

Министерство образования Российской Федерации

Московский энергетический институт
(Технический университет)

В.А. Воронцов, Н.Д. Васильева

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ БЛИЖНЕГО
ПОРЯДКА В РАСПОЛОЖЕНИИ АТОМОВ
АМОΡФНЫХ ВЕЩЕСТВ ПО ДАННЫМ
ЭЛЕКТРОНОГРАФИЧЕСКИХ
ИССЛЕДОВАНИЙ**

Методическое пособие по курсу
«Физика и технология некристаллических полупроводников»
для студентов, обучающихся по направлениям «Электроника и микроэлек-
троника», «Электротехника, электромеханика и электротехнологии»,

УДК
539
В-191
УДК: 539.27(076.5)

*Утверждено учебным управлением МЭИ
Подготовлено на кафедре Физики электротехнических материалов и компонентов и автоматизации электротехнологических комплексов*

Рецензент: д-р. техн. наук, проф. В.Я. Беспалов

ВОРОНЦОВ В.А., ВАСИЛЬЕВА Н.Д.
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА В
РАСПОЛОЖЕНИИ АТОМОВ АМОРФНЫХ ВЕЩЕСТВ ПО ДАННЫМ
ЭЛЕКТРОНОГРАФИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ: Методическое пособие
по курсу «Физика и технология некристаллических полупроводников». –
М.: Издательство МЭИ, 2002. – 16с.

Описана методика обработки экспериментальных данных микроди-
фракции электронов в аморфных веществах и отыскания параметров
ближнего порядка в расположении атомов данных веществ.

Учебное издание

Воронцов Владимир Анатольевич
Васильева Наталия Дмитриевна

Определение параметров ближнего порядка в расположении атомов
аморфных веществ по данным электронографических исследований

Методическое пособие по курсу
«Физика и технология некристаллических полупроводников»
для студентов, обучающихся по направлениям «Электроника и микроэлек-
троника», «Электротехника, электромеханика и электротехнологии»,

ЛР № 020528 от 05.06.97
Редактор издательства Н.Л. Черныш

Темплан издания МЭИ 2002(II) метод. Подписано к печати 24.12.2002
Формат 60x84/16. Печ. л. 1,0. Тираж 50. Изд № 106

Издательство МЭИ, 111250, Москва, Красноказарменная, д. 14

© Московский энергетический институт, 2002.

Введение

Твердые аморфные и жидкие вещества по своему строению представляют собой неупорядоченные системы, в которых отсутствует дальний порядок и трехмерная периодичность. Однако в них существует ближний порядок, при котором расположение атомов вокруг любого из атомов системы можно охарактеризовать функцией радиального распределения атомов ФРРА(r). Эта функция, имеющая статистический характер, обозначает вероятность встречи с атомом того или иного сорта, находящимся на расстоянии r от отсчетного.

Функция ФРРА(r) сферически-симметрична, с ее помощью можно найти величины расстояний r , но не их направление; ФРРА(r) имеет несколько максимумов, по большей части два-три, которые соответствуют первым, вторым, третьим ближайшим соседям. Максимумы функции ФРРА(r) размыты, что свидетельствует о некотором наборе расстояний r около наиболее вероятного расстояния, отвечающего этой функции. При некотором $r=r_{max}$ функция ФРРА(r) максимумов уже не имеет.

Параметрами, характеризующими ближний порядок, являются величины ближайших расстояний — первых, вторых, третьих, определяющих координационные сферы, — и число атомов вокруг атома, выбранного за начальный, в первой, второй, третьей координационных сферах, т.е. координационное число (КЧ). В любой точке аморфного или жидкого вещества этот порядок сохраняется на протяжении до десяти или немного больше ангстрем от отсчетного атома. За этими расстояниями все другие расстояния равновероятны и распределение атомов определяется средней атомной плотностью, иными словами, числом атомов в единице объема.

Проводя Фурье-анализ кривой экспериментальной интенсивности одним из методов дифракции — рентгенографическим, электронографическим, нейтронографическим, можно найти функцию ФРРА(r) без каких-либо предварительных предположений о строении вещества.

Выявление ближнего порядка и является целью исследования структуры аморфных и жидких веществ. Особый интерес представляет сопоставление данных для одного и того же вещества в трех состояниях — твердом кристаллическом, твердом аморфном и жидком. Этот интерес вызван необходимостью создания моделей структуры и теории аморфного и жидкого состояний вещества.

Твердые аморфные и жидкие вещества сходны по наличию в них и других ближнего порядка и отсутствию дальнего. Тем не менее твердые аморфные вещества резко отличаются от жидких тем, что в них атомы в основном остаются на одних и тех же местах (если отвлечься от теплового движения вблизи некоторых положений равновесия) в то время как в жидком они перемещаются, изменяя свое положение и меняясь местами с другими атомами. Эти перемещения несколько меняют конкретный ближний порядок, но статистически, по всем возможным конфигурациям, он в среднем сохраняется, если неизменны термодинамические условия существования жидкости: температура и давление. При изменении этих внешних условий, при повышении или понижении температуры и давления ближний порядок может измениться.

Сопоставление параметров ближнего порядка для элементов и соединений, накопление данных по структуре аморфных и жидких веществ являются необходимой стадией для выявления структурных закономерностей, классификации элементов по параметрам упорядоченности, установления зависимости физиче-

ских свойств от структуры и построения теории аморфного и жидкого состояний.

