

**Наука III тисячоліття:
пошуки, проблеми, перспективи розвитку**

duration of etching. Such estimation enables to consider the obtained structures as the standard specimens for a full-scale production.

References

1. Tiginyanu, Ion, et al. "Metallized porous GaP templates for electronic and photonic applications." *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, vol.4.3, pp. 57-62, 2015.
2. Langa, S., et al. "Uniform and nonuniform nucleation of pores during the anodization of Si, Ge, and III-V semiconductors," *Journal of The Electrochemical Society*, vol.152.8, pp. 525-531, 2005.
3. Vambol, S., et al. "Research into regularities of pore formation on the surface of semiconductors," *EasternEuropean Journal of Enterprise Technologies*, vol. 3 (5), pp. 37-44, 2017.
4. Monaico, Ed., et al. "Porosification of III-V and II-VI semiconductor compounds," *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*, vol. 9.2 pp, 307-311, 2014.
5. Sychikova, Ya A., V. V. Kidalov, and G. A. Sukach. "Dependence of the threshold voltage in indium-phosphide pore formation on the electrolyte composition," *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, vol. 7.4, pp. 626-630, 2013.
6. Santinacci, L., et al. "Investigations of the Anodic Porous Etching of n-InP in HCl by Atomic Absorption and X-ray Photoelectron Spectroscopies," *Journal of The Electrochemical Society*, vol.165.4, pp. H3131-H3137, 2018.
7. Morphologies and Photoluminescence Properties of Porous n-InP / Ya.O. Suchikova, S. Vambol, V. Vambol et al. // 2017 IEEE 7th International Conference on Nanomaterials: Applications & Properties (NAP - 2017). - Zatoka, September 10-15, 2017. - P. 01PCSI17. - DOI: 10.1109 / NAP.2017.8190154

ПРУЖНІ ВЛАСТИВОСТІ МЕТАЛЕВОГО СКЛА Ni

Автори

(Білошапка В.Я., канд.фіз.-мат. н., доцент;

Піменов Д.О., старший лаборант)

Бердянський педагогічний університет, Бердянськ, Україна

Перехід із рідини в скло є однією з складних проблем фізики конденсованого стану. Оскільки об'ємне металеве скло (ОМС) не має трансляційної симетрії, йому притаманний ізотропний стан структурних та пружних властивостей. Атомна структура ближнього порядку впливає на їх механічні та пружні властивості. У зв'язку з цим знання тензору модуля пружності та температурної залежності констант пружності необхідне для детального розуміння властивостей ОМС. У роботі вивчені температурні залежності констант пружності металевго скла Ni методами молекулярної динаміки (МД). Розраховані константи пружності у кристалічному стані і стані скла в інтервалі температур 0-700K. Для опису міжатомної взаємодії в процесі моделювання використовувався метод зануреного атома [1]. На систему, що містила 5324 атома, накладались періодичні граничні умови. Система знаходилась при постійному тиску $p = 1000 \text{ Па}$, яка

II Міжнародна науково-практична інтернет-конференція (25-26 квітня 2018 р., м. Бердянськ)

забезпечувалась зміною загального об'єму. Часовий інтервал складав $2 \cdot 10^{-15}$ с. Для отримання ОМС кристал нагрівали до $T \gg T_{пл}$. Після цього кристал охолоджувався з швидкістю більшою ніж 10^{10} К/с. При швидкостях охолодження більших ніж 10^{13} К/с вплив швидкості охолодження на структуру був відсутній. На рис. 1 метастабільному стану скла відповідає ділянка на верхній кривій зворотного ходу в інтервалі температур 0-1000 К. Температура скловання при цьому знаходилась в діапазоні 1120 - 1150 К. Об'ємний модуль B (bulk modulus) та модуль зсуву (shear constant) C' розраховувались згідно наступних виразів

$$\begin{aligned} \nu_B &= \frac{a_0^2}{9V} \frac{\partial^2 E}{\partial a^2} \\ &\sim 4V \frac{da^2}{da^2} \quad \quad \quad 9V \frac{\partial^2 E}{\partial a^2} \end{aligned}$$

де a - середнє значення решіткової константи в деформованому стані, a_0 - значення у рівноважному стані. V та E - об'єм та енергія на атом

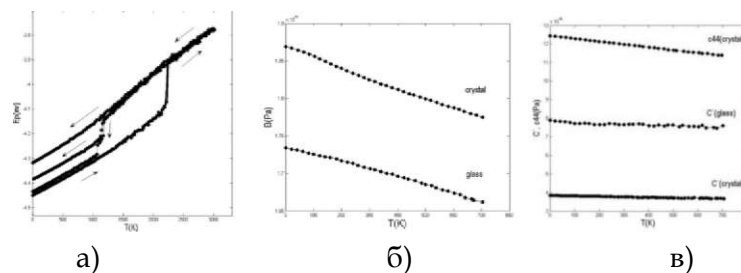


Рисунок 1 - Температурні залежності: а) середньої потенційної енергії на атом при прямому (нагрівання) та зворотному (охолодження) ходах; б) об'ємних модулів; в) сталих пружності C і C_{44} у кристалічному та аморфному стані

При розрахунку B створювалась деформація усестороннього стиснення. Для розрахунку C стиснення створювалось уздовж напрямку 100 (вісь X), а розтягнення - вздовж напрямку 010 (вісь Y) зі збереженням об'єму. Значення C_{44} для кристалу розраховувалось також як і для C' , однак тепер напрям 110 ГЦК решітки співпадав з напрямом осі X , а 1-10 - з віссю Y . Температурні залежності пружних модулів скла та кристала, які зображені на рис. 2 близькі до лінійних. Значення B у склі на 6-7% менше ніж у кристалі. Значення C' і C_{44} у аморфному стані не відрізняються, що свідчить про ізотропну структуру скла. Обчислення пружних сталих виконано у інтервалі температур, при яких пластична деформація була відсутня. Значення сталих пружності c_{ii} та C_{12} отримувалися з системи рівнянь:

$$\begin{aligned} B &= \frac{(c_{11} + 2c_{12})}{3} \\ C' &= \frac{c_{11} - c_{12}}{2} \end{aligned}$$

Отримані $c_{ii}(T)$, $c_{12}(T)$ для металевого скла дозволяють обчислити температурні залежності таких важливих характеристик матеріалу як: модуль Юнга, коефіцієнт Пуасона, параметр Грюнайзена, температура Дебая.

Література

1. M. S. Daw and M. I. Baskes, Phys. Rev. Lett., 50: 1285 (1983).