

Apéndice B

Parámetros de ajuste del potencial Finnis-Sinclair

Para recoger la fuerte repulsión que existe entre los átomos se ha utilizado la siguiente ecuación:

$$\phi(r) = a + br + c'r^2 + d'r^3 \quad \text{para } r < r_s \quad (\text{B.1})$$

donde a , b , c' y d' son parámetros libres que se han calculado para recoger la repulsión y para que en el punto de enlace (r_s) no haya discontinuidades ni con curva del potencial ni con sus dos primeras derivadas. Para ello hay que buscar la solución al siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} a + br_i + c'r_i^2 + d'r_i^3 &= 1000 \\ a + br_s + c'r_s^2 + d'r_s^3 &= (r_s - c)^2 (c_0 + c_1 r_s + c_2 r_s^2) \\ b + 2c'r_s + 3d'r_s^2 &= (c_1 c^2 - 2c_0 c) + 2(c_0 + c_2 c^2 - 2c_1 c) r_s + 3(c_1 - 2c_2 c) r_s^2 + 4c_2 r_s^3 \\ 2c' + 6d'r_s &= 2(c_0 + c_2 * c^2 - 2c_1 c) + 6(c_1 - 2c_2 c) r_s + 12c_2 r_s^2 \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

donde r_i es un punto cercano a 0. La solución de este sistema determina los parámetros a , b , c' y d' :

$$\begin{aligned}
 a &= \frac{c_0 c^2 (r_i^3 - 3r_i^2 r_s + 3r_i r_s^2) - 1000 r_s^2^3 + (c_1 c^2 - 2c_0 c) r_i r_s^3 + (c_0 + c_2 c^2 - 2c_1 c) r_i^2 r_s^3 + (c_1 - 2c_2 c) r_i^3 r_s^3}{(r_i - r_s)^3} + \\
 &\quad + \frac{c_2 (3r_i^3 r_s^4 - 3r_i^2 r_s^5 + r_i r_s^6)}{(r_i - r_s)^3} \\
 b &= - \frac{(c_1 c^2 - 2c_0 c) (r_i^3 - 3r_i^2 r_s - r_s^3) + 3000 r_s^2 - 3c_0 c^2 r_s^2 - 3(c_0 + c_2 c^2 - 2c_1 c) r_i^2 r_s^2 - 3(c_1 - 2c_2 c) r_i^3 r_s^2}{(-r_i + r_s)^3} + \\
 &\quad + \frac{c_2 (-8r_i^3 r_s^3 + 6r_i^2 r_s^4 - r_s^6)}{(-r_i + r_s)^3} \\
 c' &= - \frac{(c_0 + c_1 r_s + c_2 r_s^2) r_i^3 - 3000 r_s + 3c_0 c^2 r_s + 3(c_1 c^2 - 2c_0 c) r_i r_s + 3(c_1 - 2c_2 c) r_i^3 r_s + 3(c_0 + c_2 c^2 - 2c_1 c) (r_i r_s^2 - r_s^3)}{(-r_i + r_s)^3} + \\
 &\quad + \frac{c_2 (6r_i^3 r_s^2 - 6r_i r_s^4 + 3r_s^5)}{(-r_i + r_s)^3} \\
 d' &= \frac{1000 - c_0 c^2 - (c_1 c^2 - 2c_0 c) r_i - (c_0 + c_2 c^2 - 2c_1 c) r_i^2 + (c_1 - 2c_2 c) (-3r_i^2 r_s + 3r_i r_s^2 - r_s^3) + c_2 (-6r_i^2 r_s^2 + 8r_i r_s^3 - 3r_s^4)}{(r_i - r_s)^3}
 \end{aligned} \tag{B.3}$$