

Г.М. Іваницька, В.С. Ковтуненко, В.М. Кришеник, В.М. Рубіш

## Теоретичний аналіз інтенсивності пружного розсіювання електронів атомними сітками аморфних речовин

*Ужгородський національний університет, м.Ужгород, вул.Капітульна, 13, тел.-614417,  
E-mail: ivancyp@ukr.net*

Теоретично виведено загальне математичне співвідношення для інтенсивності дифракції електронів на аморфних речовинах складного хімічного складу через прямі структурні параметри координаційних сфер неупорядкованої атомної сітки. Отриманий вираз може бути використаний для безпосереднього розрахунку функцій радіального розподілу атомів без застосування традиційного перетворення Фур'є. Ужгородський національний університет, вул.Капітульна, 13, м.Ужгород, 88000.

**Ключові слова:** аморфні речовини, дифракція електронів, функція радіального розподілу.

*Стаття постуила до редакції 12.08.2011; прийнята до друку 15.09.2011.*

### Вступ

Дифракційний метод був і залишається єдиним та надійним експериментальним методом прямих досліджень структури конденсованих систем. Отримана в результаті дифракційного експерименту крива кутового розподілу інтенсивності розсіяного випромінювання містить весь об'єм інформації про структуру речовини. Завдання дослідника полягає в тому, щоб цю інформацію здобути. Найбільші успіхи в реалізації даної мети досягнуті при дослідженні монокристалів. На їх фоні результати структурного аналізу неупорядкованих систем є більш скромними. Причина таких відмінностей полягає в існуванні ряду обмежень, які накладаються як на процес запису дифракційної картини від неупорядкованих об'єктів, так і на процедуру її аналізу.

Суттєвим обмеженням на шляху більш широкого практичного впровадження дифракційних методів дослідження неупорядкованих систем є і невідповідність затрачених зусиль рівню отримуваних результатів. У першу чергу це зумовлено недосконалістю методів аналізу всієї сукупності експериментальних дифракційних даних для отримання достовірної інформації про локальну структуру атомної сітки неупорядкованих систем. Найбільш сильно такі обмеження проявляються в електроннографії завдяки особливостям взаємодії електронних пучків з речовиною.

Традиційні підходи досліджень атомної будови аморфних речовин базуються переважно на аналізі структурних параметрів ближнього порядку, що отримують з функції радіального розподілу атомів (ФРРА) в рамках тієї чи іншої структурної моделі.

Іноді до такого аналізу додається ще й загальний опис експериментального структурного фактора. Обов'язковим етапом традиційних методів аналізу електроннографічних даних від неупорядкованих систем є використання інтегрального перетворення Фур'є. При цьому не враховується цілий ряд суттєвих особливостей процесів дифракції електронів на аморфних речовинах: 1. Основою строгого математичного обґрунтування методу ФРРА для аналізу структури неупорядкованих речовин є її континуальне представлення, яке описується неперервними функціями радіального розподілу густини розсіюючих центрів. Реально ж за своєю фізичною природою структура атомних систем у межах ближнього порядку є дискретною. 2. У методичному аспекті не враховуються малі розміри зразків і елементів їх мікроструктури. Але ці параметри є важливими структурними елементами, які визначають малокутову частину електроннограм. Крім того, в результаті фур'є-перетворення отримують не чітку фізичну характеристику структури, а формальну різницеву функцію, що вносить додаткові похибки. 3. В експериментальному аспекті в електроннографії не до кінця розв'язані проблеми точної реєстрації дифрактограм при малих та при великих кутах розсіювання і врахування некогерентного фону. 4. У математичному аспекті не завжди враховується специфічність процедури інтегрального фур'є-перетворення. Остання накладає на перетворювану функцію ряд вимог (неперервність, диференційовність, визначеність у безкінечному інтервалі, тощо). Часто експериментальні дифракційні дані ці вимоги задовольняють не повністю, зумовлюючи суттєві

спотворення кінцевих ФРРА.

Зазначені особливості електронографії неупорядкованих систем вимагають розробки таких нових методів аналізу дифракційних даних, які не використовують перетворення Фур'є. Для цього необхідно зв'язати розподіл інтенсивності розсіювання електронів у вигляді електронограми безпосередньо з параметрами структури ближнього порядку атомних сіток. У даній роботі представлено розв'язок такої задачі на основі співвідношення Дебая.