Основной вопрос, на который следует обратить внимание, — это получение экспериментальной кривой интенсивности по возможности с малыми погрешностями. Если это удастся, все остальные ошибки, вводимые при учете фона некогерентного рассеивания, нормировании экспериментальной кривой интенсивности, обрыве ряда, нахождении площади под максимумами ФРРА, как правило, оказываются незначительными.

Поскольку интерес к исследованию стеклообразных веществ заметно вырос в связи с их возможным использованием, в частности в микроэлектронике и оптике, необходимо накапливать результаты и расширять круг исследуемых веществ, совершенствуя методику.

Три метода исследования — рентгеновский, электронографический, нейтронографический — взаимно дополняют друг друга. Основное различие этих методов состоит в том, что рентгеновские лучи рассеиваются электронной оболочкой атома; электроны же рассеиваются суммарным потенциалом атома, т.е. в рассеивании участвуют и электронная оболочка атома, и ядро; нейтроны рассеиваются ядрами атомов. Наиболее развит и наиболее широко употребляется для изучения жидкого состояния веществ метод дифракции рентгеновских лучей. Однако его применение сопряжено со значительными экспериментальными трудностями, связанными, в основном, с большими временами экспозиции, иногда достигающими нескольких дней. Такое затруднение отпадает в электронографии, где экспозиции измеряются секундами, и, кроме того, количество исследуемого материала может быть весьма малым. Нейтронография, по сравнению с рентгеновским и электронографическим методами, выигрывает в том, что факторы рассеивания для нейтронов изотропны, т.е. отсутствует угловая зависимость атомных факторов рассеивания нейтронов. Недостатком методов электронографии и нейтронографии является трудность учета фона.

В данной работе основное внимание уделено наиболее «быстрому», из упомянутых методов исследований, — электронографии.

Образование электронограммы. Рассеивание электронов веществом

При прохождении электронов через вещество в электронном микроскопе некоторые из них отклоняются от направления главного луча или рассеиваются в различных направлениях и под разными углами. Чем плотнее вещество образца и больше его толщина, тем большая часть электронов отклоняется на большие углы рассеивания. Это схематически проиллюстрировано на рис.1 на примере аморфных образцов различной плотности и толщины. На этом же рисунке схематически изображены электронограммы, которые будут получены на экране для наблюдения. Таким образом, даже в случае аморфных веществ электронограммы зависят от характера образца. Однако такие электронограммы размыты и содержат мало информации, которую можно было бы проанализировать количественно.

На электронограмме, полученной от кристаллического образца, наблюдаются рефлексы, имеющие форму концентрических окружностей, если образец поликристаллический, или регулярно расположенных дифракционных пятен, если образец является монокристаллом или содержит только

несколько маленьких кристаллов. Эти дифракционные максимумы возникают на фоне диффузного рассеивания вблизи центрального пятна в результате того, что при прохождении электронов через кристаллический образец электронные «волны», рассеянные параллельными плоскостями решетки определенной ориентации, оказываются «в фазе» и взаимодействуют, усиливая друг друга. Электронные «волны», рассеянные плоскостями решетки любой другой ориентации, оказываются «не в фазе» и при взаимодействии ослабляют друг друга. От этих рассеянных электронов никаких дифракционных максимумов не образуется. На рис.2 схематически изображены результирующее распределение интенсивности, а также электронограммы с дискретными максимумами интенсивности в виде пятен или колец, наложенных на диффузный фон рассеивания.

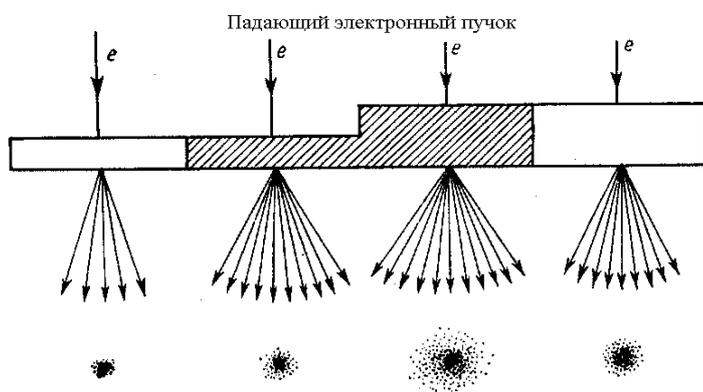


Рис.1. Схематическое изображение рассеивания электронов и конечных дифракционных изображений от аморфных образцов переменной плотности и толщины (штриховкой обозначена большая плотность).

