

АЛГОРИТМ И ГРАФИЧЕСКИЙ ИНТЕРФЕЙС ПРОГРАММЫ ДЛЯ РАСЧЕТА И АНАЛИЗА ФУНКЦИЙ РАДИАЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ АМОРФНЫХ БИНАРНЫХ СПЛАВОВ

Волощук В.В., Шипкова И.Г.

Национальный технический университет
«Харьковский политехнический институт», г. Харьков

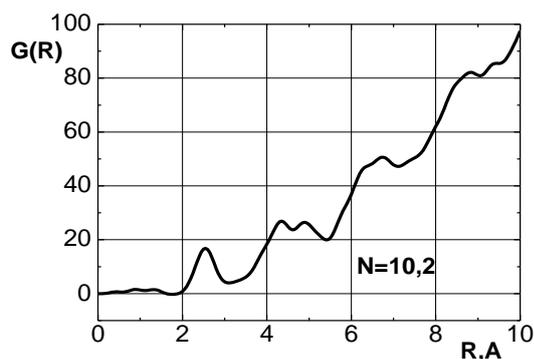
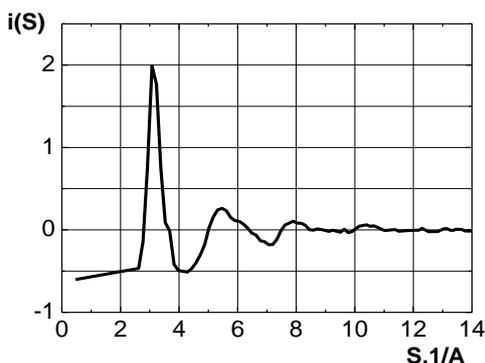
Исследование структуры аморфных металлических сплавов экспериментальными методами является важной задачей, решение которой может помочь объяснить особенности физических свойств этих уникальных материалов. Сравнение интерференционных функций и функций радиального распределения (ФРР) [1], полученных из дифракционных экспериментов, с аналогичными функциями, полученными расчетным путем для модельных систем, может дать правильное представление о внутреннем строении аморфного сплава. Расчет ФРР является сложной и трудоемкой математической задачей, требующей привлечения компьютерных программ. В данной работе разработана программа в системе MatLab с алгоритмом нахождения указанных функций для бинарных сплавов, а также предложен ее графический интерфейс для пользователей, незнакомых с тонкостями расчетов на каждом этапе.

Для построения ФРР использован математический аппарат Фурье-преобразования. Для двухкомпонентного сплава ФРР ($G(r)$) связана с интерференционной функцией $i(s)$ следующим уравнением:

$$G(r) = 4\pi r^2 (c_1 K_1 + c_2 K_2)^2 \cdot \rho_{\text{снл}} + \frac{2r}{\pi} \int_0^{\infty} i(s) \cdot s \cdot \sin(sr) ds,$$

где c_1, c_2 – атомные доли компонентов; $\rho_{\text{снл}}$ – средняя атомная плотность сплава; K_1, K_2 – усредненные по углам значения рассеивающих способностей атомов первого и второго компонентов; $s = 4\pi \cdot \sin\theta/\lambda$ – вектор рассеяния. Интерференционная функция $i(s)$ определяется из экспериментальной угловой зависимости интенсивности рентгеновского излучения с длиной волны λ путем введения поправок на поляризацию, поглощение, некогерентное рассеяние, аномальную дисперсию, и приведения к электронным единицам.

Действие программы апробировано при обработке дифрактограмм аморфного сплава Со-Р (см. рис). Определены положения максимумов, соответствующих радиусам первых трех координационных сфер, и найдено число ближайших соседей в первой координационной сфере.



[1] Скрышевский А.Ф. Структурный анализ жидкостей и аморфных тел. М.: Высшая школа, 1980.