## I. Метод дослідження

Найбільш адекватно описує реальний фізичний процес формування дифрактограм від аморфних речовин математичне співвідношення, вперше отримане Дебаєм [1]. Воно визначає розподіл інтенсивності дифрактограми, отриманої від газу, що складається з однакових  $N$ -атомних молекул. Пронумеруємо всі атоми однієї молекули газу від 1 до  $N$  (рис.1). Тоді міжатомні відстані в молекулі

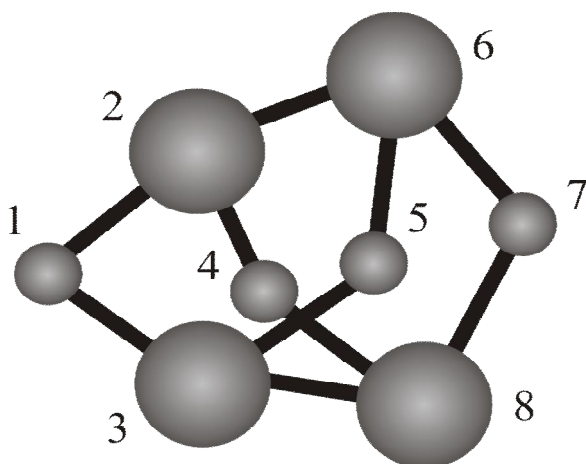


Рис. 1. Одна з можливих молекул  $As_4S_4$  із  $N = 8$ .

позначатимемо через  $r_{ij}$ , де  $i$  та  $j$  – номери двох атомів молекули, розділених даною відстанню. Провівши усереднення інтенсивності розсіювання електронів за всіма орієнтаціями молекул газу у просторі, отримують відому формулу Дебая:

$$I(s) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N F_i(s) F_j(s) \cdot \frac{\sin sr_{ij}}{sr_{ij}}. \quad (1)$$

В отриманій подвійній сумі можна виділити  $N$  членів, кожен із яких відповідає одному і тому ж атому. Для них  $i = j$ ,  $r_{ij} = 0$  та  $\sin(sr_{ij})/r_{ij} = 1$ . Тоді можна записати:

$$I(s) = \sum_{i=1}^N F_i^2(s) + \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N F_i(s) F_j(s) \cdot \frac{\sin sr_{ij}}{sr_{ij}}. \quad (2)$$

Дані математичні співвідношення можна використати і для аморфних речовин. Але такий

безпосередній підхід вимагає пошуку такої множини міжатомних відстаней  $r_{ij}$ , яка добре опише експериментальну інтенсивність відповідно до формул (1) чи (2). Фактично це означає побудову просторової моделі великого структурного фрагмента досліджуваного зразка, який містить порядку 1000 атомів. Звичайно, що така інформація може бути отримана лише шляхом комп'ютерного моделювання методом Монте-Карло [2]. Але при такій великій кількості параметрів (порядку 3000 просторових координат), які потрібно варіювати при моделюванні цим методом, розв'язок поставленої задачі на сьогодні не можливий [3]. Тому ми застосуємо інший методичний підхід. Використаємо традиційне представлення структури як упорядкованих, так і неупорядкованих атомних сіток у вигляді координаційних сфер (КС). На даній методичній основі проведемо теоретичні перетворення виразу (2) таким чином, щоб інтенсивність  $I(s)$  виражалась через обмежений набір координаційних радіусів та координаційних чисел перших КС атомної сітки.

## II. Результати досліджень та їх аналіз

Всю атомну сітку досліджуваного зразка умовно розіб'ємо на окремі структурні фрагменти. Кожен фрагмент виділяється в сітці у вигляді великої області сферичної форми з радіусом, приблизно рівним радіусу кореляції структурного упорядкування атомної сітки  $R_K$  (рис. 2). Сам процес

