

МОДЕЛИ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ГК

(ГК – граница кристаллитов)

*Лолахон Абдурахимовна Рахимова**Ферганский государственный университет**Физико-технический факультет,**кафедра теоретической физики магистрант*raximovalolaxon7@gmail.com

Аннотация. Означает, что энергия связана с атомами на поверхности или с поверхностью, для нахождения положения атомов необходимо перейти от геометрической модели к энергетической модели, соответствующей минимуму энергии. логичным будет использование более полного выражения при расчете энергии ГК:

Ключевые слова. Атом, энергия, проводник, плотность электронного газа ниже, плотность положительного заряда

Для интерпретации результатов экспериментальных исследований и сознательного управления свойствами поликристаллов, определяемыми структурой ГК, необходимы их атомные модели

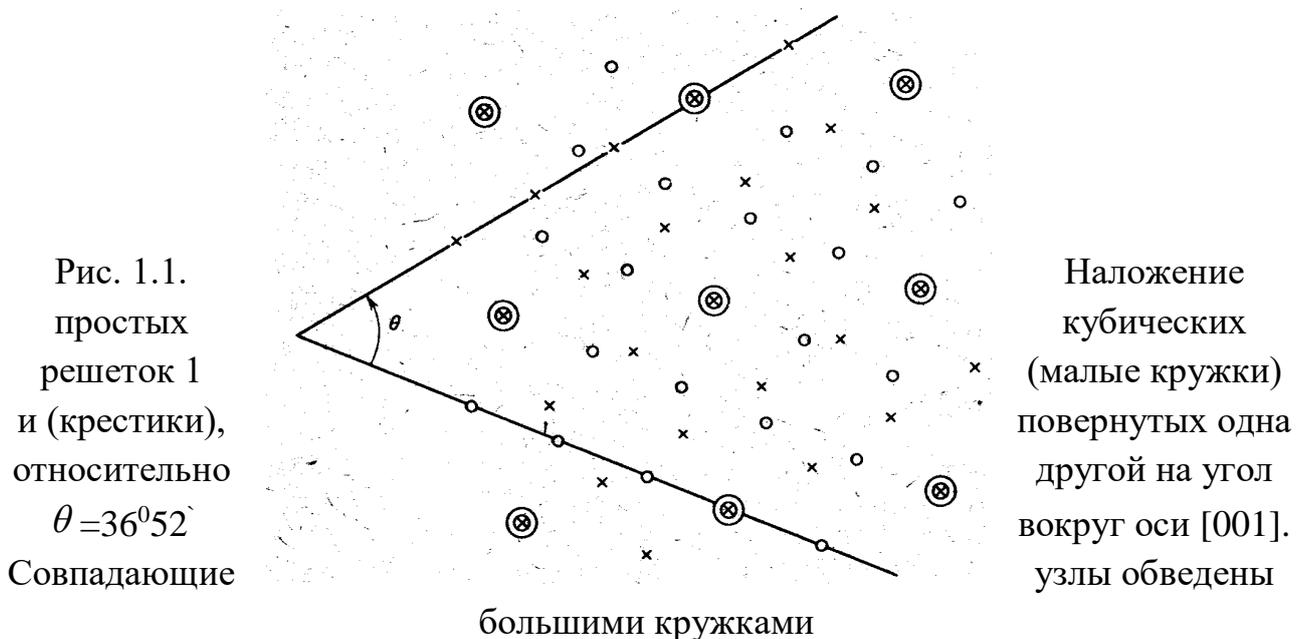
Если ограничиться рассмотрением плоских ГК (можно показать, что искривленные ГК следует считать состоящими из плоских участков - фасеток), то необходимо прежде всего уточнить макроскопические параметры, характеризующие ГК. Такими параметрами являются 3 угла, определяющие взаимную ориентацию θ двух зерен в пространстве, и 2 угла, определяющие ориентацию плоскости ГК (направление единичного вектора нормали \vec{n} к плоскости ГК). При описании атомной структуры ГК к этим 5 параметрам добавляются 3 компоненты вектора смещения одного кристаллита относительно другого. Вектор \vec{t} соединяет два подходящим образом выбранных атома, принадлежащих решеткам кристаллита I и II. Компонентой вектора \vec{t} вдоль нормали \vec{n} определяется очевидно собственный объем ГК (разность объемов бикристалла с данной ГК и монокристалла, содержащего такое же суммарное число атомов).

