

**Семенюк Тетяна Анатоліївна,  
Іщук Іванна Миколаївна,  
Рубчинська Марта Леонідівна**  
студентки фізичного факультету,  
**Кевшин Андрій Григорович,**  
доцент кафедри загальної фізики  
та методики викладання фізики  
СНУ імені Лесі Українки

## СТАТИСТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ ХАЛЬКОГЕНІДНИХ СТЕКОЛ

В статті розглянуто ряд статистичних функцій розподілу, за допомогою яких характеризується структура халькогенідних стекол. Встановлено, що основні уявлення про сітку хімічних зв'язків досліджуваних матеріалів можна одержати шляхом введення уявлення про «статистику кілець», що використовується для побудови структурних моделей у вигляді конструкцій з сотень і тисяч атомів.

**Ключові слова:** склоподібний сплав, функція радіального розподілу, середні міжатомні відстані, статистичне моделювання.

**Semenyuk T. A., Ishchuk I. M., Rubchunskaya M. L., Kevshyn A.G.** Statistical modeling of structure of chalcogenide glasses.

The paper considers a number of statistical distribution functions that characterize the structure of chalcogenide glasses. It was established that the basic idea about the net of chemical bonds of the investigated materials can be obtained by introducing the concept of «ring statistics» used to build structural models in the form of structures with hundreds or thousands of atoms.

**Keywords:** glassy alloy; radial distribution function; average interatomic distances, statistical modeling.

Структура та компонентний склад склоподібних напівпровідників (ХСН) є головними факторами, які визначають весь комплекс властивостей стекол. Параметри, які характеризують структуру аморфних твердих тіл, як правило, визначають на підставі результатів Фур'є перетворень даних рентгенівської, електронної і нейтронної дифракції. Ці методи дають змогу отримати функцію радіального розподілу (ФРР) атомної густини  $W(r)$ , яка визначає середню густину атомів залежно від відстані до будь-якого атома, взятого за початок відліку і вказує на ймовірність положення атома того чи іншого сорту, що знаходяться на відстані  $r$  від даного [1]. Ця функція, сферично-симетрична і залежить тільки від відстані. Інтегруючи  $W(r)$  в деякому сферичному шарі від  $r$  до  $r+\Delta r$  можна знаходити число атомів в такому шарі. Для аналізу структури аморфних і кристалічних твердих тіл та

побудови відповідних структурних моделей сьогодні широко використовують комп'ютерне моделювання [2].

Нехай  $dn_{A-B}(r)$  число атомів типу «B», що розміщені всередині тонкого сферичного шару  $r, r+dr$  навколо атома типу «A». Поділивши це число на об'єм сферичного шару і усереднивши результат по атомах типу «A», одержимо значення в точці  $r$  функції радіального розподілу  $g_{A-B}(r)$  атомів типу «B» навколо атомів типу «A»:

$$g_{A-B}(r) = \langle dn_{A-B}(r) / (4\pi r^2 dr) \rangle \quad (1)$$

Число таких функцій залежить від хімічного складу скла. Для одноатомного скла достатньо однієї функції  $g_{A-A}(r)$ . Для двохатомного необхідно чотири ФРР –  $g_{A-A}(r), g_{A-B}(r), g_{B-A}(r), g_{B-B}(r)$ . Ці функції мають фізичний зміст густини атомів. При  $r \rightarrow \infty$  функції  $g_{A-A}(r)$  і  $g_{B-A}(r)$  прямують до густини числа атомів  $A$ , функції  $g_{B-B}(r)$  і  $g_{A-B}(r)$  прямують до густини числа атомів  $B$ .

Для характеристики структури скла крім ФРР використовують функції розподілу, які є узагальненням поняття «координаційне число». Ці функції визначаються співвідношенням:

$$n_{A-B}(r) = 4\pi \int_0^r g_{A-B}(\rho) \rho^2 d\rho \quad (2)$$

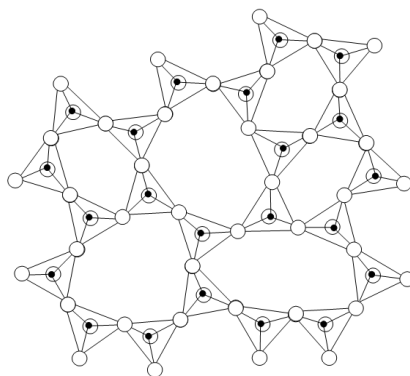
Вони мають фізичний зміст числа атомів типу  $B$ , розміщених всередині сфери радіуса  $r$  навколо атома типу  $A$ .