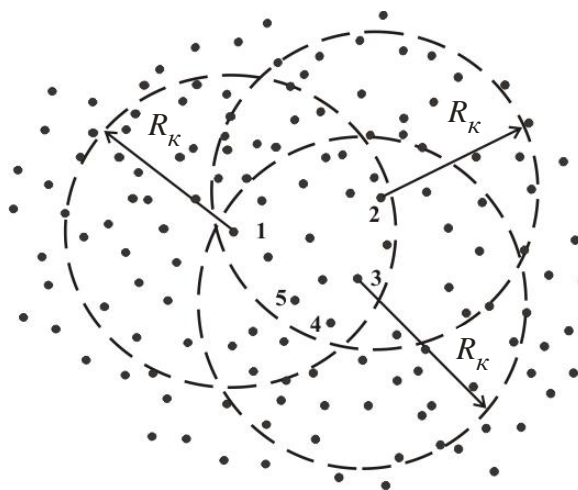
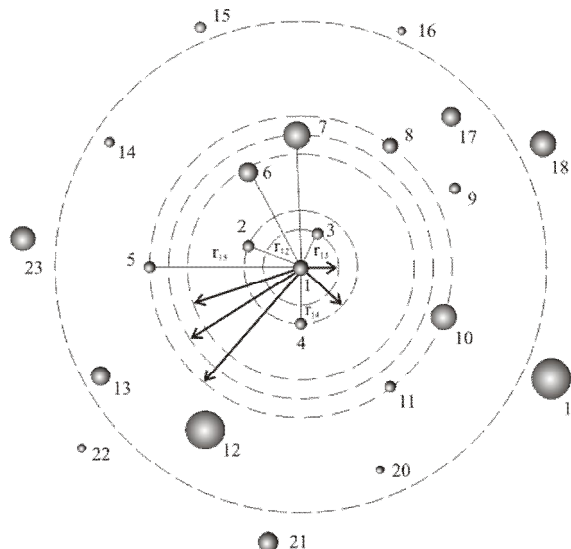


Рис. 2. Невпорядкована атомна сітка з виділеними в ній трьома сферичними структурними фрагментами-макромолекулами з центральними атомами 1, 2, 3 цих фрагментів (для спрощення на рисунку вказані номери лише 5 атомів).

розбиття проводитимемо таким чином, щоб з кожним атомом неупорядкованої сітки поєднувався свій структурний сферичний фрагмент, який можна вважати макромолекулою. Даний атом розміщується в центрі сферичного фрагмента, називається центральним і служить для ідентифікації відповідного фрагмента.

Відносно виділеного центрального атома тепер визначаються всі міжатомні відстані  $r_{ij}$  у фрагменті (рис. 3 – для спрощення рисунку на ньому



**Рис. 3.** Центральна ділянка двохмірного фрагмента-макромолекули для центрального атома 1 з відповідними міжатомними відстанями, які використовуються у виразах (1) та (2).

використано двохмірну модель неупорядкованої атомної сітки), які й використовуються у виразах (1) та (2). Крім того, будемо вважати, що в середньому в кожному структурному фрагменті-макромолекулі міститься  $N$  атомів. Оскільки цей фрагмент має форму кулі з радіусом  $R_k \approx 1$  нм, то кількість атомів  $N$  у ньому достатньо велика, щоб використовувати в подальшому аналізі статистичні методи. Зрозуміло, що серед всіх фрагментів атомної сітки будуть зустрічатися й такі, що мають дуже близьку структуру. Тому будемо вважати, що вибраний фрагмент з певною фіксованою структурою атомної сітки повторюється в багатьох її локальних ділянках. Але орієнтація таких «ідентичних» фрагментів відносно зондуючого пучка в різних ділянках змінюється випадково. Такі умови й відповідають можливості використання формули Дебая.

Повернемося до математичних співвідношень (1) та (2). Вони є строгим представленням інтенсивності пружного розсіювання електронів на неупорядкованих матеріалах у рамках прийнятих наближень. Аналізуючи ці вирази, можна легко помітити, що їхня подвійна сума просто перебирає всі можливі у структурному фрагменті міжатомні відстані. При цьому кожна з цих відстаней додає до загальної інтенсивності розсіювання свою інтерференційну функцію, помножену на відповідні атомні амплітуди. Важливо також зазначити, що кожній міжатомній відстані структурного фрагмента відповідають два однакових члени подвійної суми. Отже, загальна інтенсивність розсіювання електронів аморфною речовиною складається з подвоєних інтерференційних функцій всіх міжатомних відстаней атомної сітки цієї речовини. Тобто, при

розв'язку нашої задачі в якості елементарної «комірки» неупорядкованої атомної сітки ми беремо набір всіх тих пар атомів, які мають одну і ту ж міжатомну відстань і рівномірно розорієнтовані у просторі [4].