Как известно, при малых значениях угла θ , не превышающих нескольких градусов, применима дислокационная модель ГК Рида и Шокли. В её рамках граница представляет собой семейство параллельных дислокаций, лежащих в одной плоскости («дислокационная стенка»), или несколько пересекающихся

семейств с разными векторами Бюргера («дислокационная сетка»). Но, когда $\theta > 10^\circ$, дислокации располагаются настолько густо, что ядра перекрываются, и атомную структуру ГК нельзя представить как ряд параллельных независимых дислокационных ядер, структура которых могла бы быть найдена, например, известными методами моделирования на ЭВМ.

В отличие от малоугловых, ГК с большими углами разориентации получили название большеугловых. Их геометрическое описание оказалось возможным на основе концепции совпадающих узлов, предложенной Кронбергом и Вильсоном. Согласно этой концепции, существует набор углов взаимных разориентаций θ_n соседних зерен I и II (так называемые специальные разориентации или специальные углы), при которых в положении решеток I и II известная доля узлов, обозначаемая $1/\Sigma$, совпадает и образует так называемую решетку совпадающих узлов (рис.1.1). Имеются основания считать, что при данном θ или Σ энергетически выгодна такая ориентация ГК и такое ее положение $\vec{t} = 0$, при которых на ней располагается возможно больше совпадающих узлов. Если граница проходит не по совпадающим узлам, то можно указать ее положение в элементарной ячейке решетки совпадающих узлов.

Когда доля Σ^{-1} совпадающих узлов не очень мала ($\Sigma^{-1} \geq 0,03$), а поверхность совпадающих узлов на ГК мало отличается от максимально возможной, ее называют специальной (например, ГК, обозначенный ВГ на рис.1.2).



В нулевом приближении можно получить атомную структуру специальной ГК, если разместить в наложении решеток I и II атомы по одну сторону от плоскости ГК по узлам решетки I, а по другую сторону – по узлам решетки II.

Другие геометрические модели получатся, если вектору смещения \vec{t} придавать отличные от нуля значения, при этом, вообще говоря, совпадающих узлов может и не быть.

В таких геометрических моделях наложения жестких решеток I и II, вблизи плоскости ГК, пары атомов окажутся на взаимных расстояниях, значительно отличающихся от равновесных для данного кристалла (напри-мер, aa и bb на рис. 1.2).

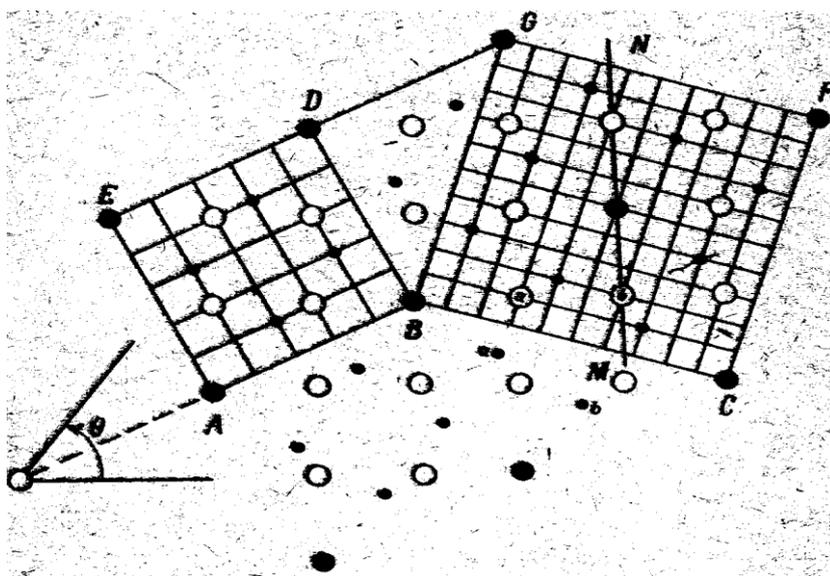


Рис. 1.2. Наложение решеток 1 (малые черные кружки) и 2 (светлые кружки). Большие черные кружки - совпадающие узлы; ABCD – участок полной решетки наложений, её узлы - точки пересечения взаимно перпендикулярных прямых левой квадратной сетки; BCFG-участок решетки зернограничных сдвигов границ BC, ее узлы - точки пересечения прямых правой сетки

