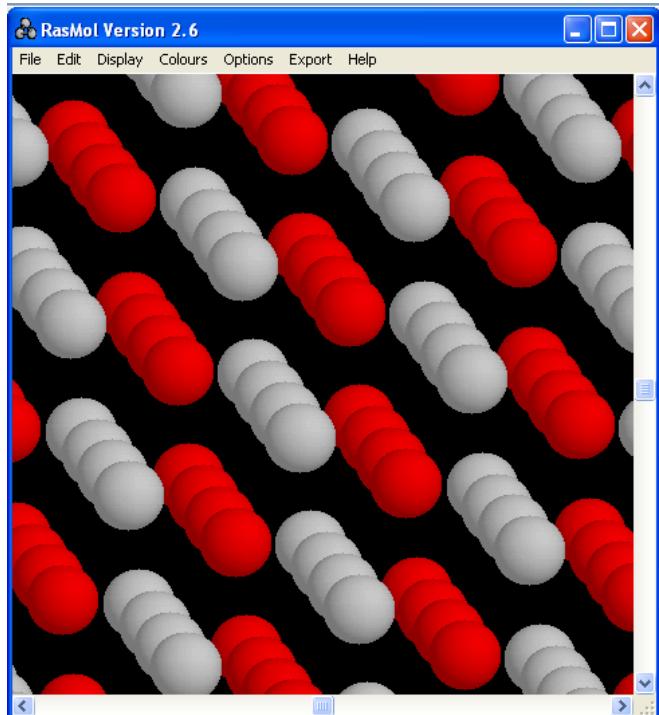


Лекция 4

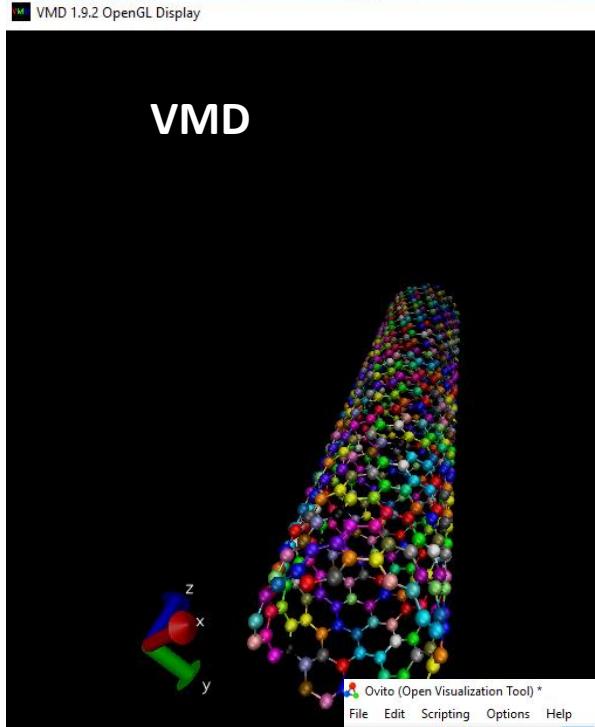
Методы анализа структуры твёрдых тел

Программы визуализации

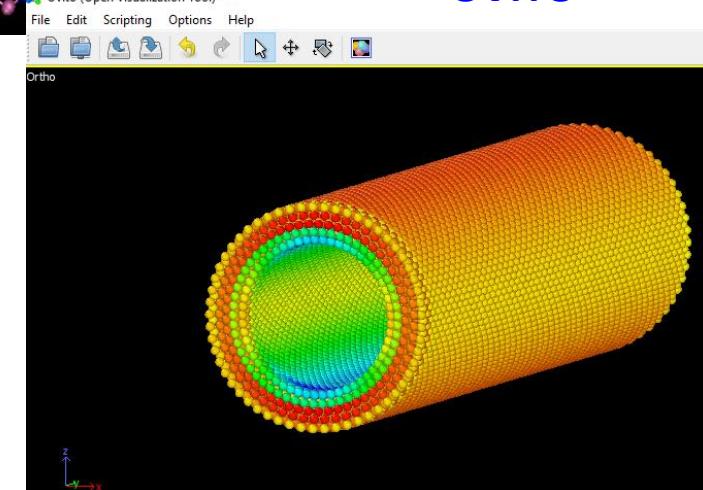