Розрахунок інтенсивності дифрактограм у загальному вигляді за співвідношеннями (1) та (2) відповідає усередненню інтенсивності розсіювання молекулами газу при їх рівноімовірній орієнтації у просторі. Як слідує з наведених вище наближень, у випадку аморфних речовин дане усереднення слід доповнити сумуванням інтенсивностей розсіювання електронів по всьому набору різних типів структурних фрагментів, виділених в атомній сітці. Приймемо, що кількість таких суттєво різних за структурою атомної сітки типів структурних фрагментів у зразку рівна  $M$ . Зрозуміло, що кількість таких типів фрагментів не має бути занадто великою. Принаймні ми вважаємо, що має виконуватися умова  $M \ll N$ . У протилежному випадку виділення вкладу кожного з типів фрагментів у загальну структуру атомної сітки буде маскуватися статистичним усередненням параметрів БП по великому ансамблю таких фрагментів.

Для продовження аналізу потрібна інформація про точну структуру кожного типу виділених фрагментів. Ми не можемо її отримати з експериментальних досліджень неупорядкованих атомних сіток електронографічним методом. Тому для продовження розв'язку задачі слід використати подальші наближення. Більшість із них полягає у введенні для опису структури атомних сіток континуально неперервних функцій радіального розподілу атомів [1]. Але такий підхід не відповідає фізичній природі атомних сіток в області БП, які є строго дискретні. В результаті глибокого методологічного протиріччя між реальною дискретною природою атомних сіток і їх представленням у вигляді неперервних математичних функцій, традиційний метод ФРП проявляє ряд суттєвих недоліків при аналізі структури аморфних речовин [5].

Ми пропонуємо інший підхід до вирішенні цієї задачі. Він ґрунтується на введенні дискретних параметрів опису структури атомних сіток, що відповідає їх реальній будові. Фізичною основою такого підходу є розбиття кожного типу структурного фрагмента на першу, другу, третю і т.д. КС (рис.3). Але для складних за хімічним складом речовин ми пропонуємо доповнити таке розбиття додатковим виділенням у кожній КС окремих підсфер. Для цього в досліджуваному зразку із  $N$  атомів позначимо кількості атомів кожного хімічного елемента у структурному фрагменті через  $N_1, N_2, \dots, N_m$ , де  $m$  – кількість різних хімічних елементів у зразку. При достатньо великому  $N$  можна вважати, що кожен тип виділених нами структурних фрагментів має однакові значення величин  $m, N_1, N_2, \dots, N_m$ .

Для виділення координаційних підсфер у загальному випадку вважатимемо, що в  $k$ -ій КС структурного фрагмента певного типу навколо

центрального атома на відстані  $r_{k1}$  міститься  $Z_{k1}$  сусідів першого хімічного елемента, на відстані  $r_{k2}$  міститься  $Z_{k2}$  сусідів другого хімічного елемента, ... на відстані  $r_{km}$  міститься  $Z_{km}$  сусідів  $m$ -го хімічного елемента. Оскільки в атомній сітці нами виділено  $M$  різних за структурою типів структурних фрагментів, то кожен такий тип буде описуватися своїм набором координаційних радіусів  $r_{ki}$  та координаційних чисел  $Z_{ki}$  відповідних підсфер. Даний факт врахуємо ставлячи зверху над цими параметрами додатковий індекс, який визначатиме номер типу структурного фрагмента, який ними описується. Тобто, надалі позначення  $Z_{ki}^j$  задаватиме кількість атомів  $i$ -го хімічного елемента в  $k$ -ій КС для структурного фрагмента типу  $j$ .

Запропонований вище метод розбиття КС на підсфери ґрунтується на законах фізико-хімічної взаємодії атомів. Згідно з ними, для будь-якої пари певних взаємодіючих атомів квантово-механічно встановлюється фіксована рівноважна міжатомна відстань або довжина хімічного зв'язку. Їй відповідає мінімум енергії цього зв'язку, яка різко зростає при відхиленні міжатомної відстані від рівноважної. Те ж саме стосується і кутів між двома хімічними зв'язками при квантово-механічній взаємодії між собою трьох певних атомів. А дані кути для різних взаємодіючих трійок атомів визначають радіуси введених нами різних координаційних підсфер другої КС атомної сітки. Аналогічно враховується різна взаємодія різних кількостей атомів у третій, четвертій і наступних КС. Тобто, введене нами розбиття кожної КС на окремі підсфери враховує відмінності подвійної, потрійної і т.д. квантово-механічної взаємодії між різними найближчими сусідами в неупорядкованій атомній сітці аморфних речовин.

