

**ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ /  
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ**

УДК 538.911

*Олександр Дідоборець, Тарас Коба  
(Дніпро, Україна)*

**РОЗРАХУНОК ФУНКЦІЇ ФОРМИ ПРИ МОДЕЛЮВАННІ ПРОЦЕСУ  
КЛАСТЕРИЗАЦІЇ В РОЗПЛАВАХ МЕТАЛІВ**

*Інтерпретація даних дифракційних досліджень на основі кластерної моделі структури рідин потребує виконання комплексу розрахункових завдань, включаючи і використання функції форми. У даній роботі були знайдені безперервні функції форми  $V(x_p)$  структури ОЦК для кластерів у вигляді біпіраміди, яка відповідає найбільшим відношенням об'єму до площі поверхні, тобто є найбільш ймовірною. Визначались середні значення міжатомної відстані, оптимальні розміри кластера, середні відстані між кластерами.*

**Ключові слова:** оптимальний розмір кластера.

*Interpretation of these diffraction researches on the basis of cluster model of structure of liquids requires implementation of complex of calculation tasks, expedient to use the function of form. In this work research the continuous functions of form were found  $V(x_p)$  of structure of VCC for a design the form of cluster was used as bipiramydy, which answers most attitude of volume toward the area of surface, id est is most credible. The mean values of between atomic distance, optimal clustersizes, middle distances, were determined between clusters.*

**Keywords:** optimal clustersize.

Інтерпретація даних дифракційних досліджень на основі кластерної моделі структури рідин потребує виконання комплексу розрахункових завдань – від вибору форми кластера до встановлення зв'язку між параметрами моделі і даними дифракційного аналізу. Відповідні розрахунки відображені у даній роботі для кластерів зі структурами об'ємноцентрованої кубічної (ОЦК) ґратки.

Вибір форми кластеру визначався у відповідності з принципами Кюрі-Вульфа про мінімум поверхневої енергії кристалу, що знаходиться у рівновазі зі своєю рідиною та відповідаючому принципу Браве, згідно з яким кристал обмежується атомними площинами з максимальною густиною атомів.

У ОЦК ґратці такими є атомні площини  $\{\bar{1}\bar{1}0, \bar{1}0\bar{1}, 0\bar{1}\bar{1}, 101, 011, \bar{1}10, 1\bar{1}0, 10\bar{1}, 01\bar{1}, 0\bar{1}1, \bar{1}01\}$  з яких можуть бути побудовані кластери у формі: біпіраміди, призми, трипіраміди. Причому перший із названих відповідає найбільшим відношенням об'єму до площі поверхні, тобто є найбільш ймовірним.

Як відомо, при розгляді дифракції на обмеженому об'єкті у структурному факторі доцільно використовувати функцію форми  $V(x_p)$  [1].

$a(S) = \sum_{-\infty}^{+\infty} V(x_p) \exp(iSx_p)$  де  $x_p$ - радіус-вектор, який з'єднує деякий довільно вибраний центральний атом з Р-им атомом, S- фактор розсіяння. Функція форми

$$V(x_p) = \frac{1}{N} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \sigma(x_m) \sigma(x_{m \pm p})$$

де  $\sigma(x_{m \pm p})$ - функція Евальда;

$$\sigma(x_{m \pm p}) = \begin{cases} 1, & x_{mp} \in V \\ 0, & x_{mp} \notin V \end{cases}, \text{ де}$$

V – об'єм деякої обмеженої області.

Були знайдені безперервні функції форми  $V(x_p)$  структури ОЦК для кластерів у вигляді біпіраміди (Рис.1).

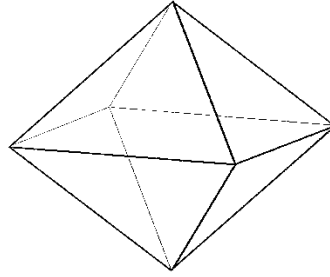


Рис.1.

1. У напрямку нормалі до грані –

$V_1(x) = 1 - \frac{3x}{2L} + \frac{3x^2}{8L^2} + \frac{1x^3}{8L^3}$  (чотири напрямки трансляції), де  $L = \frac{a}{\sqrt{2}}$ , а- велика діагональ біпіраміди.

2. В напрямку діагоналей

$V_2(x) = (1 - x/2L)^3$  (два напрямки трансляції), де  $L = a\sqrt{2}$ .

Для обох випадків  $0 \leq x \leq L$ .

Для них не складає труднощів і знаходження Фур'є-образів, для описання профілей дифракційних піків

$$i(S) = \frac{1}{a} \int_{-L}^L V(x) e^{iS_0 x} dx$$

У яких враховувалась і характерний розмір кластера L по нормалі до сімейства відбиваючих площин, а також, врахована кратність різних трансляцій.