Это приводит к чрезмерно большим значениям поверхностной энергии. Поверхностная энергия обусловлена тем, что у атомов на поверхности меньшее число соседей, чем в объеме кристалла или жидкости и, следовательно, меньшее число связей. Значит, чтобы перевести атом из объема на поверхность, некоторое количество связей надо порвать. Каждая связь имеет определенную прочность и, чтобы ее порвать, надо затратить энергию. Это и означает, что с атомами на поверхности, или, с поверхностью, связана энергия, которая и называется поверхностной.

В случае кристалла наименьшая поверхностная энергия не всегда соответствует наименьшей поверхности. Энергия поверхности кристалла зависит от ориентации этой поверхности. Кристалл в отличие от жидкости ограняет себя такими плоскостями с малой поверхностной энергией, что общая энергия, т.е. сумма произведений площадей поверхности на характерную для них поверхностную энергию, оказывается наименьшей. Следовательно, кристалл не может иметь произвольно сориентированные поверхности. С этим связано фасетирование ГК, о чем шла речь выше.

Чтобы найти положение атомов, отвечающее минимальной поверхностной энергии ГК, необходимо перейти от геометрической модели к энергетической, отвечающей минимуму энергии. Поскольку приграничная область содержит много атомов, построение энергетической модели требует решения сложной задачи на экстремум, которое может быть выполнено только численными методами. Однако, если в качестве нулевого приближения исходить из геометрической модели решетки совпадающих узлов, то задача об определении координат атомов на макроскопической протяженной ГК сводится к нахождению этих координат в пределах элементарной ячейки решетки совпадающих узлов. При не очень больших значениях Σ эта задача по уровню сложности не превосходит задачу на определение атомной структуры ядра дислокации, ориентированной произвольным образом относительно вектора Бюргерса, и вполне доступна современным ЭВМ.

Таким образом, задача нахождения атомной структуры специальной ГК разбивается на две части 1) геометрическая - построение решетки совпадающих узлов при данном значении θ_0 ; проведение в ней плоскости ГК с нормалью \vec{n}_0 и определение нерелаксированных координат атомов при $\vec{t} = 0$ или при заданном $\vec{t} \neq 0$; 2) энергетическая – нахождение при фиксированных \vec{t} координат атомов, отвечающих минимуму энергии, и определение вектора \vec{t} , соответствующего наименьшей энергии. Для решения первой части задачи развит мощный математический аппарат. Например, для кубических решеток решение можно найти в. Обычно расчёты по определению расположения атомов на ГК, отвечающего минимуму энергии, проводят также в два этапа. Имея выражение для энергии E ГК с расположением атомов, отвечающим заданным параметрам θ , \vec{n} и \vec{t} , находят вектор жесткого сдвига зерна Π относительно зерна I , отвечающий минимуму E . Затем позволяют отдельным атомам релаксировать независимо, что приводит к дальнейшему понижению E .

Самый простой рецепт микроскопического расчета энергии ГК сводится к представлению E в виде суммы энергий E_{ij} парных взаимодействий атомов, зависящих только от расстояний между ними

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j} E_{ij}(r_{ij}) . \quad (1.1)$$

Потенциал межатомного взаимодействия E_{ij} для каждого отдельного случая выбирается соответствующим образом.

Анализировать взаимодействия типа (1.1) в аналитическом виде не представляется возможным из-за чрезвычайной громоздкости, поэтому подобные исследования проводятся численными методами. С особенностями проведения таких численных исследований применительно к структуре и энергии ГК можно ознакомиться, например, изучив работу.