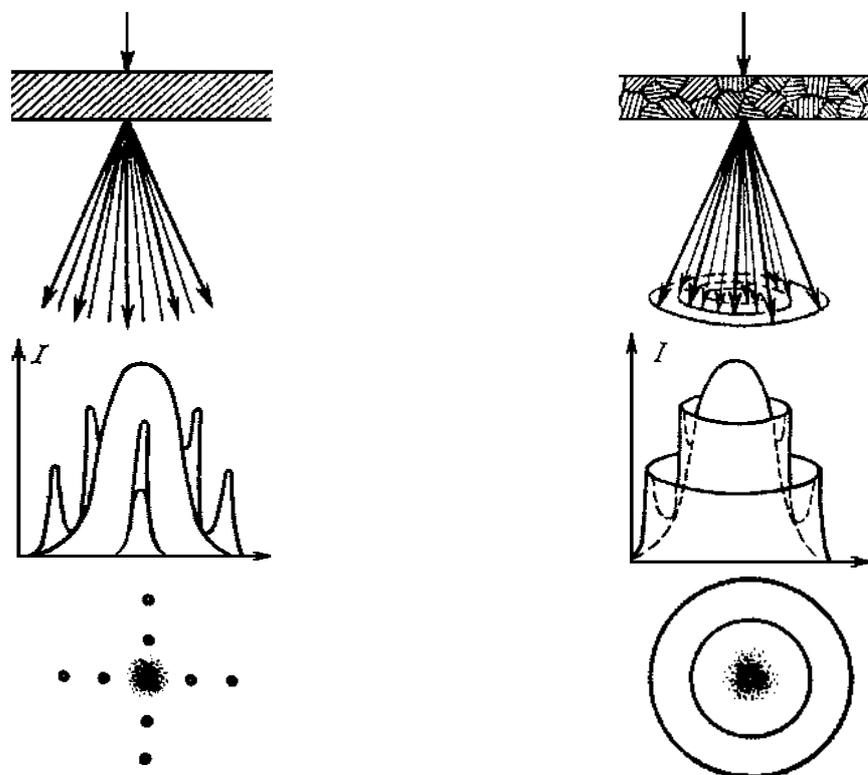


Рис.2. Схематическое изображение рассеивания электронов, распределения интенсивности и конечных дифракционных изображений от монокристалла и поликристаллического образца

Ориентация серий плоскостей решетки с межплоскостным расстоянием d , при которой будет происходить дифракция электронов с образованием дискретного дифракционного рефлекса в виде пятна или кольца, определяется известным законом Брэгга

$$\lambda = 2d \cdot \sin\theta_i, \quad (1)$$

где d - межплоскостное расстояние; θ_i - угол между направлением электронного луча и атомной плоскостью; λ - длина волны падающих электронов.

Длина волны падающих электронов зависит от ускоряющего напряжения электронного микроскопа и определяется по следующей формуле:

$$\lambda = \frac{12,26}{\sqrt{U \cdot (1 + 0,9788 \cdot 10^{-6} \cdot U)}}, \quad (2)$$

где U - ускоряющее напряжение (В).

Дискретные дифракционные пятна или кольца образуются только в том случае, если падающие электроны рассеиваются атомными плоскостями, расположенными по отношению к падающему лучу под углом θ , удовлетворяющем закону Брэгга (рис.3). Если закон Брэгга не выполняется, то рассеянные электронные волны при взаимодействии будут ослаблять друг друга и на электронограмме вокруг центрального пятна появится только фон слабого диффузного рассеивания. Но в действительности среди многочисленных серий плоскостей в кристалле всегда найдется несколько плоскостей, расположенных под углом Брэгга по отношению к падающему лучу. Следовательно, в электронограмме от кристаллического образца всегда будут иметься дискретные рефлексы. Общий термин «рефлекс» часто используется для обозначения как дифракционных пятен, так и дифракционных колец в том случае, когда их можно рассматривать просто с точки зрения возникновения в результате отражения электронного луча от каждой серии плоскостей решетки, расположенных в кристаллическом образце под углом Брэгга.

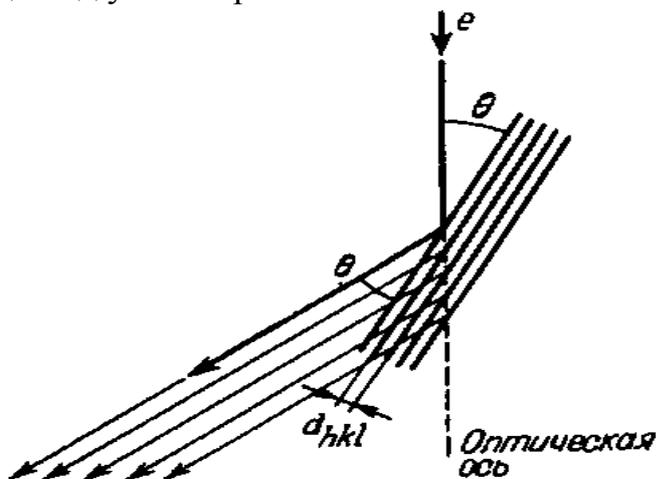


Рис.3. Рассеивание электронов от последовательности параллельных плоскостей решетки с межплоскостными расстояниями d_{hkl} , расположенными по отношению к падающему электронному лучу под углом θ .

Регистрация электронограммы

Электронограмма фотографируется на фотопластинку или фотопленку тем же способом, что и обычное изображение, с использованием такой же эмульсии. Однако следует учесть некоторую специфику. В режиме изображения электронный пучок распределяется по всей площади фотопластинки, в то время как в режиме дифракции он сконцентрирован в центральном пятне электронограммы. Поэтому центральное пятно очень яркое, часто гораздо более интенсивное, чем другие дифракционные пятна или кольца. Для того чтобы центральное пятно не засвечивало прилежащую область фотопластинки, во время экспозиции обычно используется специальная заслонка, которая перекрывает центральный пучок. Она вводится перед началом экспозиции и убирается незадолго до ее конца, в результате чего обеспечивается точная фиксация местоположения центрального пятна.

При исследовании аморфных материалов снимается серия снимков с кратными экспозициями 2, 4, 8, 16 и 32 секунды. Также в том же режиме работы электронного микроскопа снимается электронограмма от стандартного вещества (MgO), с помощью которой определяется масштаб по оси S электронограмм для исследуемого вещества:

$$S = \frac{4\pi \sin\theta_i}{\lambda}, \quad (3)$$

где θ_i - угол рассеивания; λ - длина волны направленного излучения (длина волны электронов).

