Санкт-Петербургский Государственный Политехнический университет

кафедра Теоретической Механики

Сплайновые потенциалы, потенциальная энергия треугольной решетки

Расчетное задание

по Кристаллографии

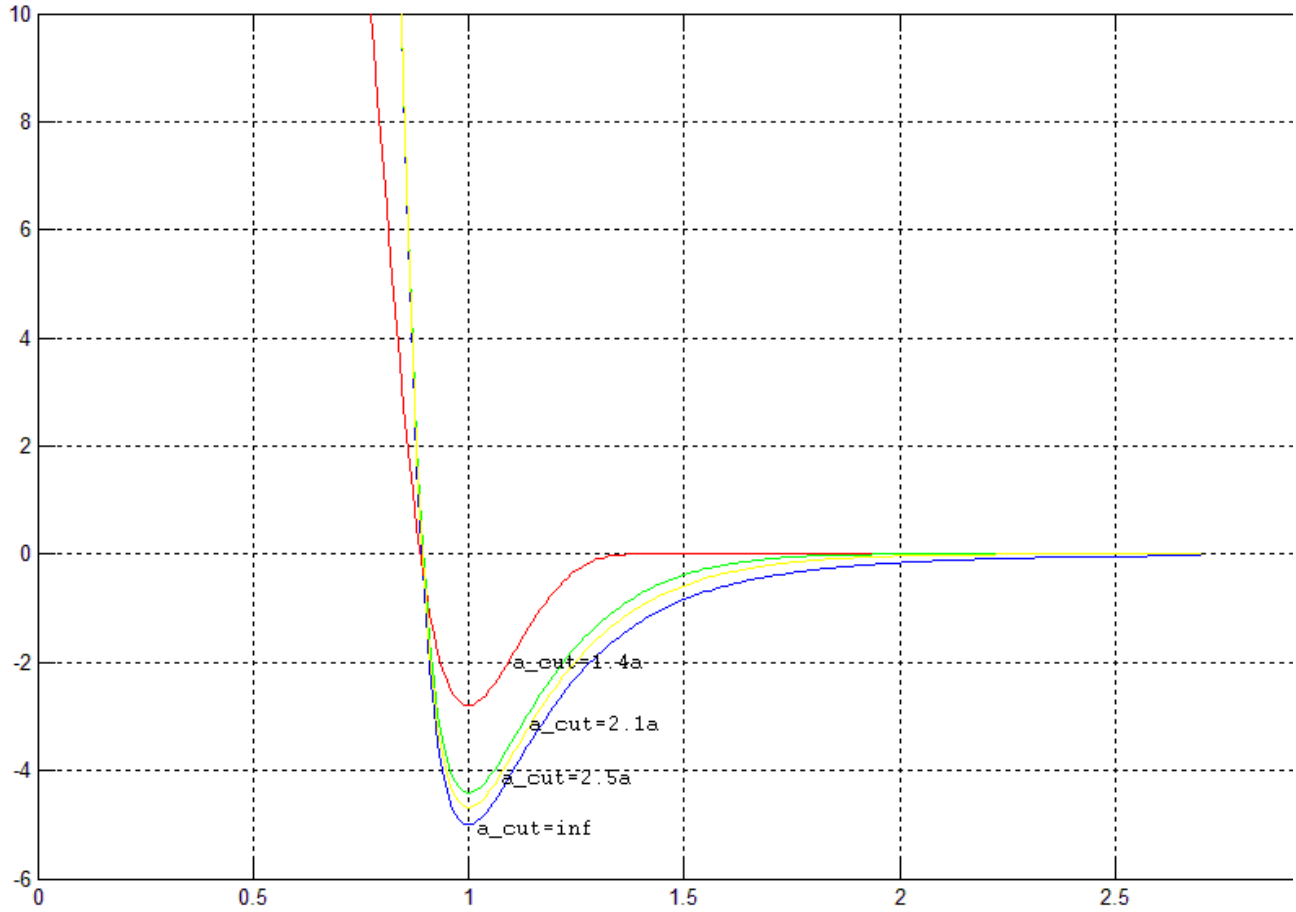
Выполнил:

