

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

Суплес 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  $Ni_3Al$ .

2. Исследовать условия образования комплексов вакансий различного типа в зависимости от расстояния между ними (номер координационной сферы) для твердого раствора  $Ni_3Fe$ .

3. Исследовать условия образования комплексов вакансий различного типа в зависимости от расстояния между ними (номер координационной сферы) для твердого раствора  $Cu_3Au$ .

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 $Cu_3Au$ .**

Порядок выполнения

1. Запустить программу **smvtr.exe**.
2. Выбрать твердый раствор ( $Ni_3Al$ ,  $Ni_3Fe$ ,  $Cu_3Au$ ).
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 ( $Ni$ ,  $Al$ ,  $Fe$ ,  $Cu$ ,  $Au$ , или их комплексы- $Ni-Ni$ ,  $Al-Al$ ,  $Fe-Fe$ ,  $Ni-Al$ ,  $Cu-Au$ ,  $Ni-Fe$ ). Если нет конфигурации с соответствующей сортам атомов и заданному расстоянию, то выдается сообщения об ошибке. Например, в сплаве  $Ni_3Al$  возможна конфигурация с дивакансией типа  $Al-Al$  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:

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

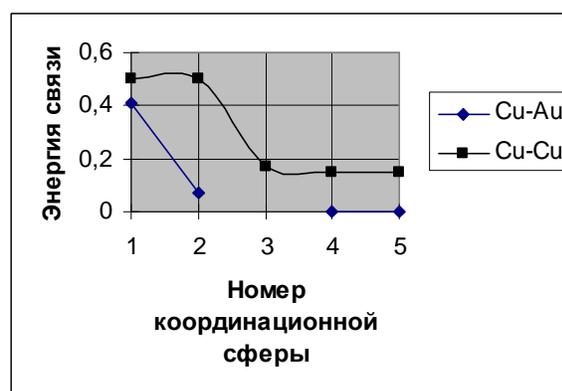
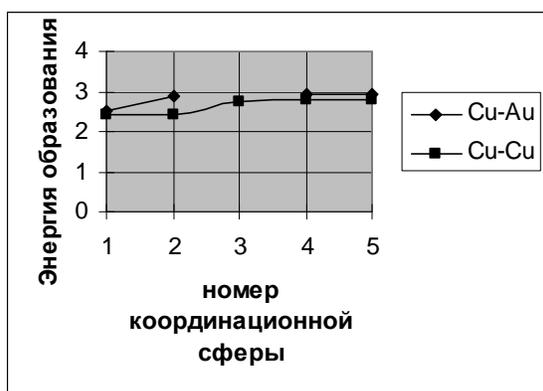
13. Вычислить значения энергии связи двух одиночных вакансий в дивакансию  $E_s$ :

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

14. Построить график изменения энергии связи двух одиночных вакансий в комплекс 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<br>энергия идеального кристалла | $E$ , эВ<br>Энергия системы | $E_1$ , эВ<br>энергия разорванных связей | $E_2$ эВ<br>энергия образования | $E_3$ , эВ<br>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. Супес 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. Супес 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.