
14	1,122	7,80	8,755	13,20	14,816	18,40	20,652		
15	1,152	7,50	8,641	12,70	14,632	18,10	20,853		
16	1,200	7,45	8,940	12,70	15,240	18,05	21,660		
17	1,228	7,35	9,024	12,50	15,348	17,90	21,978		
18	1,273	7,10	9,036	12,10	15,400	17,50	22,272		
19	1,299	6,90	8,963	11,80	15,328	17,10	22,213		
20	1,342	6,75	9,056	11,55	15,495	16,80	22,539		
21	1,367	6,55	8,951	11,20	15,305	16,05	21,932	19,450	26,578
22	1,407	6,45	9,076	11,00	15,478	15,65	22,021	19,250	27,087
23	1,431	6,30	9,015	10,80	15,454	15,25	21,821	19,050	27,259
24	1,470	6,20	9,112	10,60	15,578	14,90	21,897	18,850	27,702
25	1,492	6,05	9,029	10,30	15,372	14,45	21,565	18,500	27,609
26	1,530	5,80	8,872	9,85	15,068	13,85	21,186	18,000	27,535
27	1,552	5,70	8,844	9,70	15,051	13,60	21,102	17,800	27,618
28	1,609	5,60	9,008	9,60	15,442	13,50	21,715	17,650	28,390
29	1,643	5,50	9,037	9,40	15,445	13,25	21,771	17,400	28,590
30	1,664	5,45	9,066	9,25	15,387	13,10	21,792	17,250	28,695
31	1,697	5,40	9,164	9,20	15,612	13,05	22,146	17,200	29,188
32	1,717	5,25	9,013	9,00	15,451	12,70	21,803	16,850	28,928
33	1,749	5,15	9,008	8,80	15,393	12,40	21,690	16,200	28,337
34	1,768	5,10	9,019	8,70	15,385	12,25	21,663	15,800	27,941
$b_i$	-	-	8,98	-	15,4	-	21,6	-	28,0

Така їх поведінка зумовлена додатковим впливом тих осциляцій інтерференційних функцій, які попадають вже в область БП. Випадкові зміни інтенсивностей  $I_1$ ,  $I_2$ ,  $I_3$  та  $I_4$  до виходу їх на стабільні значення проходять однаково (рис.4): спочатку вони зростають протягом 3-7 КС, потім проходить їх різкий спад протягом 4-8 КС, який переходить в нове зростання цих інтенсивностей з на-

ступним їх виходом на стабільні значення протягом 3-9 КС. Більш того, вихід всіх чотирьох піків ІФ на стабільні значення проходить в процесі зростання кластера в середньому на 15-17 КС, починаючи від моменту “появи” даного піку в області СП. Зокрема, третій і четвертий піки попадають в цю область відповідно на етапі додавання 11-ої КС і 21-ої КС. А після росту кластера на 15 КС