RasMol



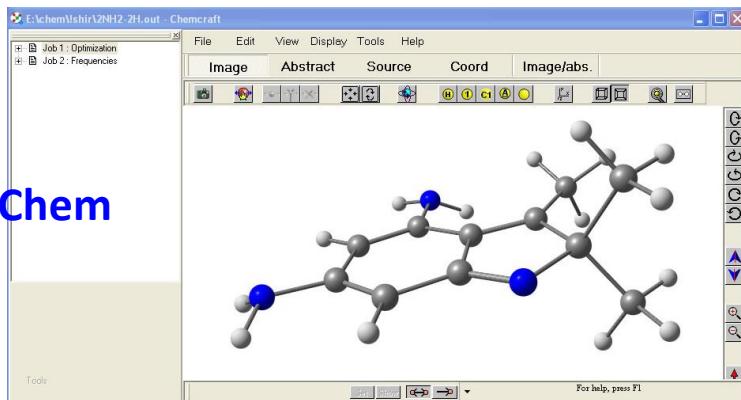
VMD



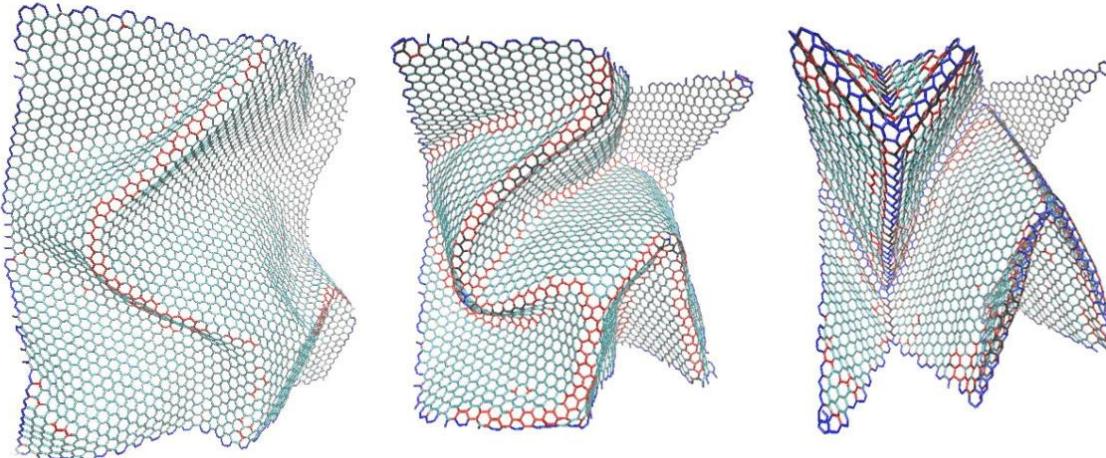
OVITO



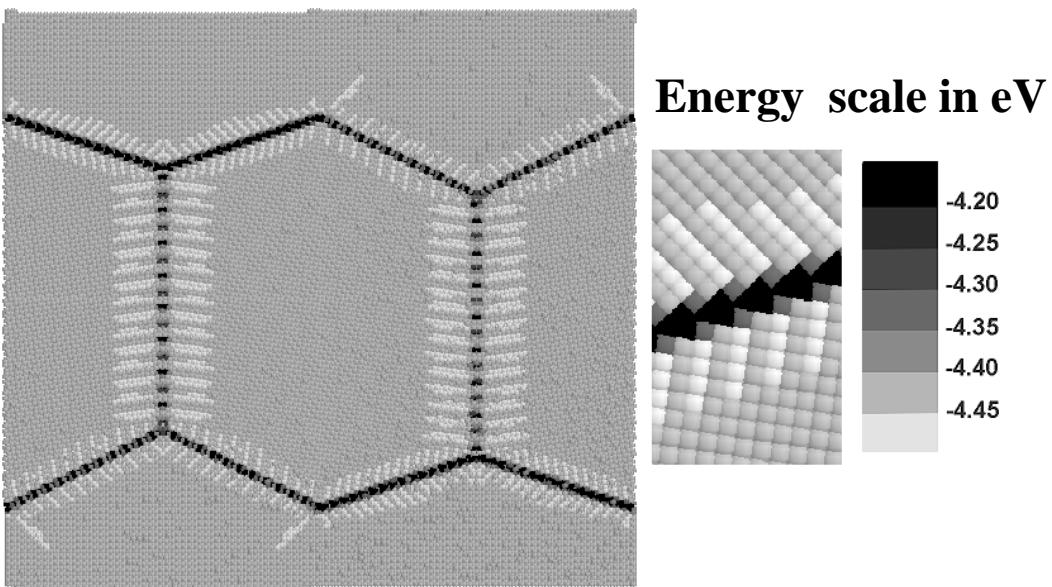
PhysChem