Корректность приближения (1.1), называемого парным, нарушается из-за существенного вклада в энергию E электронов проводимости, так как ГК представляет собою область с пониженной плотностью положительного заряда, в поле которого плотность электронного газа ниже (здесь речь идет о металле или полупроводнике с электронной проводимостью; в полупроводнике p -типа ГК представляет собой область с пониженной плотностью отрицательного заряда). Вообще говоря, при расчете энергии ГК имеет смысл пользоваться более полным выражением:

$$E = E_0 + \sum_i E_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} E(r_{ij}), \quad (1.2)$$

полученным методом теории возмущений второго порядка. В (1.2) величина E_0 есть сумма кинетической и электростатической энергий электронов, E_i - энергия взаимодействия i -го иона с его собственным электростатическим облаком, $E(r_{ij})$, как и в (1.1), энергия парного взаимодействия.

Подход к идентификации ГК, основанный на минимизации соотношений типа (1.1) и (1.2), необходимо уточнить. Дело в том, что при конечной температуре T равновесной является конфигурация ГК, отвечающая минимуму не энергии E , а свободной энергии

$$F = E - TS \quad (1.3)$$

где S -энтропия единицы площади ГК; её основными слагаемыми являются колебательная, конфигурационная и ангармоническая энтропии. Примером описания ГК, основанным на минимизации (1.3), может служить.

Из сопоставления известных геометрических моделей и энергетических расчетов следует, что нет простых универсальных методов определения структуры и свойств произвольных ГК. Однако, теория позволяет вычислить её характеристики в каждом конкретном случае с точностью, достаточной для выявления их зависимостей от θ и \bar{n} . В рамках настоящего исследования нас не будет интересовать точное структурное строение ГК, важны выводы, следующие из рассмотренных здесь работ:

1) ГК есть не бесформенное случайное структурное образование поликристалла, её строение задаётся определенными закономерностями, например, законом плотной упаковки и минимумом свободной энергии поверхности ГК;

2) ГК можно рассматривать как поверхность раздела двух отдельных кристаллитов со свойственными ей структурными (геометрическими), атомными, энергетическими и электронными характеристиками, при этом в непосредственной близости от поверхности раздела свойства поликристалла определяются свойствами самих кристаллитов.

В подтверждение второго вывода можно привести конкретный результат, полученный для ВТСП керамики типа $YBa_2Cu_3O_2$. В них уже на расстоянии 0,2 нм от ГК стехиометрический состав кристаллитов соответствует формуле исходного соединения. В определенных пределах может меняться содержание лишь одной из компонент и наличие на ГК фаз других формульных единиц исключено. Это означает, что изменение свойств материала на ГК связано не с “микрoхимией” границы, а ее микрoструктурой. Основными же элементами микрoструктуры ГК являются:

- 1) кристаллографическая ориентация обоих контактирующих кристаллитов;
- 2) граничные дислокации;
- 3) примеси.

Такое представление открывает пути к моделированию как свойств самой ГК, так и различных физических эффектов, связанных с наличием в поликристаллах ГК.

REFERENCES

1. Зайнолобидинова, С. М. (2022). СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ И ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ МЕЖКРИСТАЛЛИТНЫХ ГРАНИЦ. *Oriental renaissance: Innovative, educational, natural and social sciences*, 2(9), 544-548.
2. Зайнолобидинова, С. М., & Тўйчиева, М. К. (2022). ПОЛИКРИСТАЛЛ СТРУКТУРАЛИ МАТЕРИАЛЛАРДА ЧЕГАРА СОҶАЛАРИНИНГ ЭЛЕКТРОНЛАРИНИНГ КЎЧИРИЛИШИГА ТАЪСИРИ. *Oriental renaissance: Innovative, educational, natural and social sciences*, 2(5), 372-374.
3. Алимов, Н. Э., Зайнолобидинова, С. М., Отажонов, С. М., Халилов, М. М., Юсупова, Д. А., & Якубова, Ш. (2016). Изменение потенциальных барьеров низкоразмерных тонких пленок р-CdTe в условиях внешних воздействий. *Журнал физики и инженерии поверхности*.
4. Атакулов, С. Б., Зайнолобидинова, С. М., Отаджонов, С. М., & Тухтаматов, О. А. (2011). Проницаемость потенциального барьера на границах зерен в полупроводниковых поликристаллах. *Узбекский физический журнал*, 13(5), 334-340.
5. Онаркулов, К. Э., & Зайнолобидинова, С. М. (2022). СТРУКТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК ПОЛУПРОВОДНИКОВ НА ФОРМИРОВАНИЕ ЭФФЕКТА АНОМАЛЬНОГО

ФОТОНАПРЯЖЕНИЯ. *PEDAGOGICAL SCIENCES AND TEACHING METHODS*, 13(2), 228-232.