Використовуючи введені фізичні наближення та позначення, виконаємо ряд математичних перетворень виразу (2). Для цього, врахувавши наведені вище закономірності, введемо ряд додаткових умов.

1. Усереднення інтенсивності по різних орієнтаціях певного структурного фрагмента у просторі замінимо на усереднення по всіх рівномірно орієнтованих у просторі міжатомних відстанях даного фрагмента.

2. Сумування у другому члені виразу (2) за першим індексом фізично означає почерговий вибір кожного із  $N$  атомів фіксованого структурного фрагмента. Оскільки з кожним атомом у нас пов'язаний свій структурний фрагмент, то таке сумування автоматично означає і вибір для розгляду все нових типів структурних фрагментів атомної сітки.

3. Математичне сумування у (2) по другому індексу фізично відповідає додаванню в загальну інтенсивність розсіювання електронів вкладів атомних пар вибраного нами в пункті 2 центрального атома почергово з усіма іншими атомами фіксованого структурного фрагмента. Тобто, ця процедура задає у вигляді суми відповідних

елементарних інтерференційних функцій ту частину інтенсивності дифракційної картини, яка визначається структурою вибраного фрагмента.

4. Згідно з процедурою розбиття атомної сітки на структурні фрагменти, при достатньо великих  $R_k > 1$  нм та при виконанні умови  $M \ll N$  почерговий вибір всіх атомів певного структурного фрагмента у якості центрального (відповідно до пункту 2) автоматично забезпечує розгляд всіх типів структурних фрагментів, які реалізуються в досліджуваній аморфній речовині.

5. Виділення координаційних підсфер з чіткою фізичною фіксацією параметрів  $r_{ki}$  та  $Z_{ki}$  можливе лише для кількох перших КС. Їх кількість для різних аморфних речовин може бути рівна 2 – 5 [6]. Вклад наступних КС у дифракційну картину в межах похибки електронографічного експерименту буде однаковим для всіх типів структурних фрагментів [7]. Тому для таких КС доцільно розглядати лише усереднені параметри: середній координаційний радіус  $r_k$  та середнє координаційне число  $Z_k$ .

6. Вклад у дифракційну картину міжатомних відстаней з  $r > R_k$  для кожного структурного фрагмента можна розраховувати вже на основі континуального підходу через усереднену атомну густину досліджуваного зразка  $\rho_0$ . Це зумовлено тим, що для таких міжатомних відстаней КС розміщуються так густо, що виділити серед них якусь одну дискретну КС стає практично неможливо. При цьому різні типи структурних фрагментів даватимуть однакові «континуальні» вклади в дифракційну картину, оскільки ці вклади залежать лише від параметрів  $\rho_0$  та  $R_k$ , які є константами для даної атомної сітки.

Використаємо наведені умови для уточнення виразу інтенсивності розсіювання електронів  $I(s)$ . Якщо досліджуваний зразок має складний хімічний склад, то перша сума співвідношення (2) містить вклади лише від окремих атомів різних хімічних елементів. Тоді для неї отримаємо:

$$\sum_{i=1}^N F_i^2(s) = N_1 F_1^2(s) + N_2 F_2^2(s) + \dots + N_m F_m^2(s). \quad (3)$$

Поділивши і помноживши всі члени даного виразу на  $N$  та врахувавши, що  $N_i/N = c_i$  – відносні долі різних хімічних елементів у зразку, можемо записати:

$$\sum_{i=1}^N F_i^2(s) = N \sum_{i=1}^m c_i F_i^2(s) = N \overline{F^2(s)}, \quad (4)$$

де  $\overline{F^2(s)} = \sum_{i=1}^m c_i F_i^2(s)$  – усереднений по всіх хімічних елементах електронний атомний фактор зразка.

