

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ И ИХ КОМПЛЕКСОВ В ДВУМЕРНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ

В.Г.Супнес, Бондарева Ю.

Кузбасская государственная педагогическая академия
Новокузнецк, Россия.

В данной работе моделируются двумерные кристаллические структуры твердых растворов типа Ni_3Al , содержащие точечные дефекты и их комплексы. В работе исследуется возможность образования комплексов вакансий (например Al-Ni, Al-Al и т.д) в зависимости от номера координационной сферы, а также поле смещений атомов вблизи точечных дефектов при различных температурах. Ниже приведены результаты компьютерного эксперимента полученные для системы Ni_3Al при различных температурах для расстояния между вакансиями равном трем координационным сферам..

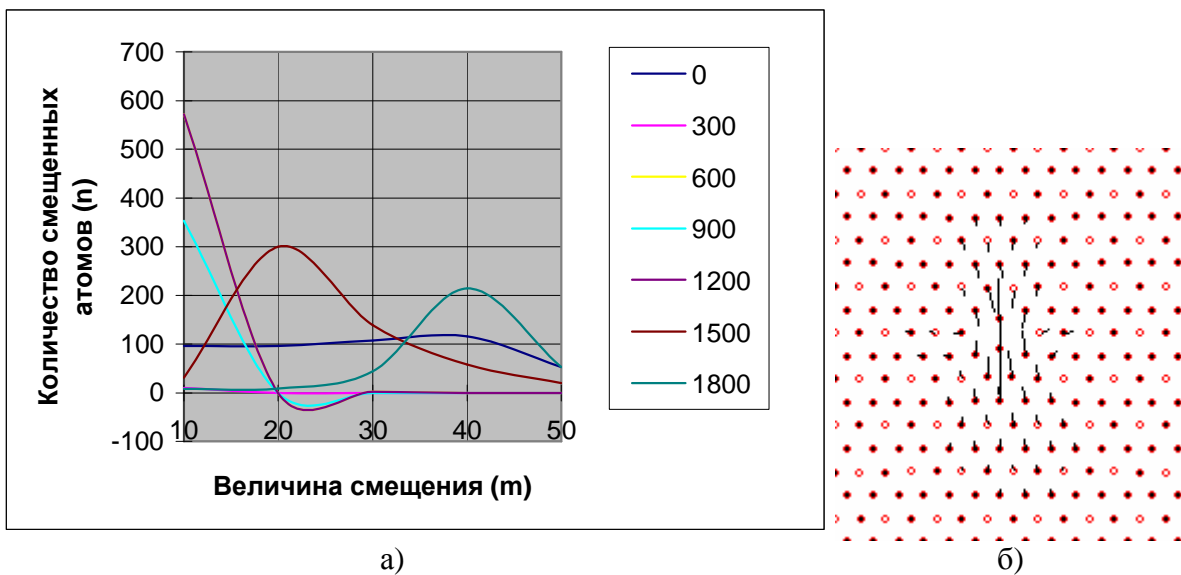


Рис.1. Характер распределения смещений атомов вблизи комплекса Ni-Ni при различных температурах; б) поле смещений атомов вблизи комплекса при $300^{\circ} K$.