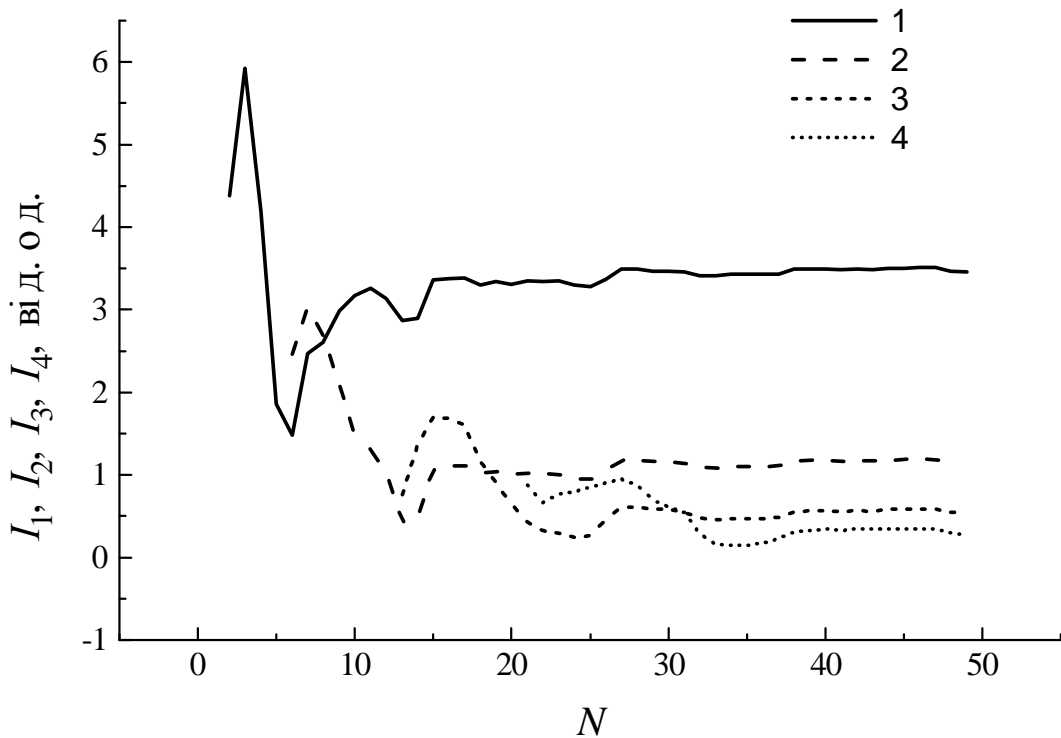


Рис.4. Залежності інтенсивностей  $I_1$  (1),  $I_2$  (2),  $I_3$  (3) та  $I_4$  (4) піків ІФ в області ПП від кількості КС в кластері  $N$

відповідно до 26 КС і 37 КС інтенсивності цих піків виходять на стабільні значення.

Цікавим виявився також той факт, що стабільні значення інтенсивностей перших трьох максимумів ІФ кластерів добре корелюють із величинами  $\sin(b_i)/b_i$ . І така кореляція покращується, якщо в якості  $b_i$  взяти результати усереднення не по всіх кластерах, а лише по тих кластерах, розміри яких відповідають усталеним значенням інтенсивності максимумів ІФ. При такому усередненні і з нормуванням інтенсивності на один атом  $\sin(b_1)/b_1 = 0,04$ , стабільне значення  $I_1 = 0,036$ ;  $\sin(b_2)/b_2 = 0,016$ , стабільне значення  $I_2 = 0,012$ ;  $\sin(b_3)/b_3 = 0,009$ , стабільне значення  $I_3 = 0,006$ .

Теоретично розраховані нами ІФ кластерів показують, що всі вони, починаючи вже із розмірів у дві КС, мають осциляції, які відповідають існуванню проміжного порядку. На експериментальних же інтенсивностях більшості аморфних речовин, структура ближнього порядку яких подібна до кристалічної ґратки германію, таких піків немає [8]. Такий же результат отри-

мали і автори роботи [9], розраховуючи інтенсивності розсіювання електронів на кластерах алюмінію. На отриманих ними теоретичних ІФ спостерігається пік при  $s = 9 \text{ нм}^{-1}$ , якщо область існування ближнього порядку обмежена всього двома координаційними сферами. На експериментальних же дифрактограмах такого піку не виявлено. Із цього факту в [9] робиться висновок, що формула (3) і похідні від неї справедливі лише для  $s > 20 \text{ нм}^{-1}$ . Нам такий висновок здається досить сумнівним, оскільки вираз (3) отримано із самих загальних фізико-математичних міркувань.

Ми вважаємо, що положення піків осциляцій ІФ в області ПП строго підкоряється правилу (4) в модельних розрахунках для кластерів. Але надалі потрібно детально дослідити, чи отримані закономірності не є ефектами обриву, тобто результатом дії скінченного розміру модельних кластерів. Для цього необхідно провести подібні модельні розрахунки на неперервній аморфній матриці і порівняти їх з отриманими в цій роботі результатами. Такі розрахунки ми плануємо провести найближчим часом.

Крім цього, при експериментальних дослідження піки в області ПП теж можуть не проявлятися з кількох причин: 1) вплив дистанційної розупорядкованості аморфної структури на інтенсивність цих піків; 2) за рахунок некогерентного фону та експериментальних похибок ці піки можуть “розмиватися” і стати непомітними на кривих розсіювання.

Нами проведено аналіз впливу цих факторів на ІФ кластерів. Наші модельні розрахунки проводилися на аморфних структурах, в які було введено лише повну орієнтаційну неупорядкованість. Всі ж віддалі між атомами були строго фіксованими і рівними радіусам КС кристалічної ґратки германію. Для перевірки впливу ступеня розупорядкованості ми ввели в розглянуту раніше модель дистанційний безпорядок. З цією метою кожна координаційна сфера “розмивалася” шляхом її поділу на ряд підсфер таким чином, щоб отримати приблизно гаусовий розподіл атомів по цих півсферах. Після цього для такої моделі також розраховувалися ІФ кластерів різних розмірів. Результати таких розрахунків якісно повністю повторюють описані вище закономірності. Тобто, введення в аморфну структуру ще і дистанційного розупорядкування не змінює характеру формування ІФ.