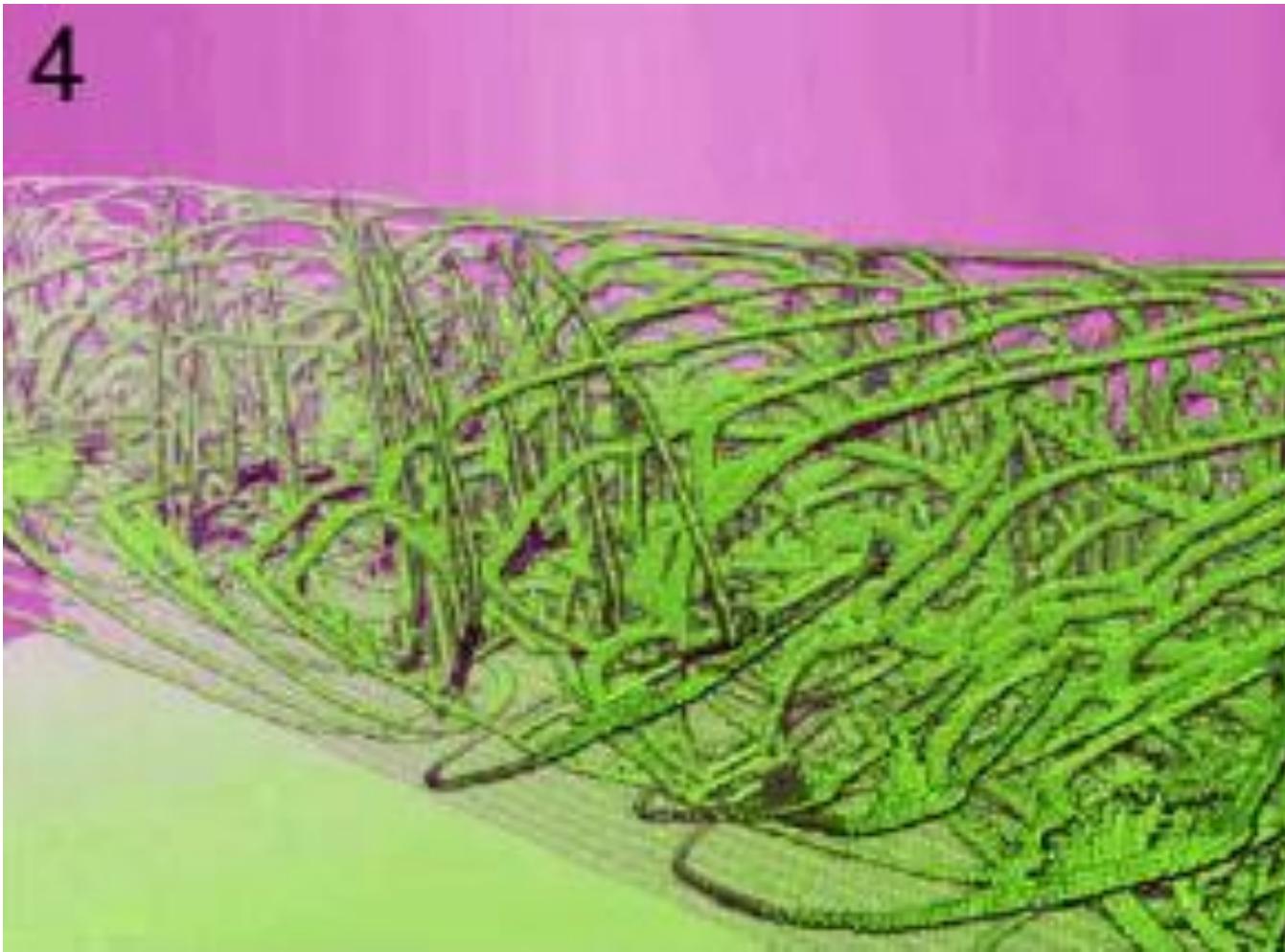
Энергетическая карта



Потенциальная энергия атомов: зеленые $-7.8 < E < -7.25$; красные $-7.25 < E < -6.93$; черные $-6.9 < E < -6.6$ и синие $E > -6.6$