В формуле (3) неизвестным является $\sin\theta_i$, который найдем, используя закон Вульфа-Брегга (1):

$$S = \frac{4\pi}{\lambda} \cdot \frac{\lambda}{2d} = \frac{2\pi}{d}, \quad (4)$$

где d - межплоскостное расстояние.

Межплоскостные расстояния и интенсивности соответствующих рефлексов эталонного вещества приведены в табл. 1.

Таблица 1

Соответствие основных межплоскостных расстояний и интенсивностей рефлексов на электронограмме поликристаллического MgO

$d, \text{Å}$	2,41	2,10	1,485	1,266	1,213	1,050	0,963
$I, \text{отн.ед.}$	6	100	75	6	15	4	1

Используя данные из табл. 1 рассчитывается масштаб электронограмм по оси S . Проверкой правильности выбора - является совпадение значений рассчитанного масштаба для различных рефлексов.

После определения масштаба производится измерение микрофотограмм исследуемого вещества с рассчитанным шагом по оси S . При этом

нужно стремиться охватывать как можно больший интервал по оси S , чтобы уменьшить ошибку, вызванную обрывом ряда.

Оценка интенсивности дифракционных картин, полученных на электронном микроскопе, проводится фотографическим методом, который основан на фотометрическом измерении почернения D фотопластины.

Величины D связаны с энергией электронного пучка $E=f(It)$ следующим образом:

$$D=f(It), \quad (5)$$

где I - интенсивность пучка; t - время его действия (экспозиция).

При микрофотометрических измерениях D определяют как логарифм отношения интенсивности светового пучка i_o , упавшего на данный участок электронограммы, к интенсивности прошедшего светового пучка i :

$$D=\log(i_o/i). \quad (6)$$

Получаемые зависимости $D=f(S)$ схематически представлены на рис.4(а). Значения почернений D для различных времен экспозиций заносим в соответствующие столбцы табл. 2.

Таблица 2

Расчет нормированной интенсивности рассеивания электронов

$S, \text{ \AA}^{-1}$	$D, \text{ отн. ед.}$					$t=2''$		$t=4''$		$t=8''$		$t=16''$		$t=32''$		$I_0^p, \text{ отн. ед.}$	f^2	$\frac{I_0}{f^2}$	$\frac{I_c}{f^2}$	i_l	I_H
	2	4	8	16	32	t	$1/1_0$	t	$1/1_0$	t	$1/1_0$	t	$1/1_0$	t	$1/1_0$						
0,2																					
0,4																					
0,6																					
...																					
6,8																					
7,0																					

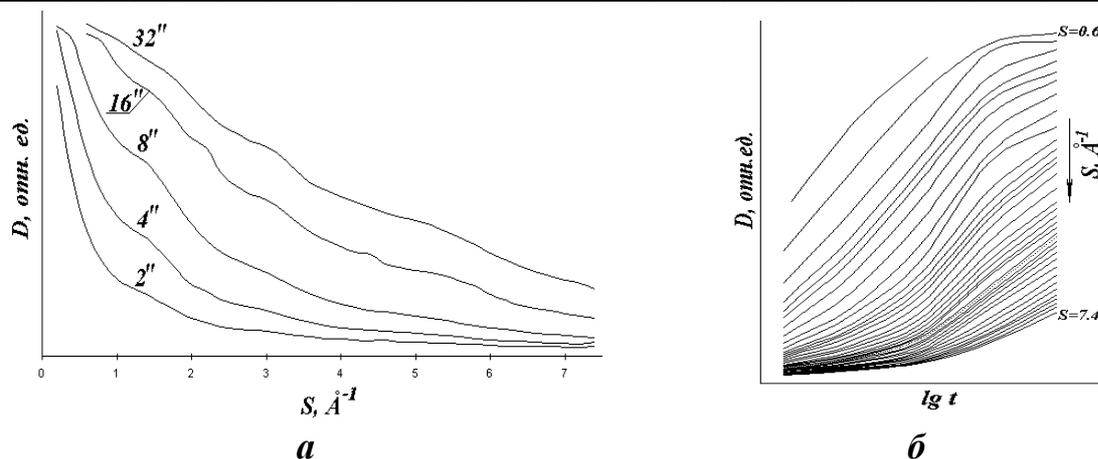


Рис.4. Кривые почернения фотопластинок в различных масштабах.

Методика обработки электронограмм

В определенном интервале значений энергий электронного пучка соотношение (5) хорошо аппроксимируется логарифмической функцией

$$D=k \log(It). \quad (7)$$

Целью анализа электронограмм, полученных от аморфных материалов, является отыскание угловой зависимости интенсивности рассеивания электронов $I(S)$. Для перехода от почернений фотопластин к интенсивности рассеивания электронов веществом используется закон взаимозаменяемости, который предполагает подобие кривых почернения в функции от экспозиции t или $\lg t$ при постоянной интенсивности I , и кривых почернения в функции от I или $\lg I$ при постоянной t . В рассматриваемой области почернений верен логарифмический закон:

$$D = \log(It). \quad (7')$$

Из этого закона следует, что для двух участков образца, имеющих одинаковые почернения, будут выполняться следующие соотношения:

$$\frac{I_1}{I_0} = \frac{t_0}{t_1}. \quad (8)$$

Для использования выражений (7) и (8) полученные зависимости $D=f(S)$ перестраиваются в другом масштабе: кривые почернения (ось ординат) от времени t в логарифмическом масштабе (ось абсцисс) при разных значениях волнового вектора S ($D=f[\lg(t)]$) (см. рис.4 б). Из полученной серии кривых почернения выбирают характеристическую кривую. Она выбирается так, чтобы при параллельном смещении относительно оси абсцисс экспериментальные точки других кривых почернения укладывались бы на неё наилучшим образом. Концы характеристической кривой достраиваются для расширения пределов измерения (рис.5 а).