6. Зайнолобидинова, С. М. (2017). ИДЕНТИФИКАЦИЯ ВКЛАДА ГРАНИЦ ЗЕРЕН В ТОКОПЕРЕНОС В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ. *Интеграция наук*, (2), 16-17.
7. Атакулов, Ш. Б., Зайнолобидинова, С. М., Набиев, Г. А., Набиев, М. Б., & Юлдашев, А. А. (2013). Теория явлений переноса в поликристаллических пленках халькогенидов свинца. Подвижность. Невырожденная статистика. *Физика и техника полупроводников*, 47(7), 869-873.
8. Атакулов, Ш. Б., Зайнолобидинова, С. М., Отажонов, С. М., & Тухтаматов, О. А. (2010). Особенности рассеяния носителей тока межкристаллитными потенциальными барьерами, образованными электронными поверхностными состояниями в поликристаллических полупроводниках. *Фізична інженерія поверхні*, (8, № 4), 365-370.
9. Рахимов, Д. (2018). ПОНЯТИЕ РЕГИОНАЛЬНОЙ КОНКУРЕНЦИИ И КОНКУРЕНТОСПОСОБНОСТИ. *Scienceweb academic papers collection*.
10. Rakhimova, L. A. (2021). IMPROVEMENT OF THE TRAINING PROCESS FOR PHYSICAL DEPARTMENTS AND ACHIEVEMENT OF EFFICIENCY. *Scientific progress*, 2(8), 76-81.
11. Зайнолобидинова, С., & Рахимова, Л. (2022). КОНЦЕНТРАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТИ ПРОЗРАЧНОСТИ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА. *Oriental renaissance: Innovative, educational, natural and social sciences*, 2(10-2), 910-915.
12. Raximov, D. S. (2022). DIRECTIONS OF DIVERSIFYING INNOVATION PROCESSES IN THE INDUSTRY NETWORK. *World Economics and Finance Bulletin*, 16, 107-110.
13. Rakhimov, D. (2022). DIRECTIONS OF DIVERSIFICATION OF INNOVATION SYSTEMS IN THE INDUSTRY. *Journal of Integrated Education and Research*, 1(1), 88-96.
14. Mirzakarimova, M., & Pardaeva, B. (2020). Comparative analysis of structural shifts in employment in the region Fergana. *Theoretical & Applied Science*, 1, 385-391.
15. Rakhimov, D. S. (2022). DIRECTIONS OF DIVERSIFICATION OF INNOVATION PROCESSES IN INDUSTRY. *INTEGRATION OF SCIENCE, EDUCATION AND PRACTICE. SCIENTIFIC-METHODICAL JOURNAL*, 3(6), 127-133.
16. Khakimov, D. R., Kurbanov, D., & Khalildinov, A. A. (2022). Formation of New Economic Mechanisms in the Field of Education. *American Journal of Economics and Business Management*, 5(11), 76-81.
17. Khakimov, D. R., Khalildinov, A. A., & Abdullaeva, S. E. (2022). THE MAIN FACTORS OF THE DEVELOPMENT OF MARKET RELATIONS IN THE FIELD OF HIGHER EDUCATION. *Gospodarka i Innowacje.*, 29, 94-100.
18. Khakimov, D. R., & Qizi, H. R. R. (2022). Mechanism of stability of the textile industry.
19. Mirzakarimova, M. M. (2022). DISTANCE LEARNING SYSTEMS AND PROSPECTS IN UZBEKISTAN. *Архив научных исследований*, 2(1).
20. Mirzakarimova, M. (2012). Issues Of Labour Potential Growth And Effective Formation Of Employment Structure In Uzbekistan. *European Journal of Business and Economics*, 4.