

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ, МОЛОДІ ТА СПОРТУ УКРАЇНИ
ПРИКАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНИКА

Фізико-хімічний інститут

Бердянський державний педагогічний університет

Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу

ДЕРЖАВНЕ АГЕНТСТВО З ПИТАНЬ НАУКИ, ІННОВАЦІЙ ТА
ІНФОРМАЦІЇ УКРАЇНИ

Державний фонд фундаментальних досліджень

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова

Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова

Інститут загальної і неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського

Інститут хімії поверхні ім. О.О.Чуйка

УКРАЇНСЬКЕ ФІЗИЧНЕ ТОВАРИСТВО

АСОЦІАЦІЯ "ВЧЕНІ ПРИКАРПАТТЯ"

ЛЮБЛІНСЬКИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ (ПОЛЬЩА)

УНІВЕРСИТЕТ ГАЗІ (ТУРЕЧЧИНА)

ФІЗИКА І ТЕХНОЛОГІЯ ТОНКИХ ПЛІВОК ТА НАНОСИСТЕМ

Матеріали XIII Міжнародної конференції

МКФТТПН-ХІІІ

Т О М 1

16-21 травня 2011 р.

Івано-Франківськ
Україна

МКФТТПН – XIII – ICPTTEN

Effects of smoothed factor in radial distribution functions method for amorphous films

Borkach E.I., Ryaboschuk M.M.

Uzhgorod national university, Uzhhorod, Ukraine

Radial distribution function (RDF) method requires knowledge of structure factor of amorphous materials within the scattering vector s changes from zero to infinity. Experimentally this condition is almost impossible to provide because the precision diffraction pattern recorded in a limited range of changes from $s \sim 7 \text{ nm}^{-1}$ to $\sim 200 \text{ nm}^{-1}$. Truncating of diffraction pattern intensity for small and for large s leads to the emergence of RDF fake items are called effects of breakage.

At first glance, the effects of breakage can be neglected because the intensity of coherent scattering becomes very small at large s . But the situation is complicated by the fact that the Fourier transform expression is not interference function $i(s)$, but product $si(s)$. For this product oscillations at large s is not reduced and are approximately constant.

The above behavior of the $si(s)$ functions indicate a significant effect of integration limits in Fourier transform on the parameters RDF. The main method of reducing such effects is the introduction of $\exp(-bs^2)$ smoothed parameter in Fourier transform expression. It provides a sharp decrease in the amplitude of oscillations of functions $si(s)$ and thus eliminates signs on truncating effects RDF. But this procedure is equivalent to the introduction in real atomic net additional artificial disordering and therefore received adjusted again do not correspond to real atomic structure of amorphous networks studied object. Moreover, such treatment conducts to two negative consequences:

1. The smoothed factor is entered in the integrand of transformation of Fourier and that is why got RDF is not "clean", as is from mathematical convergence of interference function and this factor.

2. The smoothed factor changes the form of structural factor of amorphous substance substantially, that is why RDF turns out not from real experimental, but from some corrected interference function.

Therefore application of the smoothed factors in the experimental method of ФРФА substantially diminishes authenticity and exactness of quantitative analysis of short order parameters of amorphous materials.