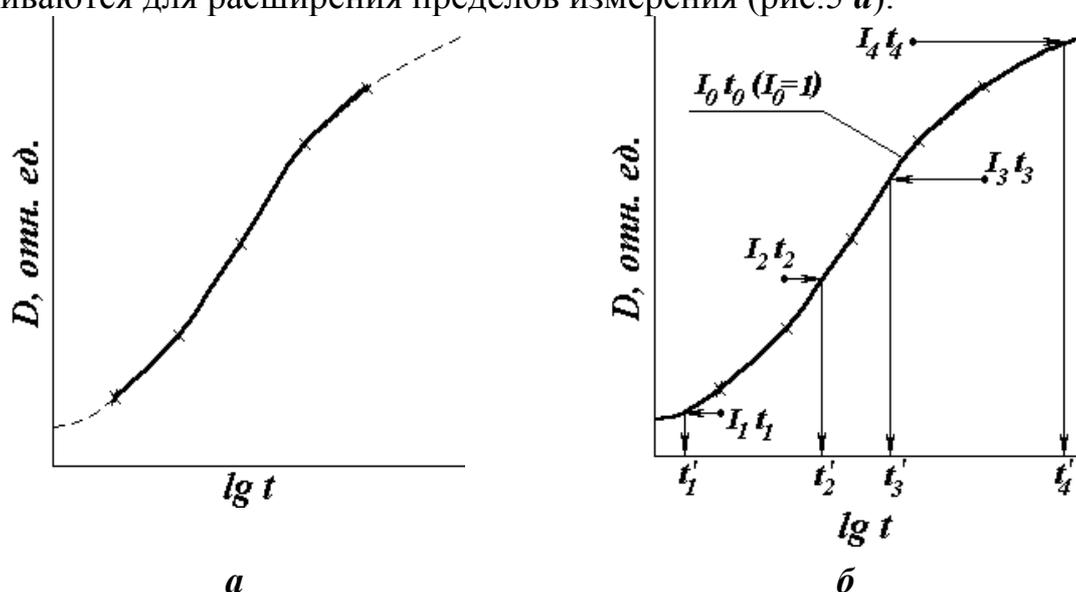


Рис.5. Характеристическая кривая

Пользуясь соотношением (8) производим следующие операции. Каждую экспериментальную точку кривой почернения (для каждой экспозиции при фиксированном значении S) переносим на характеристическую кривую параллельным сдвигом относительно оси абсцисс и записываем в таблицу соответствующее значение экспозиции. Для каждой экспозиции получим интенсивность рассеивания в относительных единицах (рис.5 б).

Подсчитав среднее арифметическое значение экспериментальной интенсивности рассеивания электронов для каждого значения S в относительных единицах I_s^{cp} заносим в таблицу (рис.6 а).

При расчете I_s^{cp} на начальном участке рассчитывается только из близких по величине I (сильно отличающиеся не учитываются). Проверкой правильности расчета является плавный график этой функции. Ложные максимумы или минимумы указывают на возможную ошибку в расчетах.

Чтобы нормировать функцию $I_s^{cp}(S)$, значения функции делятся на соответствующее значение суммарного атомного фактора рассеивания электронов $\Sigma f_m(S)$. Далее строится график функции $I_s^{cp}(S)/\Sigma f_m(S)$; вид графика показан на рис.6 б.