У першому випадку трансляції

$$i_1(S) = \frac{3L}{2d\alpha^4} [(1 - \cos \alpha) + 2\alpha^2 (1 - \frac{1}{4} \cos \alpha) - 2\alpha \sin \alpha]$$

У другому випадку трансляції

$$i_2(S) = \frac{3L}{2d\alpha^4} [2\alpha^2 - (1 - \cos 2\alpha)].$$

Загальна інтенсивність –

$$i(S) = \frac{L}{2d\alpha^4} [6\alpha^2 - \alpha^2 \cos \alpha - 2(\sin \alpha)^2 - 4\alpha \sin \alpha - 2 \cos \alpha + 2]$$

Де  $\alpha = S \cdot L$ , d – міжплощинна відстань.

Програма моделювання здійснювалась за такою схемою:

1. Введення експериментального структурного фактора  $a(S)$ , де S-модуль зміни хвильового вектора при розсіянні. Запропонована процедура демонструється на прикладі дифракційних досліджень  $a(S)$  розплаву рубідія при  $T=513K$  [2].

2. Розрахунок РФРА за профілем дифракційного піку. При цьому використовувався метод аподизації [3], який дозволяє зменшити осцилюючу компоненту, пов'язану з похибкою вимірювань та наявністю верхньої межі величини зміни хвильового вектора.

3. Профіль апроксимувався виразом

$i(S) = \frac{B}{d_{nk1}} \int_0^\infty g(L) dL \int_{-L}^L V\left(\frac{x}{L}\right) \cos Sx dx$  де модельна функція розподілу кластерів по розмірам

$$g(L) = AL^{\frac{3n}{2}} \exp(-\beta L^m)$$

Коефіцієнт A визначається з умови нормування

$$\int_0^\infty g(L) dL = 1$$

$m=2-3$  (найкращій апроксимації відповідає  $m=3$ ,  $n=1$ ).

4. Результатом апроксимації є визначення середньої міжатомної відстані, оптимального розміру кластера, середньої відстані між кластерами.

Розроблена комп'ютерна програма забезпечувала точність апроксимації 0,05%. Для приведенного об'єкту [2] отримано: середня міжатомна відстань – 5,755 Å, оптимальний розмір кластера – 12,756 Å, середня відстань між кластерами – 0,518 Å.

ДЖЕРЕЛА ТА ЛІТЕРАТУРА

1. Гинье А. Рентгенография кристаллов. Теория и практика: монография. М., 1961. 500 с.
2. Waseda Y. and Suzuki K. (1972). Physics state solid. (B). Vol. 49. 643 p.
3. Гуливец Н.И. и др. Функция распределения атомов макроскопически изотропных объектов в дифракционных исследованиях // Письма в ЖТФ. 1997. 23(5). С.21-26.

УДК 538.911

*Олександр Клецьков, Валерія Жидко, Катерина Карук  
(Дніпро, Україна)*

**ВИЗНАЧЕННЯ ПРИРОДИ ЗАБАРВЛЕННЯ КРИСТАЛІВ  $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$   
DETERMINATION NATURE OF COLOURING BY CRYSTALS OF  $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$**

*Визначення природи забарвлення кристалів ортогерманату вісмуту.*

**Ключові слова:** *вісмут, забарвлення, струм.*

*Determination of nature of colouring of crystals of ortho of germanate of Bi.*

**Keywords:** *Bi, colouring, current.*

Кристалічний  $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$  знайшов своє застосування насамперед як сцинтиляційний детектор високо енергетичного випромінювання. У багатьох випадках детектору необхідно працювати не тільки в зоні дії радіаційних потоків, а також у зоні дії електричних полів. Тому визначення природи забарвлення кристалів  $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12} - \text{Mn}$  є актуальною і важливою задачею. Механізм електрохромного ефекту полягає в перезарядці центрів відповідальних за оптичне поглинання.

В данному дослідженні високоякісний монокристал  $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$  був отриманий витягуванням з розплаву по методу Чохральського: у якості початкових компонентів використовувалися оксиди  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  і  $\text{GeO}_2$  промислової марки «ОСЧ» (оксиди прожарювалися до постійної ваги, а потім навішувалися в стехіометричному співвідношенні). Шихта, змочена спиртом, перетиралася в агатових ступках і пресувалася в таблетки. Отриманий зразок мав товщину 0,86 мм та діаметр 5 мм. З одного боку на кристал був нанесений срібний електрод (електрод створювався методом випарюванням у вакуумі на полірований кристал з  $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12} - \text{Mn}$ ), який створює омичний контакт. З іншого боку між кристалом та металевим електродом був шар ортофосфорної кислоти, яка має іонну провідність.

Насамперед були виміряні ВАХ цього кристалу. На рис.1 та рис.2 представлено типові залежності ВАХ в режимі монополярної інжекції дірок та електронів, що дозволяє вибрати режими для спостереження електрохромного ефекту.

Щоб переконатися у тому, що контакти з срібла здатні інжектувати як електрони, так і дірки, були досліджені струми монополярної інжекції кристалів  $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ . ВАХ для електронів і дірок відрізняються наявністю на кривих для дірок сублінійних ділянок в середній частині характеристики.