

3. Акушский И.Я., Юдицкий Д.М., Машинная арифметика в остаточных классах. – М.: Советское радио, 1968 – 440 с.

4. Добеши И. Десять лекций по вейвлетам. Интернет: <http://books.forcesite.ru>

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

Суплес В.Г.

Кузбасская государственная педагогическая академия, Новокузнецк

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 24×24) (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 сортом атомов и заданному расстоянию, то выдается сообщение 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 A (или сорта B):

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

11. Найти значения энергии образования вакансии сорта A (или сорта B) E_d^A соответственно равна разности энергий кристалла, содержащего вакансию типа A 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 AB 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 :

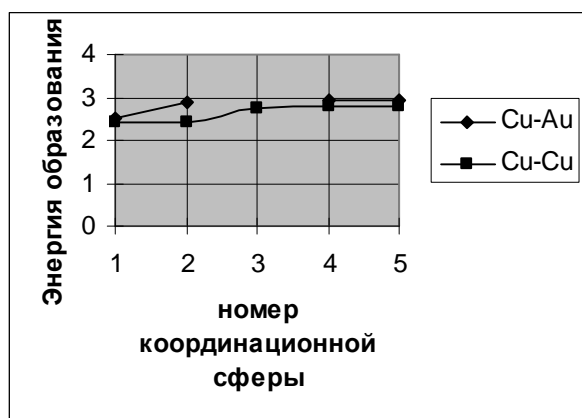
$$E_s = E_d^A + E_d^B - E_{2d}^{AB}$$

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.

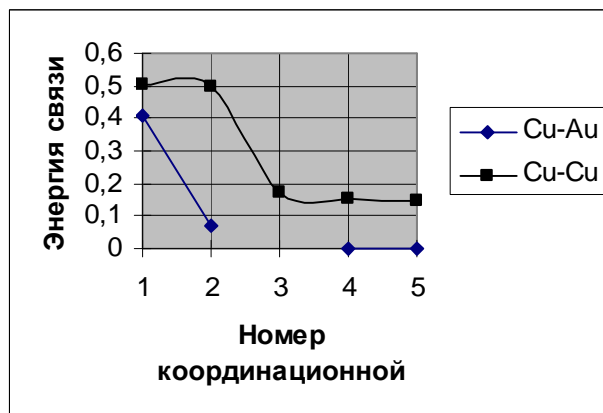
15. Сравнить полученное значение со справочным.

Таблица 1. Результаты эксперимента (Система Cu₃Au)

| тип вакансий | число вакансий m | E0, эВ энергия идеального кристалла | E, эВ Энергия системы | E1, эВ энергия разорванных связей | E2 эВ энергия образования | E3, эВ энергия связи | Расстояние между вакансиями p |
|--------------|------------------|-------------------------------------|-----------------------|-----------------------------------|---------------------------|----------------------|-------------------------------|
| 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)

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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 ком-

пьютеров. Ж."Физическое образование в вузах" Издательский дом МФО 2004г., Т.10, №2, с.76-83.

ИНТУИТИВНЫЕ ОБЪЕКТЫ

Фельдман Я.А.

В программировании различают *физические* и *логические* структуры данных. Но пользователи мыслят структурами более высокого уровня, назовем их *интуитивными* (термин мой). Известны интуитивные структуры: объекты OLAP и объекты TreeLogu. Предлагаю свой вариант: *интуитивные объекты*.

Параметр или *типовой элемент данных* это пара (имя, формат). *Элемент данных* это пара (параметр, значение) У интуитивного объекта всегда есть набор элементов данных. Набор (упорядоченный список) типовых элементов это *тип*. Для таких типов