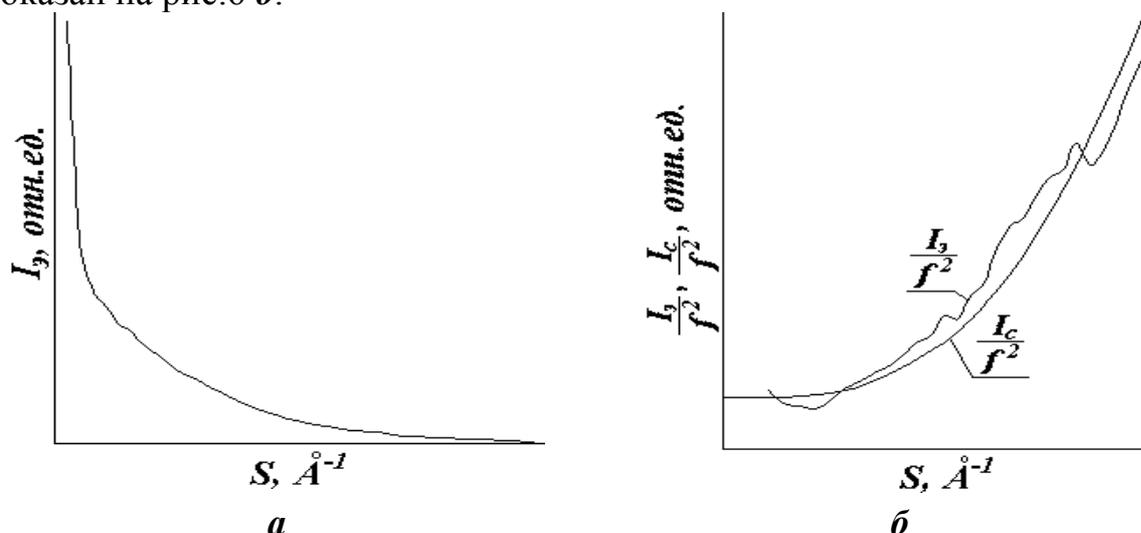


Рис.6. Экспериментальная интенсивность рассеивания электронов

Параллельно с нормировкой производится учет фона. Фон на электронограмме складывается из некогерентного рассеивания на остаточном газе в приборе и на краях диафрагм, многократного рассеивания в препарате. Неправильный учет фона ведет к недостаточно точной кривой экспериментальной интенсивности, а это приводит к появлению ложных пиков и отрицательных участков в функции радиального распределения атомов (ФРРА). Этот этап является наиболее важным в расчете ФРРА.

Экспериментальная интенсивность $I_s(S)$ представляет сумму когерентной части $I(S)$ и интенсивности фона $\phi(S)$:

$$I_s(S) = I(S) + \phi(S). \quad (9)$$

Интенсивность когерентного рассеивания нормируется с помощью формулы:

$$\frac{1}{j} \int I(S) S^2 dS = \int f^2(S) S^2 dS, \quad (10)$$

где j - нормирующий множитель, f - атомный фактор рассеивания электронов атомами вещества.

Тогда интенсивность будет выражаться в тех же единицах, что и величина f^2 . Подставляя в (10) $I(S)$ из (9), получим:

$$\int I_3(S)S^2 dS = \int I_c(S)S^2 dS, \quad (11)$$

$$I_c(S) = \varphi(S) + jf^2(S), \quad (12)$$

где $I_c(S)$ - средняя интенсивность рассеивания электронов на такой же системе из независимых атомов.

Учитывая (9) и то, что нормированная интенсивность рассеивания электронов равна $I_n(S) = \frac{1}{j} I(S)$, получим

$$i(S) = \frac{I_n(S) - f^2(S)}{f^2(S)} = \frac{1}{j} \left[\frac{I_3(S)}{f^2(S)} - \frac{I_c(S)}{f^2(S)} \right] = \frac{1}{j} i_1(S). \quad (13)$$

Интенсивность некогерентного рассеивания изменяется плавно от S . Также плавно изменяется и интенсивность фона.

Из (11) следует, что кривая $I_3(S)$ должна осциллировать вокруг неизвестной плавной функции $I_c(S)$. Следовательно, кривая $\frac{I_3(S)}{f^2}$ также будет осциллировать вокруг плавной кривой $\frac{I_c(S)}{f^2}$. Функция $i_1(S)$ полностью воспроизведет эту осцилляцию.

Известно, что $i(S)$ осциллирует относительно оси S так, что практически выполняется условие

$$\int i(S) dS = 0. \quad (14)$$

Но вычисление функции $i_1(S)$ требует знания слагаемого $\frac{I_c(S)}{f^2}$. Кривую $\frac{I_c(S)}{f^2}$ проводим так, чтобы удовлетворить условие (14) или в когерентном случае

$$\int i_1(S) dS = 0. \quad (14')$$

Таким образом, кривая $\frac{I_c(S)}{f^2}$ является средней относительно кривой $\frac{I_3(S)}{f^2}$.

Нормированную интенсивность определяем, пользуясь формулой (13):

$$I_n(S) = f^2(S) \left[\frac{1}{j} i_1(S) + 1 \right], \quad (15)$$

аналогично нормированное значение интенсивности фона

$$\varphi_n(S) = \frac{1}{j} \varphi(S) = f^2(S) \left[\frac{1}{j} \cdot \frac{I_c(S)}{f^2(S)} - 1 \right]. \quad (16)$$

В формулу (15) входит член $i(S) = \frac{1}{j} i_l(S)$, где неизвестным оказывается нормирующий множитель j . Из формулы (12) видно, что $I_n(S) > 0$, так как интенсивность всегда величина положительная, т.е.

$$j > -i_l(S) \text{ или } -j < i_l(S).$$

Это означает, что интерференционная функция $i_l(S)$ проходит выше прямой ($-j$) при всех значениях S . Для нижнего предела величины j получаем величину самого глубокого максимума на кривой $i_l(S)$, т.е.

$$j_{\min} > \text{MAX} \left\{ \frac{I_c(S)}{f^2(S)} - \frac{I_3(S)}{f^2(S)} \right\}. \quad (17)$$

Интенсивность фона для всех S - величина положительная $\varphi_n(S) > 0$ и $j < \frac{I_c(S)}{f^2}$. Отсюда получаем верхний предел j :

$$j_{\max} < \text{MIN} \left\{ \frac{I_c(S)}{f^2(S)} \right\}. \quad (18)$$

Имея верхний и нижний предел j , находим их среднее арифметическое:

$$j_{cp} = \frac{j_{\max} + j_{\min}}{2} = \frac{1}{2} \left[\text{MAX} \left\{ \frac{I_c(S)}{f^2(S)} - \frac{I_3(S)}{f^2(S)} \right\} + \text{MIN} \left\{ \frac{I_c(S)}{f^2(S)} \right\} \right]. \quad (19)$$

Итак, применяя данную методику учета фона и нормировки к расчету, вычисляем значение функции $\frac{I_3(S)}{f^2}$. Результаты расчета заносятся в табл.2. На графике $\frac{I_3(S)}{f^2}$ проводится плавная кривая $\frac{I_c(S)}{f^2}$ так, чтобы удовлетворить условие (14):

$$\int \frac{I_3(S)}{f^2(S)} dS = \int \frac{I_c(S)}{f^2(S)} dS. \quad (20)$$

Значение $\frac{I_c(S)}{f^2}$, определяется по графику, заносятся в табл.2. Затем вычисляются значения функции $i_l(S)$ по формуле :

$$i_l(S) = \frac{I_3(S)}{f^2(S)} - \frac{I_c(S)}{f^2(S)}. \quad (21)$$

Далее определяется значение нормирующего множителя j : j_{\min} находится из графика функции $i_l(S)$ (рис.7 а), а j_{\max} из графика $\frac{I_c(S)}{f^2}$ (рис.7 б).