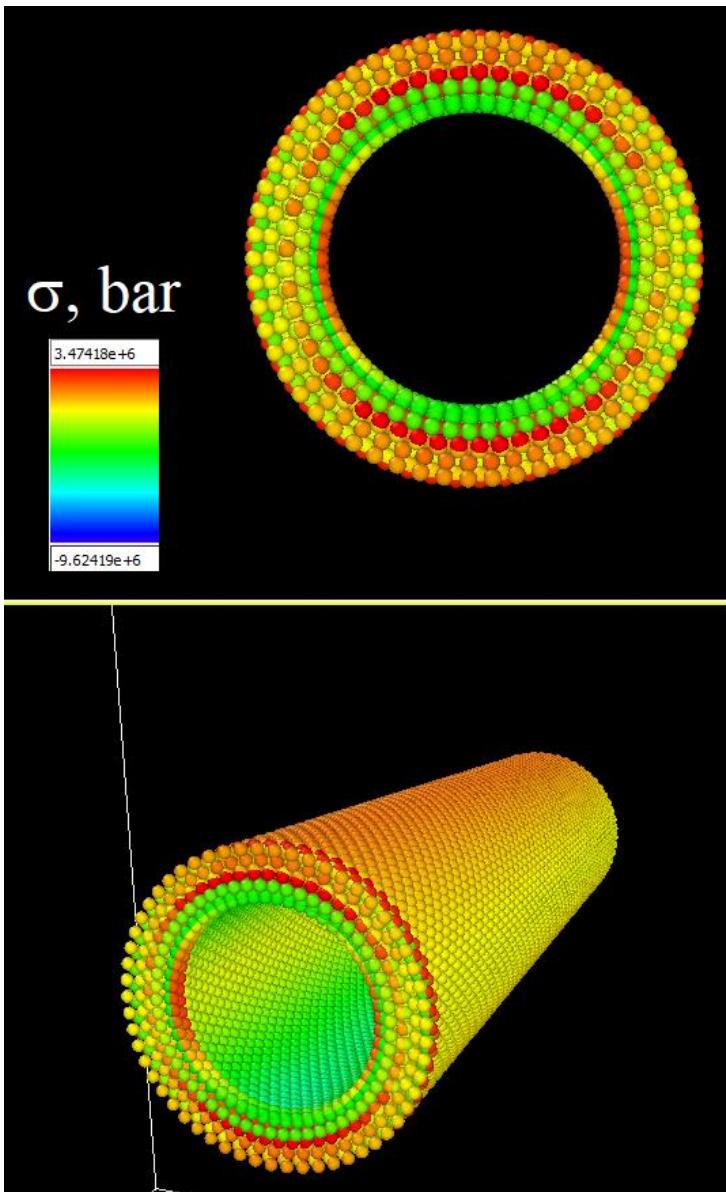
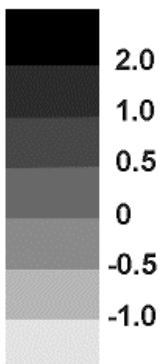
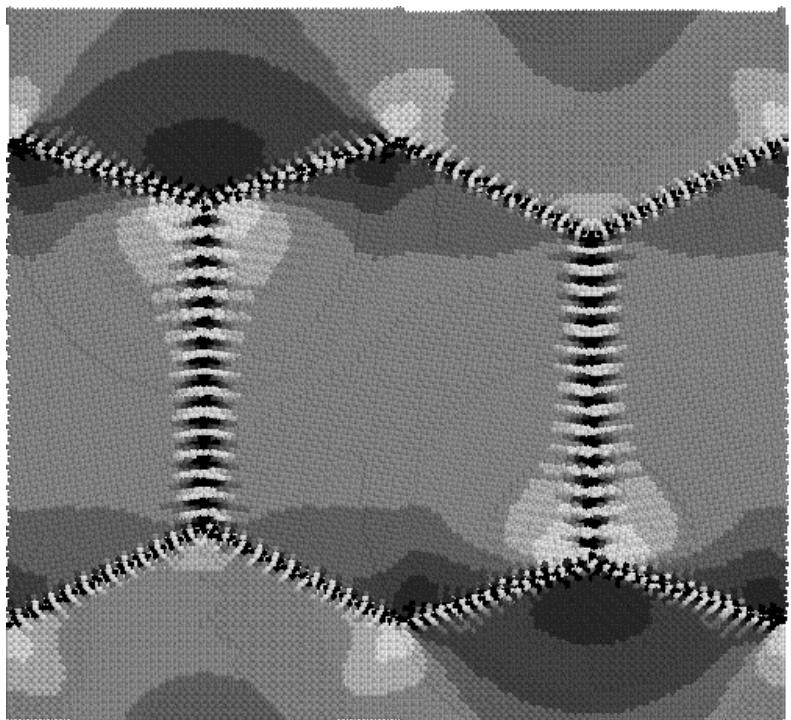
Визуализация дислокаций по энергиям атомов



Карта напряжений

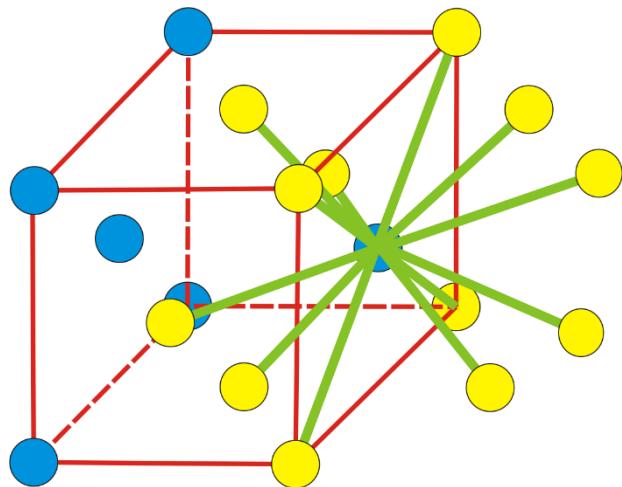
.....-1000.....-500.....0.....500.....1000.....2000

