

НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК УКРАИНЫ
Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова

ТЕЗИСЫ

II Международной научной конференции
«Наноструктурные материалы – 2010:
Беларусь–Россия–Украина»

НАНО 2010

19–22 октября 2010 г.
Киев, Украина

Влияние структурных параметров неупорядоченной атомной сетки наноматериалов на свойства интерференционных функций в электронографии

М. М. Рябошук¹, В. С. Ковтуненко², Ш. Ш. Демеш¹

¹Ужгородский национальный университет, Ужгород, Украина

²Черкасский технологический университет, Черкассы, Украина
mrwaboshhuk@vandex.ru

В основе теоретической разработки метода функций радиального распределения (ФРР) формально заложен тот принцип, что образование экспериментальной дифракционной картины аморфных веществ обуславливается функцией $\rho(r) - \rho_0$, где $\rho(r)$ – радиальное распределение атомной плотности, а ρ_0 – средняя атомная плотность образца. Недостатком такого подхода является использование для анализа математического объекта $[\rho(r) - \rho_0]$, который не имеет четкого физического смысла. При этом используется множество других приближений и допущений, каждое из которых вносит в конечный результат определенные ошибки. Полученная дифрактограмма аморфных веществ формируется как результат наложения отдельных интерференционных функций от фиксированных межуатомных расстояний неупорядоченной атомной сетки. Поэтому анализ электронограмм желательно также проводить, исходя непосредственно из реальных структурных параметров ближнего порядка атомной сетки, опираясь на физически четко определенную функцию радиального распределения атомной плотности $\rho(r)$. Для этого следует установить различия в закономерностях формирования интерференционных функций координационных сфер для случаев описания атомной сетки функциями $4\pi r^2[\rho(r) - \rho_0]$ та $4\pi r^2\rho(r)$. Подобный анализ проведенный нами методом компьютерного моделирования с использованием общепринятых подходов.

Результаты моделирования показывают, что использование интерференционных функций в ограниченном интервале волновых векторов приводит к существенным неконтролируемым искажениям экспериментальных ФРР, полученных обычным методом превращения Фурье. В результате на функциях $4\pi r^2\rho(r)$ появляются фальшивые черты, не присущие структуре реальных атомных сеток. Одновременно, эффекты обрыва обуславливают и значительные изменения высоты пиков ФРР, влияя, тем самым, на точность определения координации атомов в различных координационных сферах. Основным методом уменьшения таких эффектов является введение в подынтегральное выражение превращения Фурье множителя $\exp(-bs^2)$. Он обеспечивает резкое уменьшение амплитуды осцилляций функции $si_k(s)$ и тем самым нивелирует проявление эффектов обрыва на ФРР. Но такая процедура эквивалентна введению в реальную неупорядоченную атомную сетку дополнительного искусственного разупорядочения. Поэтому полученные скорректированные ФРР опять таки не отвечают параметрам реальной структуры атомной сетки исследуемого аморфного объекта.

Изложенные выше результаты свидетельствуют, что сама процедура интегрального превращения Фурье, используемая в экспериментальном методе ФРРА, вносит в полученные результаты не контролируемые фальшивые вклады. Такие эффекты значительно искажают функцию радиального распределения атомной плотности. Потому, найденные с ее помощью параметры ближнего порядка могут существенно отличаться от характеристик структуры реальной атомной сетки исследуемого материала. Во избежание указанных недостатков метода функций ФРР при экспериментальном исследовании структуры аморфных веществ следует использовать альтернативные методы расчета радиального распределения атомной плотности, в частности, методы максимизации энтропии.