Искомое значение j находим как среднее арифметическое от j_{\min} и j_{\max} .

Функция радиального распределения атомов находится по формуле:

$$\Phi PPA(r) = 4\pi r^2 \rho(r) = 4\pi r^2 \rho_0 + \frac{2r}{\pi} \int_{S_1}^{S_2} S \cdot i(S) \cdot \sin(Sr) dS. \quad (22)$$

Пределы интегрирования S_1 и S_2 определяются функцией $i(S)$.

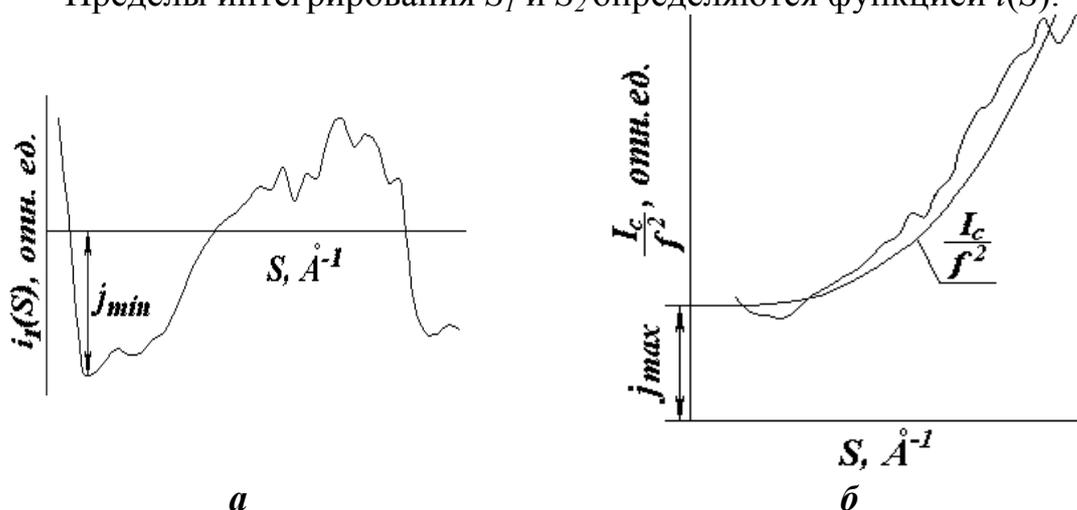


Рис.7. Определение нормирующего множителя.

Функция радиального распределения атомов

В случае элементарных некристаллических материалов или материалов стехиометрического состава ФРРА позволяет определить параметры ближнего порядка (число ближайших соседей, длину связи, значение валентного угла и его отклонения) и воссоздать строение структурных единиц материала. ФРРА представляется в виде набора пиков с максимумами при определенных значениях r , которые дают среднее расстояние между соседними атомами. Ширина пиков после поправки на тепловое уширение описывает радиальные флуктуации соответствующих межатомных расстояний, а площадь под каждым пиком равна количеству атомов содержащихся в соответствующей координационной сфере (рис.8).

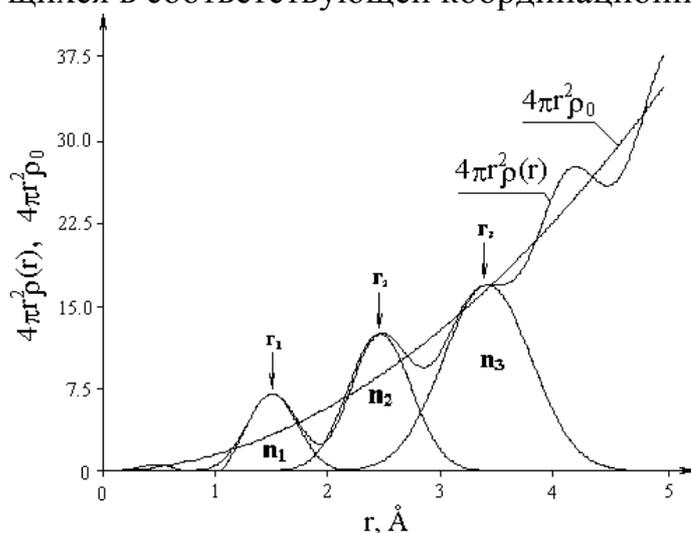


Рис.8. Функция радиального распределения атомов и параметры ближнего порядка, определяемые из нее.

