

## РОЗРАХУНОК СТРУКТУРИ НЕВПОРЯДКОВАНОГО СЕЛЕНУ МЕТОДОМ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

\*З.А. Дутчак, \*\*Л.М. Ракобовчук, \*Б.М. Яворський  
\*Кафедра "Електронні прилади", ІТРЕ  
\*\*Кафедра "Захист інформації", ІКТА, НУ "Львівська  
політехніка"

Метою роботи було розрахунок структурного фактору аморфного селену в наближенні щільного пакування ближнього порядку.

Проводилось комп'ютерне моделювання структурного фактора рідкого селену. Розроблена програма алгоритму рішення рівняння для структурного фактора. Показано, що розрахований структурний фактор рідкого селену (рис. 1) в очікуванні реалізації щільного пакування ближнього порядку добре узгоджується з експериментальним в області малих значень  $S$ .

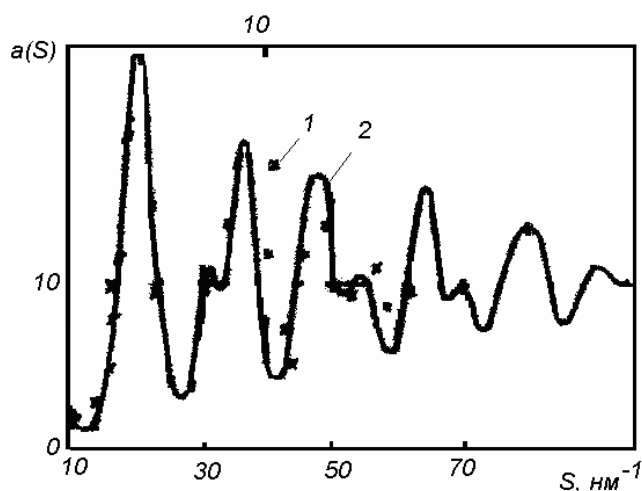


Рис. 1. Структурний фактор селену: 1 – експериментальний; 2 – модульований.

Методом молекулярної динаміки з використанням розробленого алгоритму в експериментальній роботі показано, що в аморфному та рідкому селені ближній порядок реалізується на базі щільно пакованої решітки із збереженням ланцюгової будови, в якій коефіцієнт пакування визначається сумою першого і другого координаційних чисел.

Результати модельних досліджень в рідких сплавах селену, які багаті на домішкові атоми, дозволили припустити, що ближній порядок реалізується на базі евтектики виду чистий селен + сполука.