Для визначення ролі осциляцій ІФ в області ПП в загальній інтенсивності розсіювання електронів кластером, ми розраховували ці інтенсивності по формулі (2) з врахуванням атомних амплітуд роз-

сіювання електронів германієм (рис.5). Одночасно в таблиці 2 приведено абсолютні та відносні величини осциляцій інтенсивності для кластерів різних розмірів по відношенню до плавної кривої атомного фактора германію.

Для подальшого аналізу врахуємо, що теоретичною межею точності електронографічного експерименту є величини 2 – 3 %. Тоді на експериментальних кривих розсіювання ми зможемо зафіксувати лише ті із промодельованих піків, відносні інтенсивності яких перевищують 3 % від загальної інтенсивності розсіювання. Як видно із таблиці 2, реально на кривих інтенсивності розсіювання електронів аморфними плівками із структурою типу алмазу можна виявити лише піки від осциляцій першого порядку. При цьому навіть ці найінтенсивніші піки знаходяться на межі експериментального виявлення.

Співставляючи дані таблиць 1 та 2 можна встановити, що для розглянутої моделі на ІФ в області СП експериментально можуть проявитися піки лише для кластерів з розмірами від 4-5 до 12-13 КС. Саме такі кластери дають вклад в пік СП осциляціями першого порядку. Осциляції ж наступних порядків на їх ІФ будуть попадати в область між СП та БП.

Для кластерів більшого розміру в області СП попадають вже осциляції другого порядку, які по інтенсивності значно слабкіші і фактично не можуть бути виявлені експериментально. Інтенсивний же

Таблиця 2

Кількість КС кластера	Абсолютні та відносні інтенсивності піків розсіювання електронів кластерами					
	Осциляція I порядку		Осциляція II порядку		Осциляція III порядку	
	Абсолютна	Відносна, %	Абсолютна	Відносна, %	Абсолютна	Відносна, %
3	1,26	4,4	-	-	-	-
5	1,38	4,2	-	-	-	-
10	1,34	3,0	0,64	2,1	-	-
15	1,40	2,9	0,19	0,5	0,4	1,4
20	1,64	3,3	0,41	1,0	0,28	0,9
25	1,66	3,3	0,43	1,0	0,11	0,3
30	1,78	3,5	0,55	1,2	0,23	0,6
35	1,74	3,4	0,52	1,1	0,20	0,5



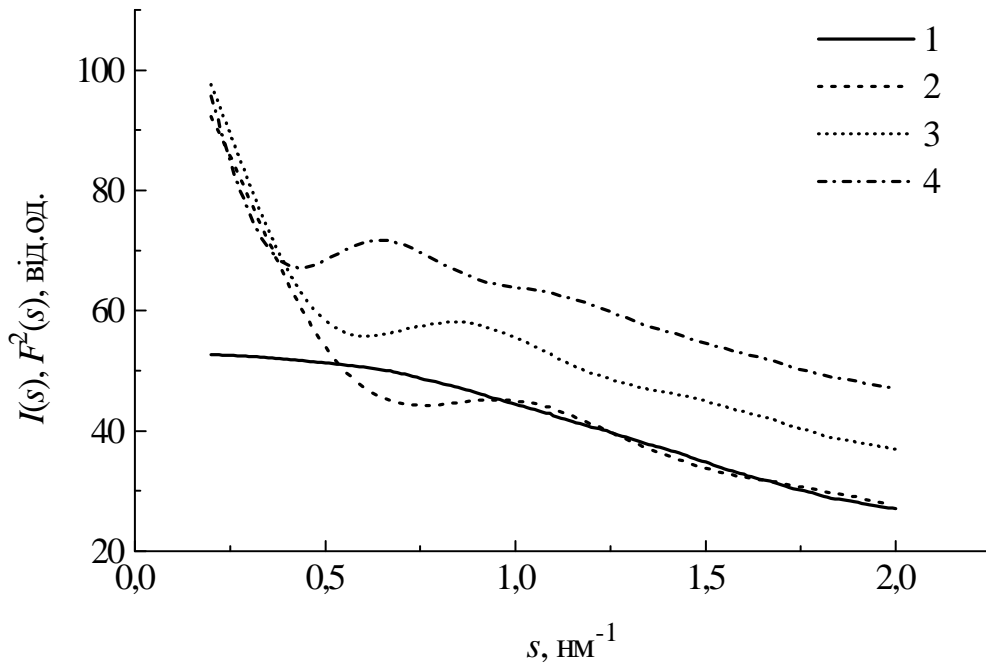


Рис.5. Загальна інтенсивність розсіювання електронів на модельному кластері із 7 КС (2), 10 КС (3), 20 КС (4) та атомний фактор розсіювання електронів германієм (1).

під осциляцій першого порядку зміщується для таких кластерів до центрального пучка розсіяних електронів і буде мас-

куватися малокутовим розсіюванням електронів в цій області.

