

РОЗРАХУНОК КІЛЬКОСТІ РОЗІРВАНИХ МІЖАТОМНИХ ЗВ'ЯЗКІВ ПРИ ПЕРЕТИНІ ГЕКСАГОНАЛЬНОЇ ЩІЛЬНОУПАКОВАНОЇ ГРАТКИ СІЧНОЮ ПЛОЩИНОЮ

Бойко А.А.

*Національний технічний університет
«Харківський політехнічний інститут», м. Харків*

В роботі опрацьований алгоритм визначення кількості розірваних міжатомних зв'язків кристалічних ґраток, розроблений та реалізований на мові програмування C++ програмний продукт, який дозволяє підрахувати кількість розірваних міжатомних зв'язків при перетині гексагональної щільноупакованої ґратки довільною площиною та визначити ретикулярну щільність цієї площини.

Розрив міжатомних зв'язків відбувається коли утворюється нова поверхня кристала. Кількість міжатомних зв'язків, що розриваються при формуванні поверхні, є одним з основних параметрів, що характеризує поверхневу енергію. Цей параметр залежить від кристалічної орієнтації поверхні. Підрахунок кількості розірваних зв'язків є доволі складною задачею навіть для простих ґраток та тривіальних орієнтацій січної площини. Автором здійснено аналіз літературних джерел з матеріалознавства та кристалографії. Це дало змогу опрацювати алгоритм визначення кількості розірваних міжатомних зв'язків кубічних та гексагональних ґраток та математично розв'язати задачу. Для початку роботи з програмою потрібно обрати з запропонованого списку матеріал, ввести індекси Міллера та обрати кількість координаційних сфер, для яких необхідно розрахувати кількість розірваних міжатомних зв'язків. Алгоритм побудови вершин ґратки досить простий: задаються координати початкової вершини та від неї будуються інші точки методом BFS (пошуком у ширину). Для підрахунку кількості розірваних міжатомних зв'язків реалізований алгоритм, який знаходить точки на всіх координаційних сферах для обраного атома на заданій площині, та розриви зв'язків. Результатом роботи алгоритму буде кількість розірваних міжатомних зв'язків в кожній з координаційних сфер, загальна кількість розірваних зв'язків у всіх сферах та ретикулярна щільність заданої площини. На екран програма виведе кількість розірваних міжатомних зв'язків на кожній координаційній сфері та загальну кількість розірваних зв'язків.

Розроблений програмний продукт дозволяє розраховувати поверхневу енергію, що дає змогу визначати усі унікальні поверхневі властивості металів, а це вже є фундаментальним дослідженням.

Література:

1. Матысина З. А. Физические явления и свойства поверхности кристаллов/ З. А. Матысина, С. Ю. Загинайченко, Д. В. Щур. – Издательство «Наука и образование», Днепр, 2004.
2. Чупрунов Е. В. Основы кристаллографии/ Е. В. Чупрунов, А. Ф. Хохлов, М. А. Фаддеев. – Издательство «Физматлит», Санкт-Петербург, 2004.
3. Игумнов В. Н. Физические основы микроэлектроники/ В. Н. Игумнов. – Издательство «Direct – MEDIA», Москва – Берлин, 2014