



Contribution ID : 53

Type : **not specified**

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ МИГРАЦИИ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В МАГНЕТИТЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АСЕ-ПОТЕНЦИАЛА

Методами молекулярной динамики и NEB исследована миграция собственных точечных дефектов в объёме магнетита с использованием АСЕ-потенциала. Установлено, что характер и интенсивность миграции зависят от типа дефекта и направления перехода. Наиболее высокой подвижностью в выполненных расчётах характеризуется междоузельный кислород в гангельской конфигурации. Вакансионные переходы имеют более высокие барьеры, зависящие от ближайшего катионного окружения. Показана возможность применения потенциала для моделирования вакансий и предварительного анализа междоузлий.

Primary author(s) : САВИН, Глеб

Presenter(s) : САВИН, Глеб