

# ИССЛЕДОВАНИЕ УСЛОВИЙ ОБРАЗОВАНИЯ КОМПЛЕКСОВ ВАКАНСИЙ В ДВУМЕРНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ НА КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛИ.

Суппес В.Г.

Кузбасская государственная педагогическая академия

Новокузнецк, Россия

В данной работе рассматривается одна из программ компьютерного лабораторного комплекса по физике твердого тела [1-4]. Студентам выдается одно из следующих заданий:

1. Исследовать условия образования комплексов вакансий различного типа в зависимости от расстояния между ними (номер координационной сферы) для твердого раствора  $\text{Ni}_3\text{Al}$ .

2. Исследовать условия образования комплексов вакансий различного типа в зависимости от расстояния между ними (номер координационной сферы) для твердого раствора  $\text{Ni}_3\text{Fe}$ .

3. Исследовать условия образования комплексов вакансий различного типа в зависимости от расстояния между ними (номер координационной сферы) для твердого раствора  $\text{Cu}_3\text{Au}$ .

4. Изучение изменений энергии системы при наличии вакансионных комплексов различного типа и различной конфигурации.

Приведенные выше задания не исчерпывают возможностей программы.

Рассмотрим порядок выполнения одного из таких заданий:

## **Исследовать условия образования комплексов вакансий различного типа для твердого раствора $\text{Cu}_3\text{Au}$ .**

Порядок выполнения

1. Запустить программу **smvtr.exe**.
2. Выбрать твердый раствор ( $\text{Ni}_3\text{Al}$ ,  $\text{Ni}_3\text{Fe}$ ,  $\text{Cu}_3\text{Au}$ ).
3. Задать размеры расчетной ячейки. Для этого необходимо задать число атомов в рядах ячейки по осям  $X$  и  $Y$  (рекомендуется примерно  $24 \times 24$ ) (минимальное значение по осям  $X$  и  $Y$  - 12, максимальное - 100).
4. Задать число вакансий в окне "Число вакансий" (минимальное значение - 0, максимальное - 2).
5. Если число вакансий будет равно 2, то необходимо задать расстояние между вакансиями, равное радиусу координационной сферы (минимальное значение - 1, максимальное - 5).
6. Если есть вакансии, тогда необходимо выбрать тип вакансий из списка ( $\text{Ni}$ ,  $\text{Al}$ ,  $\text{Fe}$ ,  $\text{Cu}$ ,  $\text{Au}$ , или их комплексы- $\text{Ni-Ni}$ ,  $\text{Al-Al}$ ,  $\text{Fe-Fe}$ ,  $\text{Ni-Al}$ ,  $\text{Cu-Au}$ ,  $\text{Ni-Fe}$ ). Если нет конфигурации с соответствующей сортам атомов и заданному расстоянию, то выдается сообщения об ошибке. Например, в сплаве  $\text{Ni}_3\text{Al}$  возможна конфигурация с дивакансией типа  $\text{Al-Al}$  только на расстоянии, равном третьей координационной сферы.
7. Для ввода данных нажать кнопку "Установить параметры".

8. Запуск эксперимента осуществляется нажатием кнопки "Пуск". В результате расчета можно получить значение полной энергии системы.
9. Задавая различные расстояния между вакансиями и повторяя пункты 4-7 получить значение энергии системы в зависимости от количества вакансий и расстояния между ними. Записать полученные значения в таблицу.
10. Вычислить значение энергии «разорванных» межатомных связей для атома сорта А (или сорта В):

$$E_v^A = E_f^A - E_i$$

11. Найти значения энергии образования вакансии сорта А (или сорта В)  $E_d^A$  соответственно равна разности энергий кристалла, содержащего вакансию типа А  $E_f^A$ , и идеального кристалла  $E_i$ , за вычетом половины энергии связей, восстановившихся на поверхности кристалла:

$$E_d^A = E_f^A - E_i - \frac{E_v^A}{2}.$$

Энергией образования вакансии называется разность энергий кристалла, содержащего заданное число  $N$  атомов и одну вакансию, и бездефектного кристалла, содержащего то же количество атомов.