/Stress scale in MPa

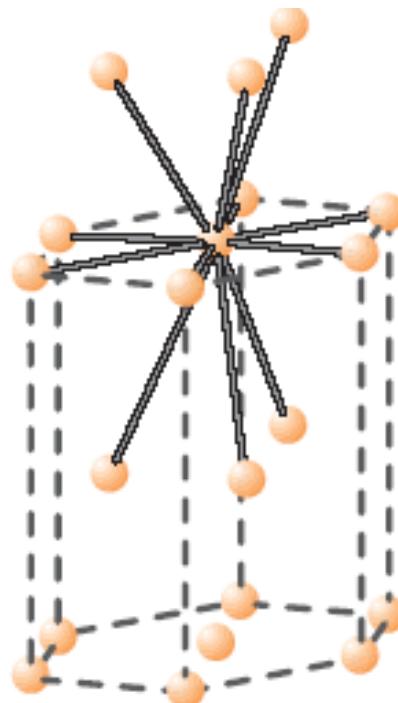


Координационное число атомов

г.ц.к. $z=12$



г.п.у. $z=12$

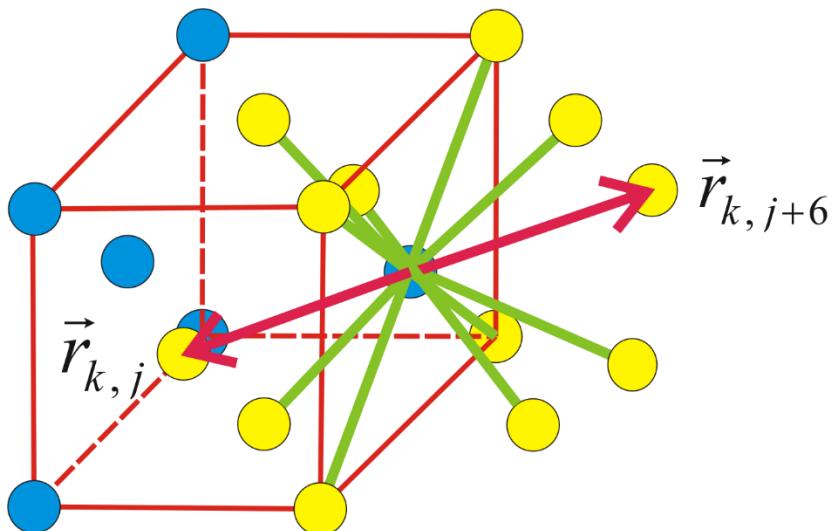


Обнаруживает фаз. перех. пор-к-беспор-к

Не отличает г.ц.к. от г.п.у.

Параметр локальной центральной симметрии

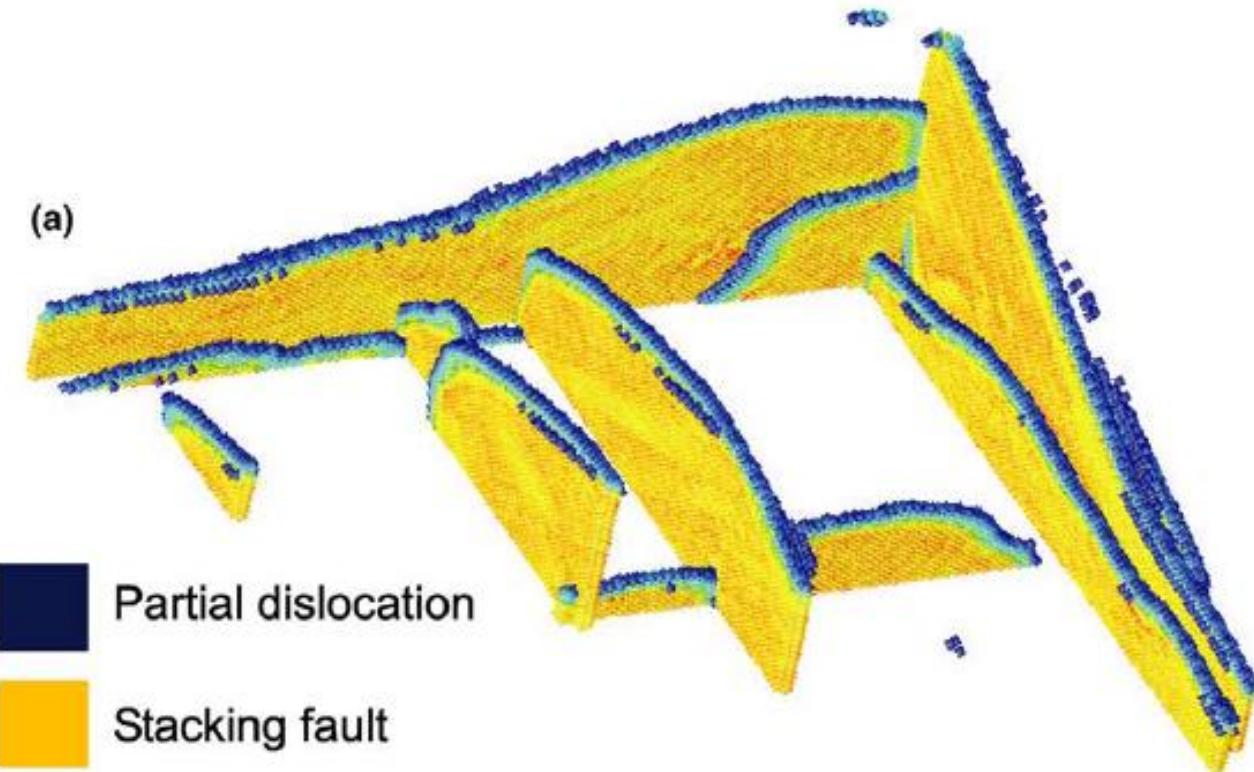
$$c_i = \sum_{j=1}^6 \left\{ \left| \sum_{k=1}^3 (r_{k,j} + r_{k,j+6}) \right|^2 \right\}$$



Значения параметра в меди

Дефект	c (\AA^2)	Δc (\AA^2)
Совершенная решетка	0.00	$c < 0.1$
Частичная дислокация	1.86	$0.1 < c < 5$
Дефект упаковки	6.49	$5 < c < 18$
Атом на поверхности	22.06	$c > 18$

Пример использования метода анализа центросимметрии



Частичные дислокации и дефекты упаковки в меди

Анализ общих соседей атомов

Метод основан на определении конфигурации общих соседей каждой выбранной пары атомов и сопоставлении каждой конфигурации совокупностью четырех целых чисел.