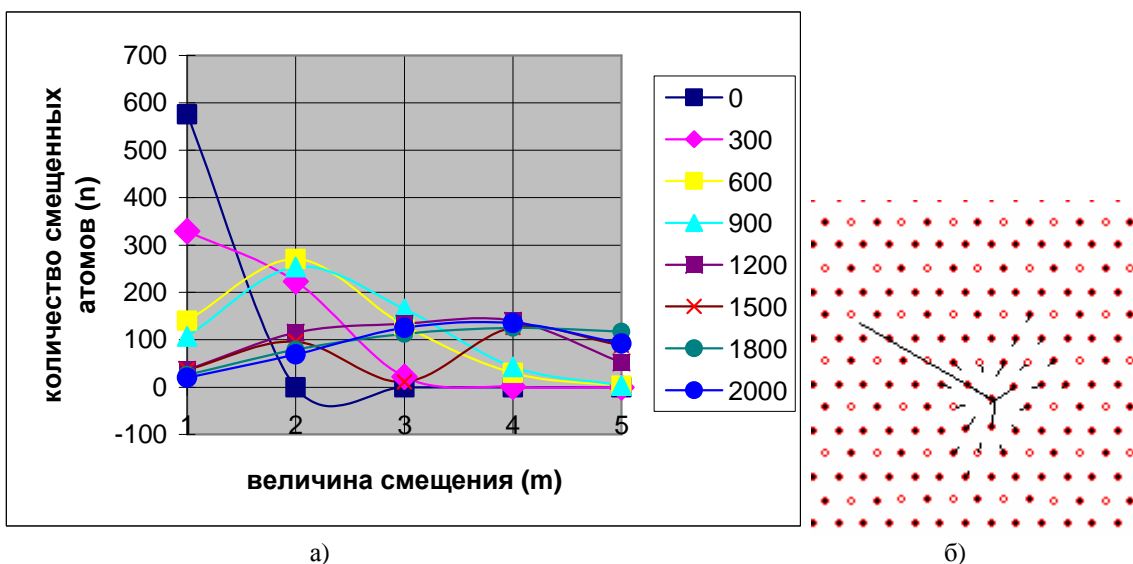


Рис.2. а)Характер распределения смещений атомов вблизи комплекса Ni-Al при различных температурах; б) поле смещений атомов вблизи комплекса при $300^{\circ} K$.

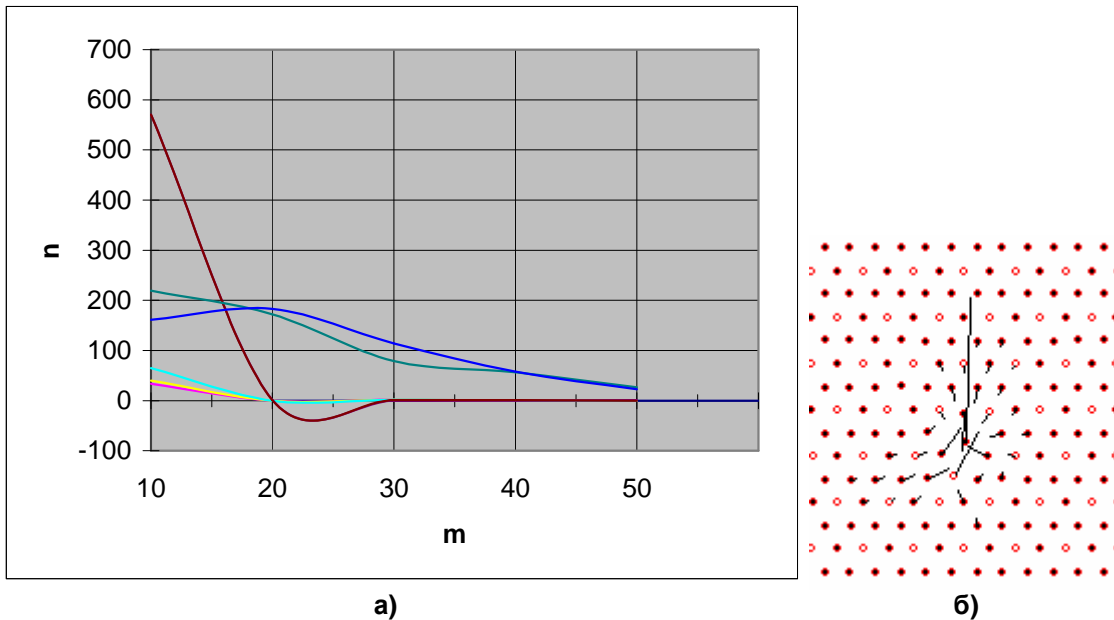


Рис.3. а) Характер распределения смещений атомов вблизи комплекса Al-Al при различных температурах. б) поле смещение атомов вблизи комплекса при 300⁰К.

Образуются комплексы вакансий:

Al-Al при номере координационной сферы 3 и не образуются при номерах 1,2,4,5,6,7,8;

Ni-Ni при следующих номерах координационных сфер 1,2,3,4,5 и не образуются при номерах координационных сфер 6,7,8;

Ni-Al при номерах координационных сфер 5,4,2,1 и не образуются при номерах 3,6,7,8.