

УДК 539.3

ПРОСТЫЕ МОДЕЛИ ДЛЯ ОПИСАНИЯ НЕПЛОТНОУПАКОВАННЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Е.А. Подольская, А.М. Кударова

*(Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
Россия)*

SIMPLE MODELS FOR DESCRIPTION OF NONCLOSE PACKED CRYSTAL STRUCTURES

Podolskaya E.A., Kudarova A.M.

(St. Petersburg State Polytechnical University, Russia)

В работе рассматривается способ моделирования неплотноупакованных кристаллических решеток. Задача — выявление структур, характеризующихся большим отношением поперечной жесткости к продольной, что необходимо для согласования с экспериментом.

1. Введение. В данной работе рассматривается проблема моделирования кристаллических решеток с низкой плотностью упаковки. Парные потенциалы, как известно, не всегда позволяют построить устойчивые модели таких решеток, поскольку не обеспечивают достаточную величину поперечной жесткости межатомной связи. Традиционным решением является использование многочастичных потенциалов. Альтернативный подход состоит в учете моментного вклада в межатомное взаимодействие [1,2].

В работе [1] предлагаются два пути построения моделей в рамках второго подхода: построение моментного потенциала взаимодействия или подбор формирующих структуру частиц, которые представляют собой совокупности жестко связанных материальных точек, взаимодействующих с материальными точками других частиц посредством парного потенциала. Далее будет рассмотрен второй путь. В [1] было получено заниженное отношение поперечной жесткости межатомной связи к продольной по сравнению с известными экспериментальными значениями для решетки графита. Задача данной работы состоит в увеличении этого отношения.

Взаимодействие между точками, принадлежащими различным частицам, описывается парным потенциалом M_i . Таким образом, основной задачей на данном этапе становится поиск моделей, которые, обладая достаточной простотой, характеризуются поперечной жесткостью, сравнимой по величине с продольной.

Расчет жесткостей ведется двумя методами — динамическим и энергетическим. В соответствии с первым методом, жесткость связи между частицами определяется через производную от суммарной силы, действующей на частицу, взятую с обратным знаком. Во втором методе используется разложение потенциальной энергии в ряд Тейлора вблизи положения равновесия, тогда искомая жесткость будет определяться коэффициентом при квадрате малого отклонения.

В данной работе рассматриваются шесть моделей, три из которых являются полярными, а три другие — неполярными.

2. Взаимодействие неполярных частиц, состоящих из двух жестко связанных материальных точек. Рассмотрим две частицы, каждая из которых состоит из двух жестко связанных между собой материальных точек (рис.1).

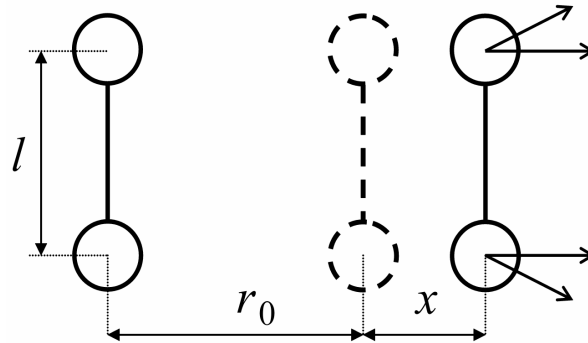


Рис. 1

Пусть взаимодействие между материальными точками, формирующими частицы, описывается парным потенциалом $\Pi(r)$. Для конкретных расчетов будем использовать модифицированный потенциал Ми

$$\Pi(r) = \lambda \frac{D}{n-m} \left[m \left(\frac{a}{r} \right)^n - n \left(\frac{a}{r} \right)^m \right] \quad (1)$$

Здесь $\lambda = 1$ для неполярных частиц, $\lambda = \pm 1$ для полярных частиц, D – энергия взаимодействия, a – параметр, характеризующий протяженность взаимодействия, m и n – параметры потенциала.

Отклоним одну частицу из положения равновесия (обозначенного на рисунке пунктиром) на малое расстояние x в направлении, указанном на рис.1. Введем обозначения: r_0 — равновесное расстояние,

$$P(r) = \frac{F(r)}{r}, \quad F(r) = -\Pi'(r)$$

На отклоненную частицу будет действовать сила

$$S(x) = 2P\left(\sqrt{l^2 + (r_0 + x)^2}\right)(r_0 + x) + 2F(r_0 + x)$$

Тогда продольная жесткость будет определяться формулой

$$C_L = -S'(0)$$

Теперь отклоним частицу на малое расстояние y в направлении, указанном на рис.2.

