`

Санкт-Петербургский Государственный Политехнический университет
кафедра Теоретической Механики

Курсовой проект по кристаллографии
Сплайновый потенциал Леннарда-Джонса, коэффициент объемного сжатия ГЦК решетки

Выполнил:
Краморов Данил, группа 30510/1

Санкт-Петербург 2013

`

1) Определить зависимость энергии связи от радиуса обрезания для сплайнового потенциала Леннарда-Джонса.

$$\widetilde{\Pi}(r) = \int_r^{a_{cut}} k'(r)\Pi(r)\,dr + k(r)\Pi(r) - k(a_{cut})\Pi(a_{cut}),$$

где $\Pi(r)$ – потенциал Леннарда - Джонса, $k(r)$ – сглаживающая функция:

$$\Pi(r) = D\left[\left(\frac{a}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{a}{r}\right)^{6}\right],$$

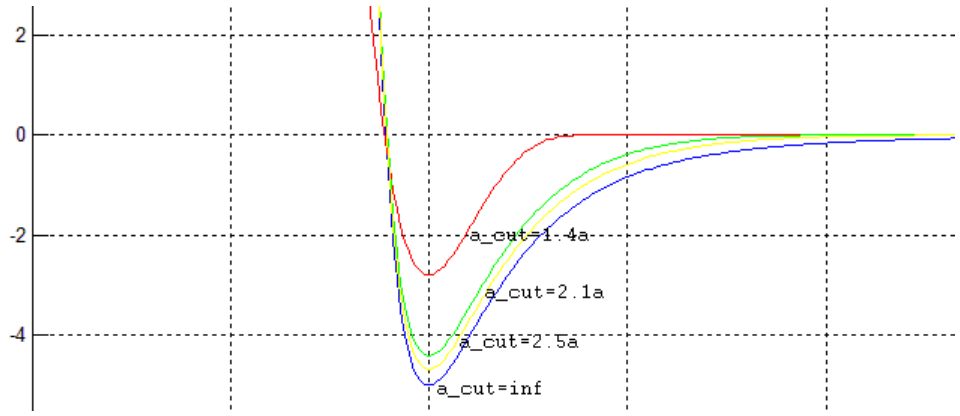
$$k(r) = \begin{cases} 1, & \text{при } r < b; \\ \left[1 - \left(\dfrac{r^2 - b^2}{{a_{cut}}^2 - b^2}\right)\right]^2, & \text{при } b \le r < a_{cut}; \\ 0, & \text{при } r \ge a_{cut}, \end{cases}$$

здесь a – равновесное расстояние между частицами, b – расстояние, на котором $\Pi''(r) = 0$, r – расстояние между частицами, D – глубина потенциальной ямы.

Зависимость энергии связи от радиуса обрезания

a_cut/a	П/D
1.2a	-0.1999
1.4a	-0.5582
1.5a	-0.6439
1.6a	-0.7102
1.7a	-0.7621
1.8a	-0.8033
1.9a	-0.8361
2.0a	-0.8625
2.1a	-0.8838
2.5a	-0.9373

Рис.1 Сплайновый потенциал Леннарда-Джонса для разных a_cut



Параметры ГЦК решетки.

`

№ k	N_k	R_k
1	12	a
2	6	$\sqrt{2}a$
3	24	$\sqrt{3}a$
4	12	2a

k – координационная сфера, N_k – число атомов, лежащих на k-ой координационной сфере, R_k – радиус k-ой координационной сферы.

2) Найти равновесное расстояние при данных радиусах обрезания (ГЦК решетка)

a_cut	a_α
1.4a	a
2.1a	0.99a

3) Определить значение коэффициента объемного сжатия для данных радиусов обрезания

$$K \overset{\text{def}}{=} \frac{1}{d^2}\,\mathbf{E}\cdot\cdot\,\mathbf{C}\cdot\cdot\,\mathbf{E} = \frac{\mathcal{M}a^2 C}{2d^2 V_0},$$

где $C \overset{\text{def}}{=} \Pi''(a)$ — жесткость межатомной связи

μ – координационное число решетки, d – размерность пространства

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

a_cut	K
1.4	$31.72*D/a^3$
2.1	$29.15*D/a^3$

4) Скорректировать значение K

a_cut	Корректировочный коэффициент
1.4	0
2.1	$0.12*D/a^3$