1-е число показывает, являются ли атомы выбранной пары ближайшими соседями

(1) или нет (2);

2-е число равно числу общих ближайших соседей пары;

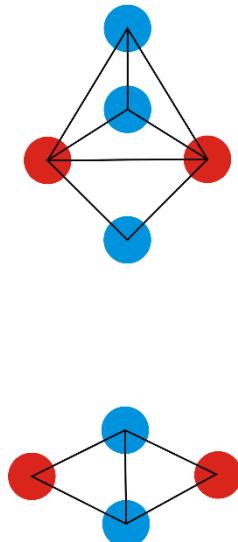
3-е число равно число связей между общими соседями пары;

4-е число дает число связей в самой длинной непрерывной цепочке, соединяющей общих соседей.

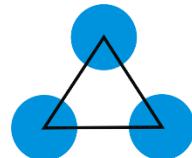
Используется для определения окружения атомов и различия г.ц.к. и г.п.у. окружения.

Произвольно выбранный атом в г.ц.к. решетке образует со своими 12 ближайшими соседями только пары типа 1421, тогда как в г.п.у. решетке имеются по шесть пар типов 1421 и 1422.

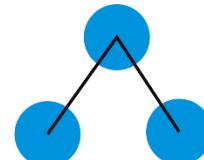
Графическая интерпретация пар



2101



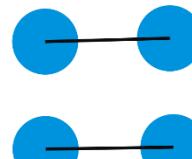
2211



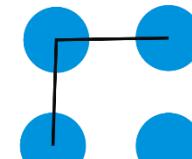
1321



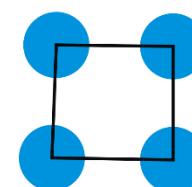
2331



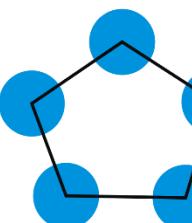
1421



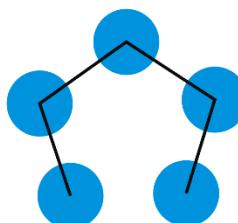
1422



2441

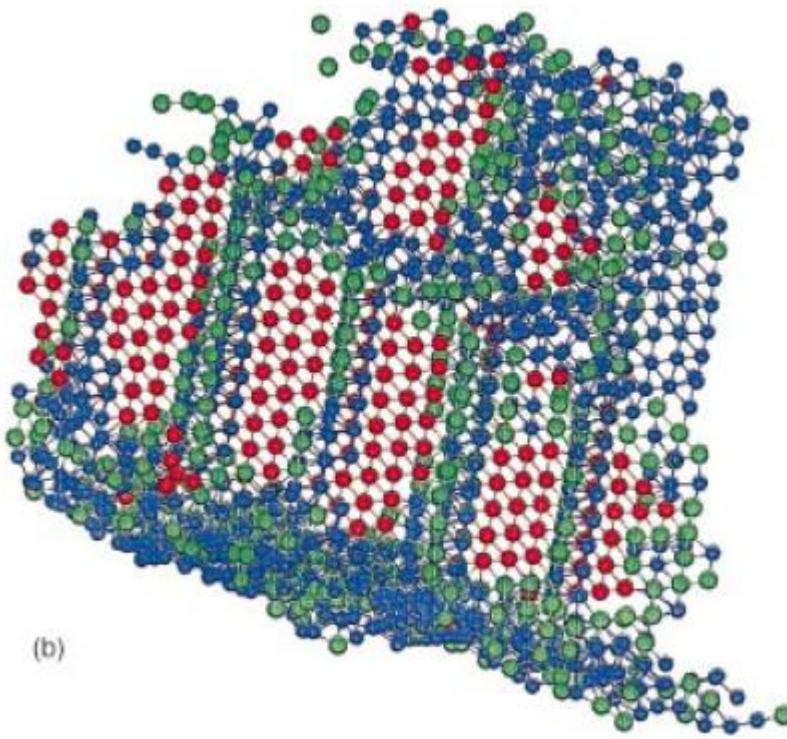


1551



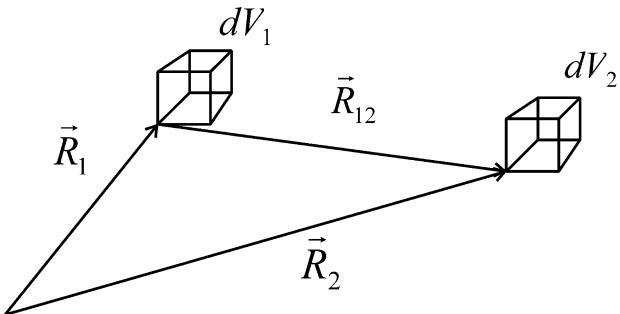
1541
10

Пример использования метода



Серые атомы - г.ц.к., красные - г.п.у., зеленые-другие атомы с $z=12$, синие - атомы с другой координацией