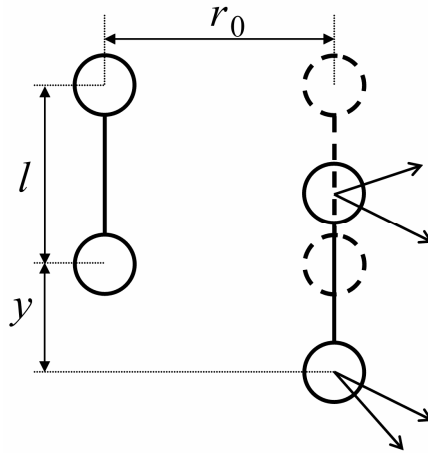


Рис. 2

В этом случае на нее будет действовать сила

$$Q(y) = P\left(\sqrt{r_0^2 + (l+y)^2}\right)(l+y) - P\left(\sqrt{r_0^2 + (l-y)^2}\right)(l-y) + 2P\left(\sqrt{r_0^2 + y^2}\right)y$$

Поперечная жесткость будет определяться формулой

$$C_T = -Q'(0)$$

Таким образом, получены значения жесткостей в зависимости от геометрических характеристик структур, а также параметров потенциала взаимодействия точек частиц. Результат представлен в виде графика на рис.3. На оси абсцисс отложено отношение характерной длины частицы l к равновесному расстоянию между частицами r_0 , на оси ординат – отношение поперечной жесткости C_T к продольной C_L .

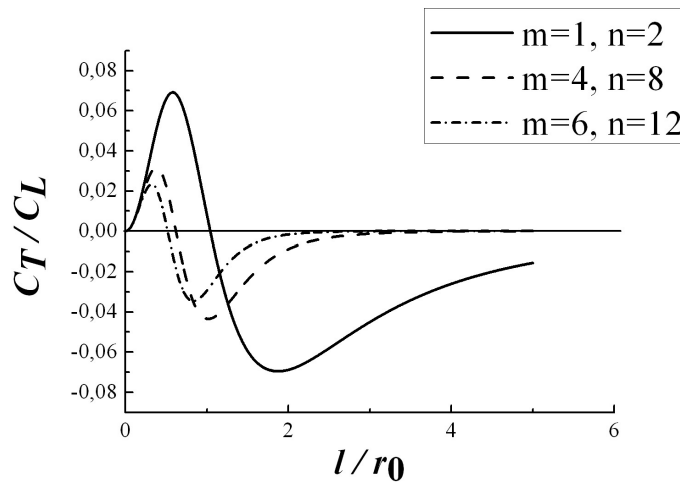


Рис. 3

Очевидно, что интерес представляет только та часть графика, которая соответствует положительному отношению жесткостей, поскольку лишь в

этом случае равновесие системы устойчиво. Тем не менее, требуется дополнительно проверить знак каждой жесткости в отдельности. В данном случае, и продольная, и поперечная жесткости на рассматриваемом участке положительны, и система действительно устойчива.

3. Взаимодействие полярных частиц, состоящих из двух материальных точек. Рассмотрим две частицы, каждая из которых состоит из двух жестко связанных между собой материальных точек. Эти точки будем называть условно «заряженными» (рис.4).

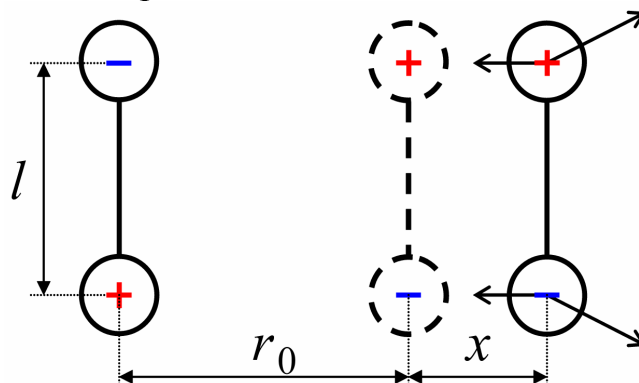


Рис. 4

Полагаем, что при взаимодействии одноименно «заряженных» точек коэффициент λ в формуле (1) равен 1, при взаимодействии разноименно «заряженных» точек $\lambda = -1$. На рис. 4 указаны знаки «зарядов» точек, формирующих частицу, и направления действия сил взаимодействия точек. Все обозначения, принятые при рассмотрении предыдущей структуры, сохраняются. На рис.5 представлен график зависимости отношения поперечной жесткости к продольной (C_T/C_L) от отношения характерной длины частицы к равновесному расстоянию между частицами (l/r_0).

