

АЛГОРИТМ РОЗРАХУНКУ КІЛЬКОСТІ МІЖАТОМНИХ ЗВ'ЯЗКІВ, РОЗІРВАНИХ ПРИ ПЕРЕТИНІ КУБІЧНОЇ КРИСТАЛІЧНОЇ ГРАТКИ ДОВІЛЬНОЮ ПЛОЩИНОЮ

Ст. Бойко А.А.

Кер.: О.А. Галуза, А.О. Савченко

Національний технічний університет «ХПІ»

При формуванні нової поверхні кристала відбувається розрив міжатомних зв'язків. Енергія, що витрачена на формування нової поверхні, називається поверхневою енергією. Поверхнева енергія визначає всі поверхневі властивості матеріалів, тому її розрахунок є актуальним для багатьох задач фізики твердого тіла та поверхні [1].

В рамках моделі розірваних зв'язків, кількість міжатомних зв'язків, що розриваються при формуванні поверхні, є одним з основних параметрів, що визначають поверхневу енергію [2]. Цей параметр залежить від кристалічної орієнтації поверхні і визначає анізотропію поверхневої енергії. Розрахунок кількості розірваних зв'язків є складною задачею навіть для простих решіток і тривіальних орієнтацій площини перетину. Для більш складних випадків ця задача не може бути вирішена без застосування комп'ютера.

Перш за все було створено комп'ютерні 3D моделі всіх типів кубічної ґратки з різними перетинами. Аналіз цих моделей дозволив з'ясувати геометрію ґратки в околиці січної площини, та запропонувати алгоритм підрахунку розірваних зв'язків (РЗ).

На рис. 1 приведена модель ОЦК-ґратки та її перетину площиною (111). Розглянемо довільний атом (показано чорним кубом). Атоми його першої та другої координаційних сфер (КС), окрашені чорним та темно-сірим кольорами, відповідно. Розірвані зв'язки показано штриховими лініями. Видно, що при перетині площиною (111) атом, що лежить у площині поверхні S_1 втратив 4 атоми з першої КС (найближчі сусіди) та 3 атоми з другої КС (наступні найближчі сусіди) (рис. 1а). Однією з проблем при підрахунку кількості РЗ є те, що міжатомні зв'язки рвуться не лише у поверхневих атомах, а й у атомах, що лежать у приповерхневих площинах. Тому розглянемо також атомні шари, паралельні до поверхневого шару та площини, що їм відповідають. Позначимо ці площини через S_i , де $i = 1...N$ - номер площини починаючи з поверхні. Тоді, просуваючись вглиб кристалу бачимо, що

атом у площині S_2 також має розірвані зв'язки: він втратив 1 з найближчих сусідів та 3 з наступних найближчих сусідів (рис. 1б). Аналогічно, атом у площині S_3 втратив 1 з найближчих сусідів (рис. 1в). У атомів з наступних площин РЗ у межах перших двох КС немає. В результаті, для площини (111) і в 1-й КС, і в 2-й КС по 6 розірваних зв'язків.

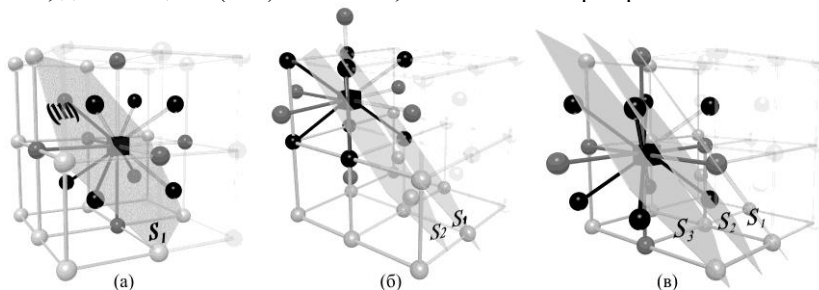


Рис. 1. Модель ОЦК-ґратки та її перетину площиною (111).

Ці міркування були формалізовані у вигляді алгоритму підрахунку кількості РЗ поверхневого атому у залежності від орієнтації січної площини. Аналіз та врахування особливостей кубічної ґратки дозволив створити алгоритм, який оперує лише цілими числами. Тому при розрахунках не виникає проблем, притаманних операціям з плаваючою точкою (втрата точності, помилки округлення тощо), а сам алгоритм є точним.

Крім кількості РЗ, програмне забезпечення, що реалізує створений алгоритм, дозволяє розраховувати ретикулярну щільність, яка є ще одним ключовим параметром, необхідним для оцінки поверхневої енергії у моделі розірваних зв'язків.

Результати роботи можуть бути використано для розв'язання різноманітних задач, пов'язаних з теоретичним аналізом поверхневих процесів.

1. Savchenko A.A., Belyaeva A.I., Galuza A.A., Kolenov I.V. The role of surface energy anisotropy in the formation of a stepped relief of polycrystalline W under sputtering with Ar ions. *J. Appl. Phys.* 2019. Vol. 125. 065307;

2. Belyaeva A.I., Savchenko A.A., Galuza A.A., Kolenov I.V. Surface energy anisotropy for the low-index crystal surfaces of the textured polycrystalline bcc tungsten: experimental and theoretical analysis. *Probl. Atomic Sci. Technol.* 2017. Vol. 5. P. 14–20.