

1 共格应变能

$$q(a_s, \hat{G}) = \frac{\Delta E_A^{epi}(a_s, \hat{G})}{\Delta E_A^{bulk}(a_s)} \quad (1)$$

$$***\Delta E_A^{bulk}(a_s) = E_A^{bulk}(a_A) - E_A^{bulk}(a_s) \quad (2)$$

其中,

$$q(a_s, \hat{G}) = 1 - \frac{B}{C_{11} + \Delta\gamma(a_s, \hat{G})} \quad (3)$$

无剪切应变:

$$***q(\hat{G}) = 1 - \frac{B}{C_{11} + \Delta\gamma_{harm}(\hat{G})} \quad (4)$$

$$B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad (5)$$

$$\Delta = C_{44} - \frac{1}{2}(C_{11}2 - C_{12}) \quad (6)$$

其中

$$\gamma_{harm}([001]) = 0, \gamma_{harm}([110]) = 1, \gamma_{harm}([111]) = \frac{4}{3} \quad (7)$$

可以发现: $q(\hat{G})$ 由弹性常数决定, 当 $\Delta > 0$ 时, 验证, 随 $[001].[110].[111]$ 依次递减。反之递增。

$$\dots \quad (8)$$

2 界面能计算公式

$$\frac{E_f}{N} = \frac{2S\sigma}{N} + E_{cs} \quad (9)$$

其中:

$$E_f = E_{AB} - xNE_A - (1-x)NE_B \quad (10)$$

E_A 和 E_B 分别为 A 或 B 分的完全弛豫后结构每个原子的单点能, N 为界面模型的原子数目

3 需要计算的部分

- 1、 Al_3Sc 晶格参数为 a_S 和 a_A 的能量
- 2、Al 的单点能
- 3、 Al_3Sc 的弹性常数
- 3、界面模型弛豫后的总能