Радиальная функция распределения (РФР)



Без корреляции:

$$dP(\vec{R}_1, \vec{R}_2) = \frac{dV_1}{V} \frac{dV_2}{V}$$

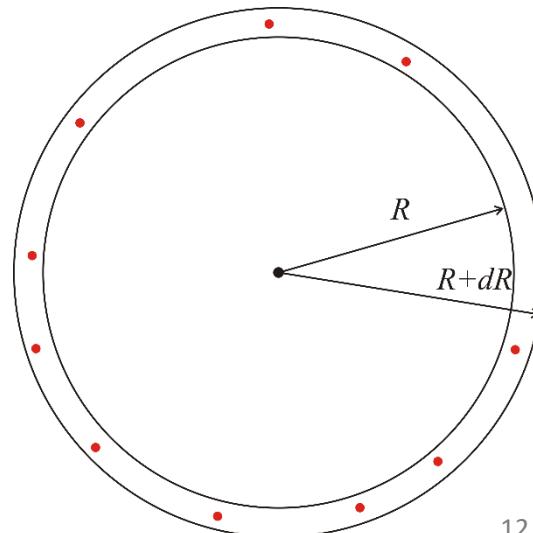
С корреляцией (g-парная КФ):

$$dP(\vec{R}_1, \vec{R}_2) = g(\vec{R}_1, \vec{R}_2) \frac{dV_1}{V} \frac{dV_2}{V}$$

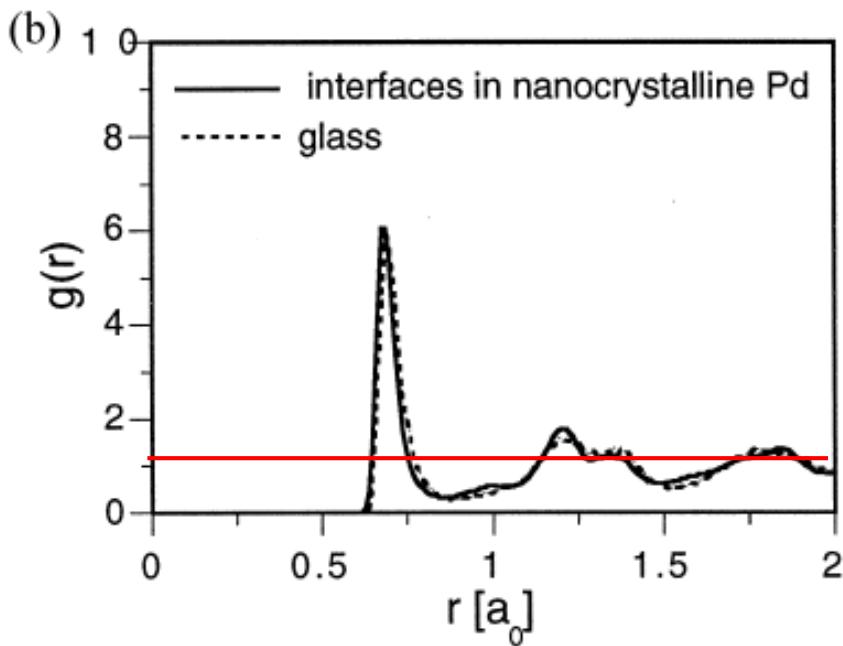
Радиальная функция распределения:

$$dP(R) = g(R) \frac{4\pi R^2 dR}{V}$$

$$\frac{1}{V} \int_0^\infty g(R) 4\pi R^2 dR = 1$$



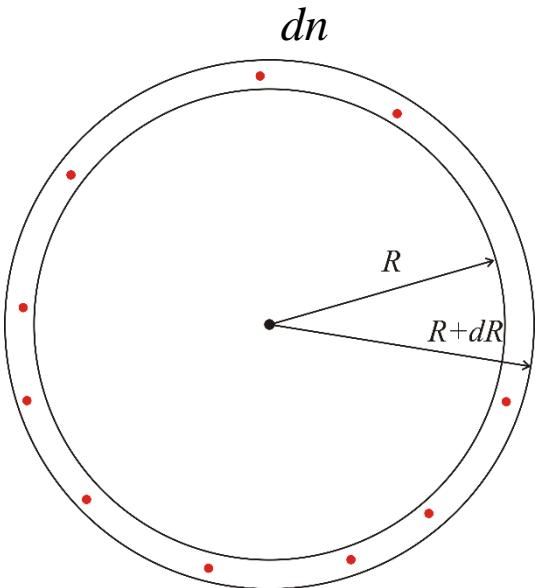
Основные характеристики РФР



$R < d_{\text{at}} - g(R) = 0$ (атомы не могут проникать друг в друга)

$R \rightarrow \infty - g(R) \rightarrow 1$ (отсутствие корреляции)

