Санкт-Петербургский государственный

политехнический университет

Курсовая работа по кристаллографии

Тема: Сплайновый потенциал Леннард-Джонса

Выполнил студент

30510/1 группы

Физико-механический факультет

И.А. Веренинов

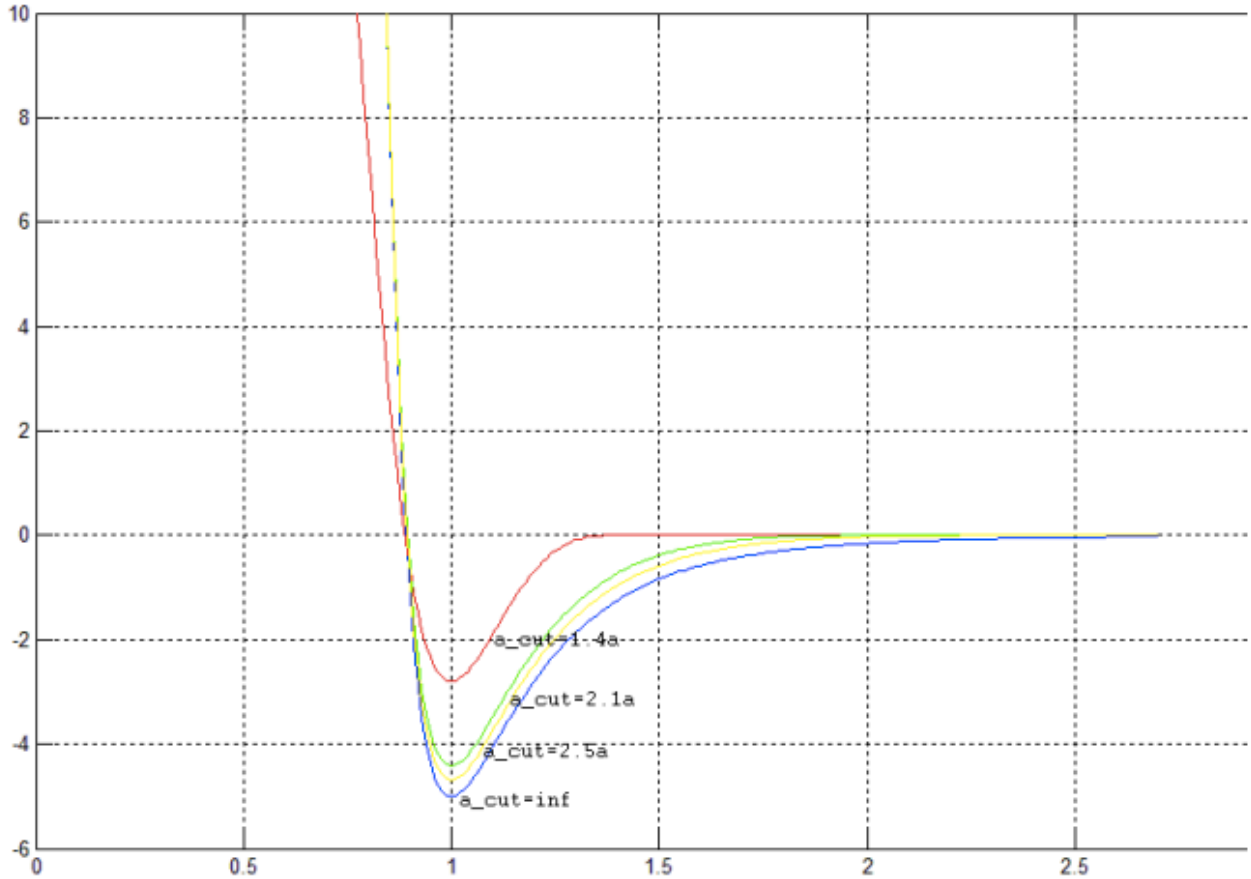
3” июня 2013г

Санкт-Петербург

2013

Сплайновый потенциал Леннард-Джонса

Для значений радиуса обрезания a_cut = 1.4, 2.1, 2.5 были построены сплайновые потенциалы Леннарда-Джонса. При D = 5. Их графики:



Зависимость энергии связи от радиуса обрезания

a_cut – радиус обрезания	П/D
1.17	-0.2000
1.4	-0.5583
1.5	-0.6440
1.6	-0.7102
1.7	-0.7622
1.8	-0.8033
1.9	-0.8361
2.0	-0.8625
2.1	-0.8840
2.2	-0.9013
2.3	-0.9156
2.4	-0.9275
2.5	-0.9374

Коэффициент объемного сжатия для квадратной решетки

$$C = -\frac{8\left(1-\frac{\left(r^2-b^2\right)^2}{\left(a_{cut}^2-b^2\right)^2}\right) D\left(-\frac{12\,a_\alpha^{12}}{r^{13}}+\frac{12\,a_\alpha^{6}}{r^{7}}\right)\left(r^2-b^2\right) r}{\left(a_{cut}^2-b^2\right)^2}+\left(1-\frac{\left(r^2-b^2\right)^2}{\left(a_{cut}^2-b^2\right)^2}\right)^2 D\left(\frac{156\,a_\alpha^{12}}{r^{14}}-\frac{84\,a_\alpha^{6}}{r^{8}}\right)$$

a_cut – радиус обрезания	***R – радиус координационной сферы***	***N – количество частиц на координационной сфере***	***П(a_cut)/D – потенциальная энергия***
1.4a	a	6	$19.511/a^2$
2.1a	2a	12	$19.507/a^2$

Равновесное расстояние

a_cut	***Равновесное расстояние***
1.4a	***1a***
2.1a	***0.901a***

Корректировка значения коэффициента объемного сжатия

$$K_{correct} = \frac{\mu}{18a^2}\left(\ddot{\Pi} - \ddot{\Pi}_{spline}\right)$$

Скорректировать значение К

a_cut	$K_{correct}$
1.4	***0***
2.1	$0.09*D/a^2$