Крім функцій, що описують парні кореляції розміщення атомів, застосовують функції, що характеризують взаємне розміщення трьох атомів. Такі функції використовують при характеристичній структурі моделей і порівняно просто для моделей обчислюються.

Важливість уявлення про сітку хімічних зв'язків фахівцями по склу усвідомлювалася давно. Головна проблема полягає в тому, як цій концепції надати математичну форму і як її використовувати для побудови структурних моделей у вигляді конструкцій з сотень і тисяч атомів.

Корисний крок у цьому напрямку був зроблений шляхом введення уявлення про «статистику кілець». Під «кільцем» розуміють безперервний замкнутий шлях по окремих зв'язках, кожен з яких з'єднує пару атомів і представляє окрему «ланку» цього шляху (рис. 1).

Число ланок у кільці і є його характеристикою. Особливість цієї характеристики полягає в тому, що вона не змінюється а ні при варіаціях довжин зв'язків, ні при варіаціях кутів між зв'язками, ні при будь-яких інших вигинах сітки. Це топологічний параметр, що дозволяє кількісно порівнювати сітку хімічних зв'язків в кристалах і стеклах.



**Рис. 1.** Схематичне зображення кільць в структурі скла [3].

При практичній реалізації аналізу кільць у сітці зв'язків стекол або аморфних матеріалів виникає проблема вибору кільць. Найчастіше використовується підхід, при якому серед усіх кільць, що проходять через конкретний атом, враховуються тільки кільця з найменшим числом ланок. Результати аналізу представляють у вигляді гістограми, на якій представляють число кільць з різним числом ланок, що припадають на один атом (в одноатомних матеріалах германії і кремнії).

Найбільш важливий висновок з аналізу статистики кільць для моделювання полягає в тому, що в стеклах і аморфних матеріалах, на відміну від кристалів, зустрічаються кільця з числом ланок 5 і 7 [4].

Таким чином, структура скла описується за допомогою ряду статистичних функцій розподілу, основні з яких були вказані. Але для розрахунку оптичних спектрів цих усереднених характеристик недостатньо. В таких розрахунках необхідно використовувати координати атомів, хоча б для невеликої області скла.

Структурною моделлю називають конкретну реалізацію структури області скла у вигляді значень координат складових її атомів (зазвичай,  $10^2$ -  $10^3$ ). Модель повинна виникати автоматично у ході виконання обчислювального алгоритму, виключно на основі врахування взаємодії складових її атомів.

Алгоритм побудови статистичних структурних моделей зазвичай складається з двох етапів: формування вихідної конфігурації і релаксація конфігурації.

Виконанню першого етапу найчастіше не приділяється великої уваги. Вважається, що вихідна конфігурація може бути будь-якою. Врахування взаємодії і релаксація повинні організувати структуру необхідним чином. Наприклад, у випадку моделювання атомної структури скла в якості вихідного розташування атомів використовується випадковий розподіл точок в кубі. Така конфігурація фізично не природна.

Другий етап є основним. На цьому етапі використовуються наступні найважливіші методи релаксації: метод Монте-Карло і метод молекулярної динаміки.

### **Список використаних джерел**

1. Скрышевский А. Ф. Структурный анализ жидкостей и аморфных тел : учеб. пособие для студентов вузов / А. Ф. Скрышевский. – М. : Высш. шк., 1980. – 328 с.
2. Roux S. Le. ISAACS – interactive structure analysis of amorphous and crystalline systems / S. Le Roux and V. Petkov // J. Appl. Cryst. – 2010. – Vol. 43. – P. 181-185.
3. Фельц А. Аморфные и стеклообразные неорганические твердые тела / Фельц А. – М. : Мир, 1986. – 556 с.
4. Либау Ф. Структурная химия силикатов / Ф. Либау. – М. : Мир, 1988. – 410 с.