12. Вычислить значения энергии образования дивакансии типа АВ  $E_{2d}^{AB}$  соответственно равна разности энергий кристалла, содержащего вакансию, и идеального кристалла, за вычетом половины энергии связей, восстановившихся на поверхности кристалла:

$$E_{2d}^{AB} = E_f^{AB} - E_i - \frac{E_v^A}{2} - \frac{E_v^B}{2}.$$

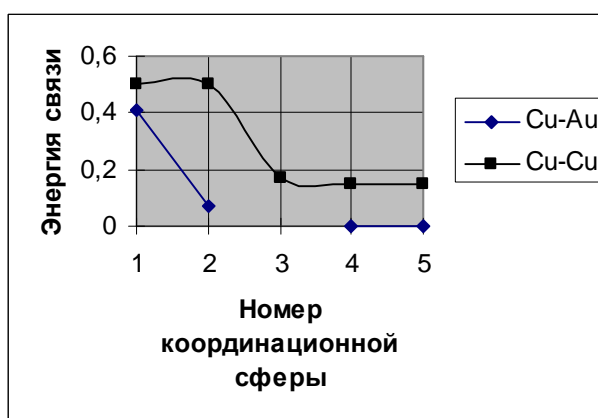
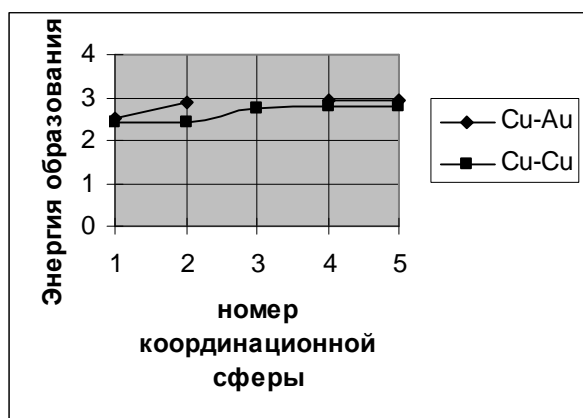
13. Вычислить значения энергии связи двух одиночных вакансий в дивакансию  $E_s$ :

$$E_s = E_d^A + E_d^B - E_{2d}^{AB}.$$

14. Построить график изменения энергии связи двух одиночных вакансий в комплексе в зависимости от расстояния между вакансиями. Для обработки компьютерного эксперимента использовать электронные таблицы или среду MathCad.
15. Сравнить полученное значение со справочным.

### Результаты эксперимента (Система $\text{Cu}_3\text{Au}$ )

тип вакансий	число вакансий m	$E_0$ , эВ энергия идеального кристалла	$E$ , эВ Энергия системы	$E_1$ , эВ энергия разорванных связей	$E_2$ эВ энергия образования	$E_3$ , эВ энергия связи	Расстояние между вакансиями n
Cu	0	-823,829					0
	1		-821,041	2,788	1,394		0
Au	1		-820,747	3,082	1,541		0
Au-Au	2		-817,694		3,053	-0,118	3
Cu-Au	2		-818,369		2,525	0,41	1
			-818,03		2,864	0,071	2
							3
			-817,962		2,932	0,003	4
			-817,961		2,933	0,002	5
Cu-Cu	2		-818,61		2,431	0,504	1
			-818,311		2,436	0,499	2
			-818,277		2,764	0,171	3
			-818,257		2,784	0,151	4
			-818,254		2,787	0,148	5



а)

б)

Рис.1. а) Энергия образования комплексов вакансий в зависимости от расстояния между вакансиями; б) Энергия связи в зависимости от расстояния между вакансиями.

### Литература

1. Суппес В.Г., Полетаев Г.М. Компьютерный лабораторный практикум по молекулярной физике. Ж."Физическое образование в вузах" Издательский дом МФО 2003г., Т.9, №2, с.113-124.
2. Суппес В.Г., Полетаев Г.М. Компьютерный лабораторный практикум по молекулярной физике. Сб. науч. трудов "Проблемы учебного физического эксперимента" МММ., ИОСО РАО 2003, с.80-82.

3. Суппес В.Г. О компьютерном лабораторном практикуме. Межвузовский сборник научных статей под редакцией В.П.Горшенина, И.В.Резанович. Профессиональное мастерство: становление, формирование и развитие. Челябинск, Издательство ЮУрГУ, 2003, С.172-178.
4. Суппес В.Г., Старостенков М.Д., Дудник Е. А. О направлениях обучения с использованием компьютеров. Ж."Физическое образование в вузах" Издательский дом МФО 2004г., Т.10, №2, с.76-83.