Дзенушко Д. В., группа 30510/1

Санкт-Петербург 2013

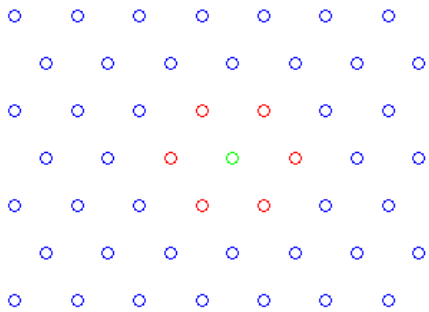
Построение сплайновых потенциалов

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

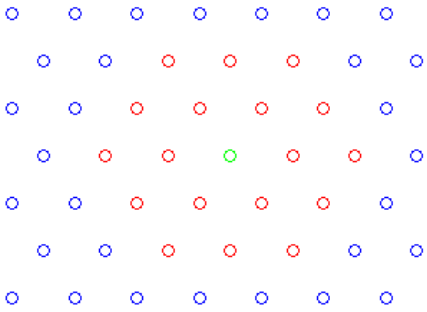


Координационные сферы

a_cut = 1.4



a_cut = 2.1 и a_cut = 2.5



Описание численного метода

Данная работа проводилась с использованием пакета MATLAB.

Функция, вычисляющая потенциал Леннарда-Джонса:

```
function [ p ] = P(D, a, r )
p = D * (( 1 / r).^12 - 2 * (1 / r).^6);
end
```

Функция, вычисляющая значение функции k для сплайнового потенциала:

```
function [ k ] = K( b,a_cut,r )
k =  (1-((r * r - b * b)/(a_cut * a_cut - b * b))^2)^2;
end
```

Функция, вычисляющая сплайновый потенциал:

```
function [ p ] = P_spl(D,a,b,a_cut, r )
syms rs bs a_cuts;
ks = sym('(1-((rs * rs - bs * bs)/(a_cuts * a_cuts - bs * bs))^2)^2');
ks = subs(ks,bs,b);
ks = subs(ks,a_cuts,a_cut);
dks =diff(ks) ;
dks = subs(dks,bs,b);
dks = subs(dks,a_cuts,a_cut);
dk = inline(char(dks),'rs');
k = inline(char(ks),'rs');
I = 0;
step = 0.0005;
if r>a_cut
   p=0;
else
   for j = r : step : a_cut
      I = I + dk(j)*P(D,a,j)*step;
   end
   p = I+k(r)*P(D,a,r)-k(a_cut)*P(D,a,a_cut);
end
```

Функция, вычисляющая силу для сплайнового потенциала:

```
function [ f ] = F_spl( D,a,b,a_cut, r )
syms rs bs a_cuts;
ks = sym('(1-((rs * rs - bs * bs)/(a_cuts * a_cuts - bs * bs))^2)^2');
ks = subs(ks,bs,b);
ks = subs(ks,a_cuts,a_cut);
k = inline(char(ks),'rs');
f = k(r)*F(D, a, r);
end
```

Зависимость энергии связи от радиуса обрезания

a_cut — радиус обрезания	Есв — энергия связи
1.17a	-0.1893
1.4a	-0.5590
1.5a	-0.6443
1.6a	-0.7105
1.7a	-0.7623
1.8a	-0.8034
1.9a	-0.8362
2.0a	-0.8626
2.1a	-0.8839
2.5a	-0.9374

Потенциальная энергия для треугольной решетки

a_cut — радиус обрезания	R – радиус координационной сферы	N – количество частиц на координационной сфере	П (a_cut) /D— потенциальная энергия
1.4a	1a	6	-3.35422
2.1a	1a; 1.7321a; 2a	6; 6; 6	-5.37766
2.5a	1a; 1.7321a; 2a;	6; 6; 6	-5.86016

Равновесное расстояние

a_cut — радиус обрезания	a_равн - Равновесное расстояние
1.4a	1a
2.1a	0.9983a
2.5a	0.9967a

Корректировка значения потенциальной энергии

Воспользовавшись формулой

$$П_{скор}(r) = П(r) - (П(a) - П(a_{равн}))$$

получаем скорректированные значения потенциальной энергии.

a_cut — радиус обрезания	R – радиус координационной сферы	N – количество частиц на координационной сфере	П (a_cut) /D— потенциальная энергия
1.4a	1a	6	-3.3542
2.1a	1a; 1.7321a; 2a	6; 6; 6	-5.3792
2.5a	1a; 1.7321a; 2a;	6; 6; 6	-5.8662