### Висновки

1. Досліджено закономірності формування інтерференційних функцій (ІФ) аморфних речовин в області середнього порядку.

2. Положення  $s_i$  піків ІФ з точністю 2-3 % підкоряється закону  $s_i R = b_i$ , де  $R$  – радіус останньої зовнішньої координаційної сфери модельного кластера, а  $b_i$  – ряд констант ( $b_1 = 8,98$ ;  $b_2 = 15,36$ ;  $b_3 = 21,6$ ;  $b_4 = 28,0$ ; ...).

3. Інтенсивності піків ІФ в області середнього порядку сильно змінюються випадковим чином в процесі “росту” кластерів до 15 перших координаційних сфер, після чого виходять на стабільні значення.

4. При достатній точності експериментальних досліджень для розглянутої моделі на ІФ в області ПП може проявлятися пік лише при розмірах кластерів до 12-13 КС.

### Література

1. Grand Ballroom F, Adam's Mark Hotel. To use electron diffraction techniques // International Journal of Modern Physics C, Vol.9, No.7, 1998, P.917-926.
2. K.N.Zakshminarayan, K.K.Srivastava. Amorphous semiconductors – materials of the future // ZETE Techn. Rev. 1995, v.12, №4, p.88-93.
3. G.Ehret, J.Z. Crovisier, J.P. Eberhart. A new method for studing structure: ana

- lytical electron microscopy and ultramicrotomic thin sections. // JNCS, 1996, v.126, №1-2, p.72-79.
4. Жданов Г.С., Илюшин А.С., Никитина С.В. Дифракционный и резонансный структурный анализ. Рентгено-, электроно-, нейтроно-, мэссбауэрография и мэссбауэровская спектроскопия. – М.: «Наука», – 1980. – 254С.

5. Иваницкий В.П., Сабов В.И. Анализ фундаментальных основ электронографического метода функций радиального распределения атомов сложных аморфных веществ. Сборник докладов 14-го Международного симпозиума «Тонкие пленки в оптике и электронике». Харьков, 22-27 апреля 2002 г., с.216-220.
6. Іваницький В.П., Сабов В.І. “Формування інтерференційних функцій аморфних речовин в області ближнього порядку” Вісник УжНУ, серія “Фізика”, №13, 2003, с.82-89.
7. Скрышевський А.Ф. Структурный анализ жидкостей и аморфных тел. – М.: «Высшая школа». – 1980. – 328С.
8. Татарінова Л.І. Структура твердих аморфних и жидких веществ. – М.: «Наука». – 1983. – 151 С.
9. Горбунова Т.В., Баталин Г.И. Два подхода при интерпретации рентгеновских исследований жидкостей. – Кристаллография, 1983, т.26, №1, с.56-61.

## SHAPING OF THE INTERFERENTIAL FUNCTION OF THE AMORPHOUS SUBSTANCES IN THE MEDIUM-RANGE ORDER REGION

V.P. Ivanytskyj, V.I. Sabov

Uzhorod National University, Pidgirna,46, Uzhgorod, 88000  
e-mail: [ivanc@univ.uzhgorod.ua](mailto:ivanc@univ.uzhgorod.ua)

On a model cluster with tetrahedral structure the common regularities of shaping of interferential function (IF) of amorphous substances are explored in the medium-range order region. It is offered to use the IF of the plurality of all atom pairs of two given chemical devices with fixed inter-atomic distance and equal probability orientations in any direction of space as the elementary part of the electron diffraction pattern of the amorphous substances. Is established that the singularities of IF shaping in the region of wave vectors answering medium-range order, differ cardinal from regularities of IF formation in the region of wave vectors answering the short-range order of amorphous substances. Defining influence on IF shaping makes the exterior coordination sphere (CS) of a cluster. With the “growth” of the cluster size all oscillations remain legible, and their amplitude in 3,5-4 times is less than amplitudes of oscillations of IF separate exterior CS. Position of  $s_i$  peaks of IF of clusters with an exactitude 2-3 % submit to the law  $s_i R = b_i$ , where R – radius by last exterior CS of a cluster, and  $b_i$  – a series of constants ( $b_1 = 8,98$ ;  $b_2 = 15,36$ ;  $b_3 = 21,6$ ;  $b_4 = 28,0$ ; ... ). The intensities of the first two peaks of IF are varied considerably by a casual way with cluster growth up to first 15<sup>th</sup> CS. After that the changes of the intensities would became smaller and beginning approximately from 15<sup>th</sup> CS their values becomes stable. The comparison of the received results with experimental data shows, that proceeds from relative intensity on the IF in the medium-range order region the first most intensive oscillation can be displayed only.