Виберемо певний  $j$ -ий тип структурного фрагмента із центральним  $i$ -им атомом. Тоді інформаційний вклад у дифракційну картину тих його перших КС, які доцільно розділяти на підсфери, можна записати як:

$$F_i(s) \sum_{k=1}^L [Z_{k1}^j F_1(s) \frac{\sin sr_{k1}^j}{sr_{k1}^j} + Z_{k2}^j F_2(s) \frac{\sin sr_{k2}^j}{sr_{k2}^j} + \dots + Z_{km}^j F_m(s) \frac{\sin sr_{km}^j}{sr_{km}^j}] = F_i(s) \sum_{k=1}^L \sum_{i=1}^m Z_{ki}^j F_i(s) \frac{\sin sr_{ki}^j}{sr_{ki}^j}, \quad (5)$$

де  $L$  – кількість КС  $j$ -го структурного фрагмента.

Вклад у дифракційну картину усереднених КС, які не розбиваються на координаційні підсфери і приймаються однаковими для всіх структурних фрагментів, можна записати виразом, аналогічним (5). Але при цьому виникає необхідність певного задання для таких КС усередненої атомної амплітуди, яка виконувала б роль, аналогічну ролі амплітуд  $F_i(s)$  у виразі (5). Таку процедуру можна провести таким же чином, як і при визначенні усередненого атомного фактора у виразі (4). Тобто, введемо середню атомну амплітуду атомів досліджуваного зразка як:

$$\overline{F(s)} = \sum_{i=1}^m c_i F_i(s). \quad (6)$$

$$F_i(s) \sum_{k=1}^L \sum_{i=1}^m Z_{ki}^j F_i(s) \frac{\sin sr_{ki}^j}{sr_{ki}^j} + F_i(s) \sum_{k=L+1}^K Z_k^j \overline{F(s)} \frac{\sin sr_k^j}{sr_k^j} + I_R(s). \quad (8)$$

Перехід до кожного нового атома у виразах (1) та (2) в рамках введених умов означає введення в розгляд нового типу структурного фрагмента. Надалі позначимо через  $N^j$  – кількість структурних фрагментів  $j$ -го типу в атомній сітці досліджуваного зразка. Крім того прийемо, що у структурному

Тоді, якщо загальна кількість КС, які можна виділити в атомній сітці структурних фрагментів, рівна  $K$ , то аналогічно із виразом (5) вклад усереднених КС вибраного фрагмента в дифракційну картину буде рівний:

$$F_i(s) \sum_{k=L+1}^K Z_k^j \overline{F(s)} \frac{\sin sr_k^j}{sr_k^j}. \quad (7)$$

Позначимо континуальний вклад кожного структурного фрагмента в загальну інтенсивність розсіювання електронів через  $I_R(s)$ . Тоді інтенсивність дифракційної картини, зумовлена розсіюванням електронів на одному структурному фрагменті  $j$ -го типу буде рівна:

фрагменті  $j$ -го типу центральним є атом із електронною амплітудою розсіювання  $F_j(s)$ . Тоді загальна дифракційна картина буде складатися з суми інтенсивностей розсіювання всіма структурними фрагментами атомної сітки. Враховуючи вирази (2) і (4) та введені параметри  $N^j$  і  $F_j(s)$ , цю інтенсивність можна записати:

$$I(s) = N \overline{F^2(s)} + \sum_{j=1}^M \left[ N^j F_j(s) \sum_{k=1}^L \sum_{i=1}^m Z_{ki}^j F_i(s) \frac{\sin sr_{ki}^j}{sr_{ki}^j} + N^j F_j(s) \sum_{k=L+1}^K Z_k^j \overline{F(s)} \frac{\sin sr_k^j}{sr_k^j} + N^j I_R(s) \right].$$

Зробивши прості перетворення, отримаємо:

$$I(s) = N \overline{F^2(s)} + N I_R(s) + \sum_{j=1}^M \left[ N^j F_j(s) \sum_{k=1}^L \sum_{i=1}^m Z_{ki}^j F_i(s) \frac{\sin sr_{ki}^j}{sr_{ki}^j} \right] + \sum_{j=1}^M \left[ N^j F_j(s) \sum_{k=L+1}^K Z_k^j \overline{F(s)} \frac{\sin sr_k^j}{sr_k^j} \right].$$

У практичній електронографії, як правило, аналізують інтенсивність, приведену до одного атома досліджуваного зразка. Згідно з визначенням, вона задається простим співвідношенням  $I_1(s) = I(s)/N$ .