Связь РФР с плотностью атомов



$$\rho = \frac{dn}{4\pi R^2 dR} \quad \rho = \rho(R)$$

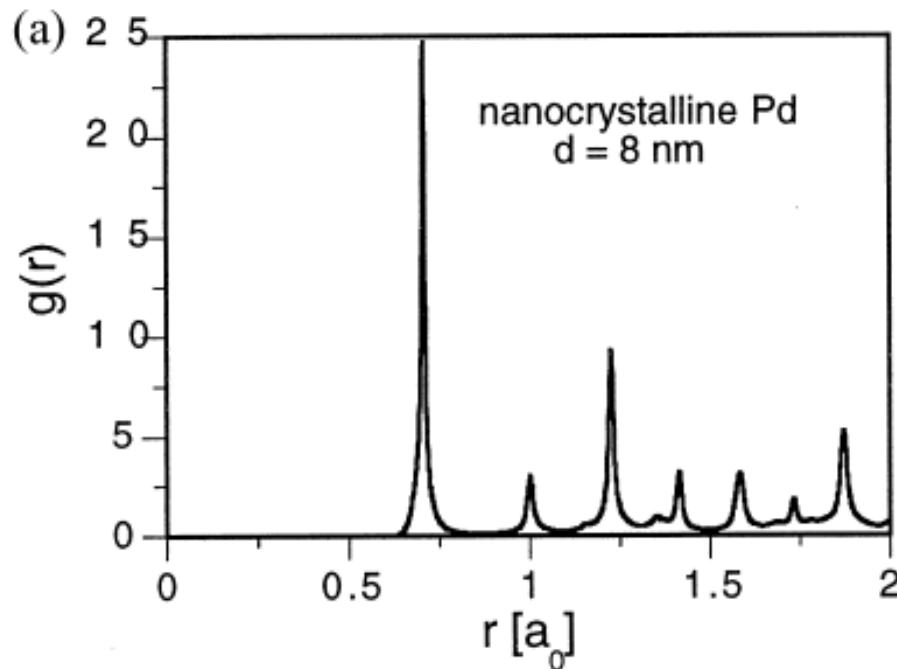
$$dn = \rho(R)4\pi R^2 dR$$

$$\int_0^{R_0} \rho(R)4\pi R^2 dR = N - 1$$

$$\frac{1}{V} \int_0^{\infty} g(R)4\pi R^2 dR = 1$$

$$g(R) = \frac{V}{N} \rho(R) = \frac{\rho(R)}{\bar{\rho}}$$

РФР различных атомных систем: кристаллы

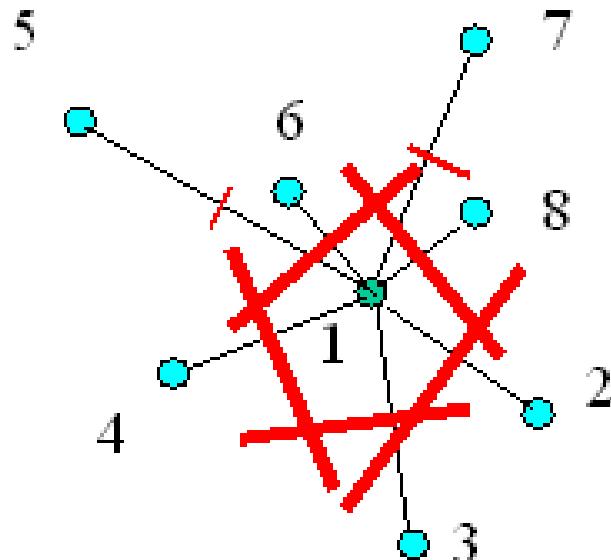
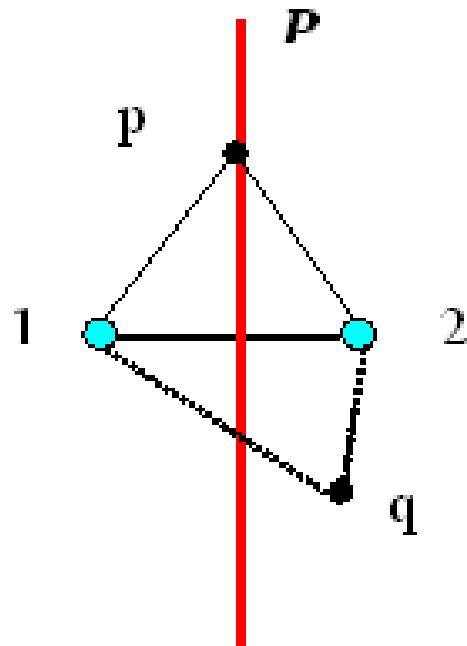


$$g(R) = \frac{1}{\rho} \sum_k \frac{N_k}{4\pi R_k^2} \delta(R - R_k)$$

$$\delta(R - R_k) = \begin{cases} 0 & \text{при } R \neq R_k, \\ \infty & \text{при } R = R_k \end{cases}$$

$$\int \delta(R - R_k) d(R - R_k) = 1$$

Полиэдры Вороного: определение



Двумерный пример построения
(полигоны Вороного)

Полиэдры Вороного – геометрическое место точек, которые лежат ближе к данному атому, чем к любому другому атому рассматриваемой системы атомов

Вопросы к зачету

1. Методы анализа структуры твердых тел
2. Программы визуализации
3. Функция радиального распределения

The End