

Расчет энергетических характеристик точечных дефектов в двумерных твердых растворах. Статическая модель.

Суппес В.Г., Дудник Е.А.

Кузбасская государственная педагогическая академия

Новокузнецк, Россия

Рубцовский индустриальный институт

Рубцовск, Россия

В данной работе рассмотрена возможность использования компьютерной модели для изучения энергетических характеристик точечных дефектов в двумерных твердых растворах (тонких пленках) при проведении лабораторного практикума по курсу общей физики.

Рассматриваются статическая и динамическая модели.

Модель расчетной ячейки представляет двумерный срез кристалла в направлении $\{111\}$ ГЦК решетки. Предполагается, что атомы сорта А и В, выбранного твердого раствора (Ni_3Al , Ni_3Fe , Cu_3Au), находятся в узлах жесткой гексагональной двумерной кристаллической решетки. Определяется размер расчетного блока атомов, накладываются периодические граничные условия. Взаимодействие между атомами задаются парным центральным потенциалом Морза с параметрами, взятыми из [1]:

D, b, a – параметры потенциала:

$$j(r) = D \cdot b \cdot e^{-ar} (b \cdot e^{-ar} - 2), \quad (1)$$

где r – расстояние между парой атомов.

Энергия системы записывается в виде:

$$E = - \sum_{i=1}^N [N_{AB}^i j_{AB}^i + N_{AA}^i j_{AA}^i + N_{BB}^i j_{BB}^i], \quad (2)$$

где $j_{AA}^i, j_{AB}^i, j_{BB}^i$ – взятые с обратным знаком энергии взаимодействия пар отдельных атомов АА, АВ, ВВ в двумерном кристалле на расстоянии, равном радиусу i -той координационной сферы; $N_{AA}^i, N_{AB}^i, N_{BB}^i$ – число связей пар атомов в двумерном кристалле на расстоянии, равном радиусу i -той координационной сферы.

литература

1. Орлов А.Н. Энергия точечных дефектов в кристаллах. - М: Энергоатомиздат, 1983, -81с.
2. Суппес В.Г., Дудник Е.А. Компьютерный эксперимент в курсе общей физики// Успехи современного естествознания.- М.-«Академия Естествознания».-2003.-№11.-с.130-131.
3. Суппес В.Г., Полетаев Г.М. Компьютерный лабораторный практикум по молекулярной физике // Физическое образование в вузах. - М.-«Издательский дом МФО».-2003.-Т.9.-№2.-с.113-124.