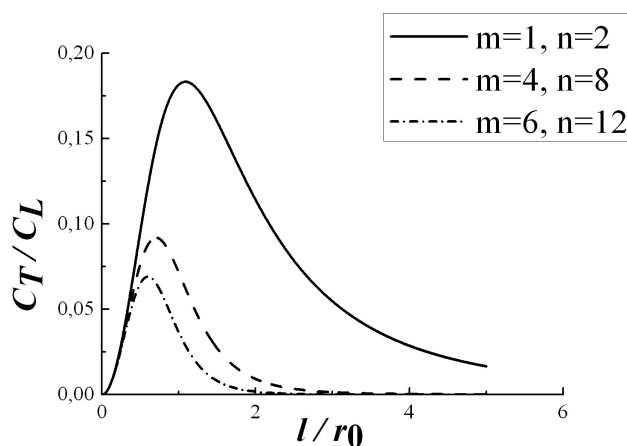


Рис. 5

Несмотря на то что отношение жесткостей положительно на всей оси и достаточно велико, данная система не является устойчивой, так как и продольная и поперечная жесткости отрицательны.

4. Взаимодействие неполярных частиц, состоящих из трех материальных точек. Далее рассмотрим структуры, изображенные на рис. 6-7.

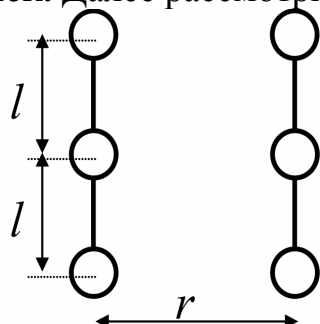


Рис. 6

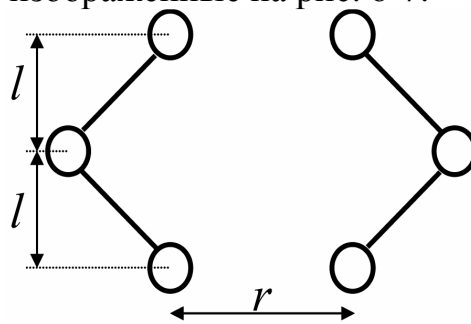


Рис. 7

Результаты аналогичны полученным в пунктах 2-3: неполярные частицы составляют устойчивую систему, а внесение «заряда» приводит к неустойчивости.

5. Заключение. В работе представлено шесть моделей для описания неплотноупакованных кристаллических структур. Было показано, что полярные модели позволяют получить более высокое отношение поперечной жесткости к продольной, чем неполярные, но при этом оказываются неустойчивыми. Максимальные отношения поперечной жесткости к продольной для представленных структур в процентах в зависимости от параметров потенциала сведены в таблицу (рис.8).

структура						
m,n						
1, 2	6.90	18.32	8.71	28.50	3.80	33.30
3, 6	3.86	11.02	4.50	17.53	4.10	7.00
4, 8	3.17	9.19	3.60	14.57	3.85	4.40
6, 12	2.34	6.90	2.58	11.27	3.45	2.40

Рис. 8

Лучший результат среди устойчивых структур составляет 8.71%, что соответствует неполярной частице, состоящей из трех материальных то-

чек, лежащих на одной прямой (рис.6). Эта модель позволяет обеспечить устойчивость кристаллической структуры, но дает, как и в работе [1], заниженное значение поперечной жесткости. Тем не менее, приведенный результат в четыре раза больше полученного в [1]. Таким образом, представляется целесообразным продолжить поиск другого вида частиц, формирующих структуру.

Авторы выражают благодарность И.Е. Беринскому и А.М. Кривцову за помощь в постановке задачи и советы в ходе выполнения работы.

Литература

1. Беринский И.Е., Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. Применение моментного взаимодействия к построению устойчивой модели кристаллической решетки графита // Изв. РАН, МТТ, №5, 2007.
2. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. Получение макроскопических соотношений упругости сложных кристаллических решеток с учетом моментных взаимодействия на микроуровне // ПММ. 2007. Т. 71. Вып. 4. с. 595-615.