Для определения параметров ближнего порядка следует описать каждый пик экспериментальной ФРРА кривой Гаусса:

$$f_{\text{норм}} = \frac{N_j}{2\pi\sigma_j} \cdot \exp\left[-\frac{(x-r_j)^2}{2\sigma_j^2}\right], \quad (24)$$

где N_j – j -е координационное число (количество соседей атома), соответствующие площади под j -м пиком; r_j – радиус j -й координационной сферы (r_1 соответствует длине химической связи, r_2 – расстоянию до соседей второго порядка и т.д.), отвечающий за положение максимума пика ФРРА; σ_j – среднеквадратичное отклонение параметров j -ого пика ФРРА, описывающее “размытость” кривой; x – переменная.

Задача отыскания значений r_j , N_j и σ_j , таких, чтобы суммарная функция распределений Гаусса наиболее близко описывала экспериментальную кривую, становится трудно разрешимой, так как даже для описания первых трех максимумов ФРРА следует подобрать минимум 6 параметров (N_1 , σ_1 , N_2 , σ_2 , N_3 , σ_3). Эта проблема решается переходом к пошаговой методике отыскания параметров ближнего порядка. Идея метода заключается в том, что “левый фронт” первого пика экспериментальной ФРРА соответствует нормальному распределению (при $r=1\div 1.5\text{Å}$ для рассматриваемого примера см. рис.9 а).

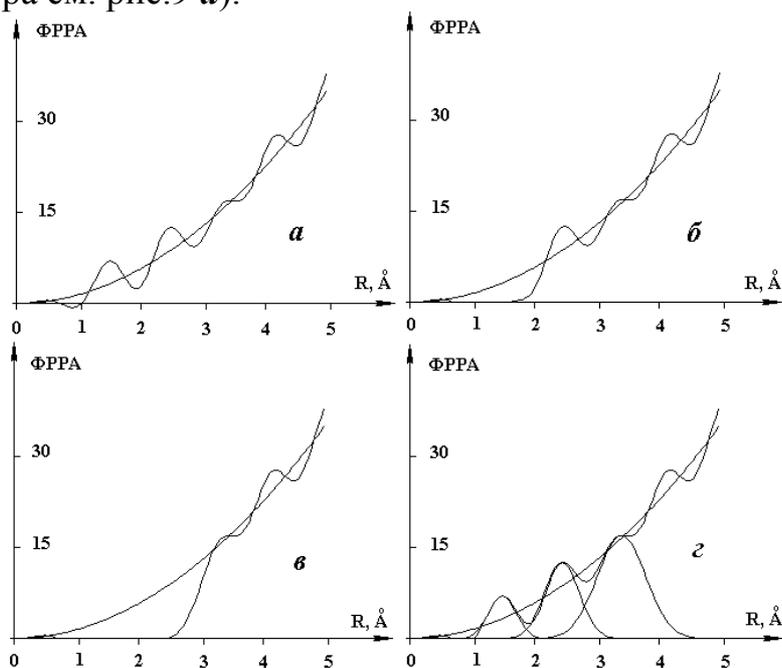


Рис.9. Методика обработки функции радиального распределения атомов: **а** – исходная функция; **б** – выделение второго пика ФРРА; **в** – выделение третьего пика; **г** – экспериментальные параметры ближнего порядка, определяемые из ФРРА.

Определив площадь под левой половиной первого максимума (которая соответствует $N_1/2$) в точке $x=r_1$ можно определить среднеквадратичное отклонение параметров первой координационной сферы по формуле:

$$\sigma_j = \frac{N_j}{2\pi \cdot \text{ФРРА}(r_j)}. \quad (25)$$

Имея все параметры нормального распределения для первого пика ФРРА на участке от r_1 до r_3 из экспериментальной кривой вычитаем первый пик (рис.9 б). Полученная после этой операции функция “открывает”

левый фронт второго пика экспериментальной ФРРА. По данной функции можно определить параметры второй координационной сферы как это было описано ранее.

Вычитание первого и второго пиков из экспериментальной ФРРА позволяет получить функцию, показанную на рис.9 в, по которой можно определить параметры третьей координационной сферы. Рассчитанные по данной методике кривые пиков первых трех координационных сфер и исходная ФРРА показаны на рис.9 г.

Полученные параметры нормальных распределений (r_j, N_j), соответствуют параметрам ближнего порядка в расположении атомов материала, а значения σ_j описывают среднеквадратичные отклонения длин химических связей атомов, входящих в соответствующую координационную сферу.

Библиографический список

1. **Татарина Л.И.** Электронография аморфных веществ. М.: Наука, 1972. 112 с.
2. **Практические методы в электронной микроскопии** Под ред. Одри М. Глоэра. Л.: Машиностроение, 1980. С.165 - 174.
3. **Вайнштейн Б.К.** Структурная электронография. М.: Из-во АН СССР, 1956. 583 с.
4. **Попов А.И., Михалев Н.И.** Атомная структура некристаллических полупроводников. М.: МЭИ, 1992. 96 с.

Контрольные вопросы

1. В чем различие электронографического, рентгенографического и нейтронографического методов исследования аморфных материалов?
2. Какие виды рефлексов дают монокристаллический, поликристаллический и аморфный материалы при электронографических исследованиях?
3. Как изменится внешний вид электронограммы поликристаллического материала если предположить, что межплоскостное расстояние увеличилось вдвое?
4. Позволяет ли функция радиального распределения атомов определить точное взаимное расположение атомов?
5. Возможно ли определение валентного угла по данным, полученным из функции радиального распределения атомов?

Оглавление

Введение	3
Образование электронограммы. Рассеивание электронов веществом.....	4
Регистрация электронограммы	7
Методика обработки электронограмм.....	8
Функция радиального распределения атомов	13
Библиографический список.....	15
Контрольные вопросы.....	15