

MÔ HÌNH HOÁ CẤU TRÚC CỦA Al_2O_3 VÔ ĐỊNH HÌNH

Nguyễn Huỳnh Tuấn Anh, Võ Văn Hoàng

Khoa Vật lý, Trường Đại học Khoa học Tự Nhiên - ĐHQG tp.HCM

Tóm tắt:

Mô hình Al_2O_3 vô định hình chứa 3000 nguyên tử được dựng bằng phương pháp hồi phục tĩnh với điều kiện biên tuần hoàn và thế tương tác cặp Born - Mayer. Kết quả tính toán cho thấy cấu trúc mô hình phù hợp với thực nghiệm. Cấu trúc vi mô của mô hình cũng được khảo sát qua phân bố lỗ trống, phân bố số phối vị. Ảnh hưởng của quá trình hồi phục tĩnh lên cấu trúc cũng được khảo sát.

COMPUTER SIMULATION OF THE STRUCTURAL PROPERTIES OF AMORPHOUS Al_2O_3

Nguyen Huynh Tuan Anh, Vo Van Hoang

Department of Physics, University of Natural Sciences - VNU.HCM

Abstract:

The models of amorphous Al_2O_3 containing 3000 atoms have been constructed by the Static Relaxation method in the cubic under periodic boundary condition with pair Born - Mayer potentials. Calculations show the structure of model is in good agreement with experimental data. The microstructure in the model has been investigated through the coordination number distribution and cavity distribution. The effect of the static relaxation on the structure has been done