Нагадаємо, що  $N$  – це кількість атомів у структурному фрагменті. Оскільки з кожним із цих атомів як із центральним ми поєднували структурні фрагменти різних типів, то і загальна кількість

введених у розгляд структурних фрагментів буде рівна  $N$ . Відповідно, при діленні інтенсивності  $I(s)$  на загальну кількість структурних фрагментів, які дають вклад у дифракційну картину, ми отримаємо

коефіцієнти  $c^j = N^j / N$ , які вказують відносну долю фрагментів  $j$ -го типу в атомній сітці. Тоді останній отриманий нами вираз можна записати у вигляді:

$$I_1(s) = \overline{F^2(s)} + I_R(s) + \sum_{j=1}^M \left[ c^j F_j(s) \sum_{k=1}^L \sum_{i=1}^m Z_{ki}^j F_l(s) \frac{\sin sr_{ki}^j}{sr_{ki}^j} \right] + \sum_{j=1}^M \left[ c^j F_j(s) \sum_{k=L+1}^K Z_k^j \overline{F(s)} \frac{\sin sr_k^j}{sr_k^j} \right].$$

Кінцеве співвідношення описує реальну інтенсивність розсіювання електронів аморфною речовиною з точністю, яка визначається введеними наближеннями усередненого атомного фактора та усередненої атомної амплітуди. Подальші перетворення отриманого виразу вимагають вже введення певної структурної моделі для структурних фрагментів кожного типу. Дана модель має задавати закони розподілу атомів різних хімічних елементів у кожній КС структурних фрагментів різних типів. Ці закони будуть визначати набори парціальних радіусів  $r_{kl}^j$  та парціальних координаційних чисел  $Z_{kl}^j$  для перших  $L$  КС, а також усереднених радіусів  $r_k$  та координаційних чисел  $Z_k$  для більш далеких КС.

## Висновки

Теоретично отримано математичне співвідношення для розподілу інтенсивності розсіювання електронів в електронографії через параметри структури ближнього порядку атомних сіток аморфних речовин: радіуси координаційних сфер та координаційні числа. Отриманий вираз відображає реальну дискретну природу атомних сіток в області ближнього порядку і може бути використаний для безпосереднього розрахунку функцій радіального розподілу атомів аморфних речовин в електронографії без застосування традиційного перетворення Фур'є.

- [1] Я.И. Дугчак. *Рентгенография жидких металлов*. Из-во при ЛГУ «Вища школа», Львов. 162 с. (1977).
- [2] A.C. Wright. Basic amorphography // *Coherence and energy transitions for glasses: Proc. NATO workshop*. Gambuku, pp.1-44 (1984).
- [3] D.J.H. Cockayne, D.R. McKenzie, W. McBride, C. Goringe, and D. McCulloch. *Characterization of Amorphous Materials by Electron Diffraction and Atomistic Modeling. Microscopy and Microanalysis*. **6**, pp. 329–334 (2000).
- [4] В.П. Іваницький, В.И. Сабов, М.М. Рябошук. Анализ фундаментальных основ электронографического метода функций радиального распределения атомов сложных аморфных веществ. *Structure and Properties of thin films. Proceedings of 14<sup>th</sup> international symposium*. Scientific assembly. Kharkov, pp. 216-220 (2002).
- [5] Є.І. Боркач, В.П. Іваницький, М.М. Рябошук. Роль параметрів ближнього порядку неупорядкованої атомної сітки у формуванні структурного фактора аморфних речовин// *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*. **8**(3), pp. 1001 – 1010 (2010).
- [6] S.R. Elliott. *Physics of amorphous materials*. Longman Scientific and Technical. London. 481с. (1990).
- [7] М.А. Popescu. Non-crystalline chalcogenides // *Solid-state science and technology library*. Kluwer Academic Publishers. Dordrecht. **8**.378 с. (2000).

G.M. Ivanitska, V.S. Kovtunenکو, V.M. Kryshenik, V.M. Rubish

## Theoretical Analysis of Elastic Electron Scattering by Atomic Networks of Amorphous Materials

Uzhgorod national university, Kapitulna street, 13, Uzhgorod, 88000

General mathematical correlation is got for electron diffraction intensity on the amorphous materials through the direct structural parameters of co-coordinating spheres of disordered atomic networks. This expression can be used for the direct calculation of radial distributing functions without application of traditional Fourier transformation.