

Санкт-Петербургский Государственный Политехнический университет

кафедра Теоретической Механики

Сплайновый потенциал

Расчетное задание
по Кристаллографии

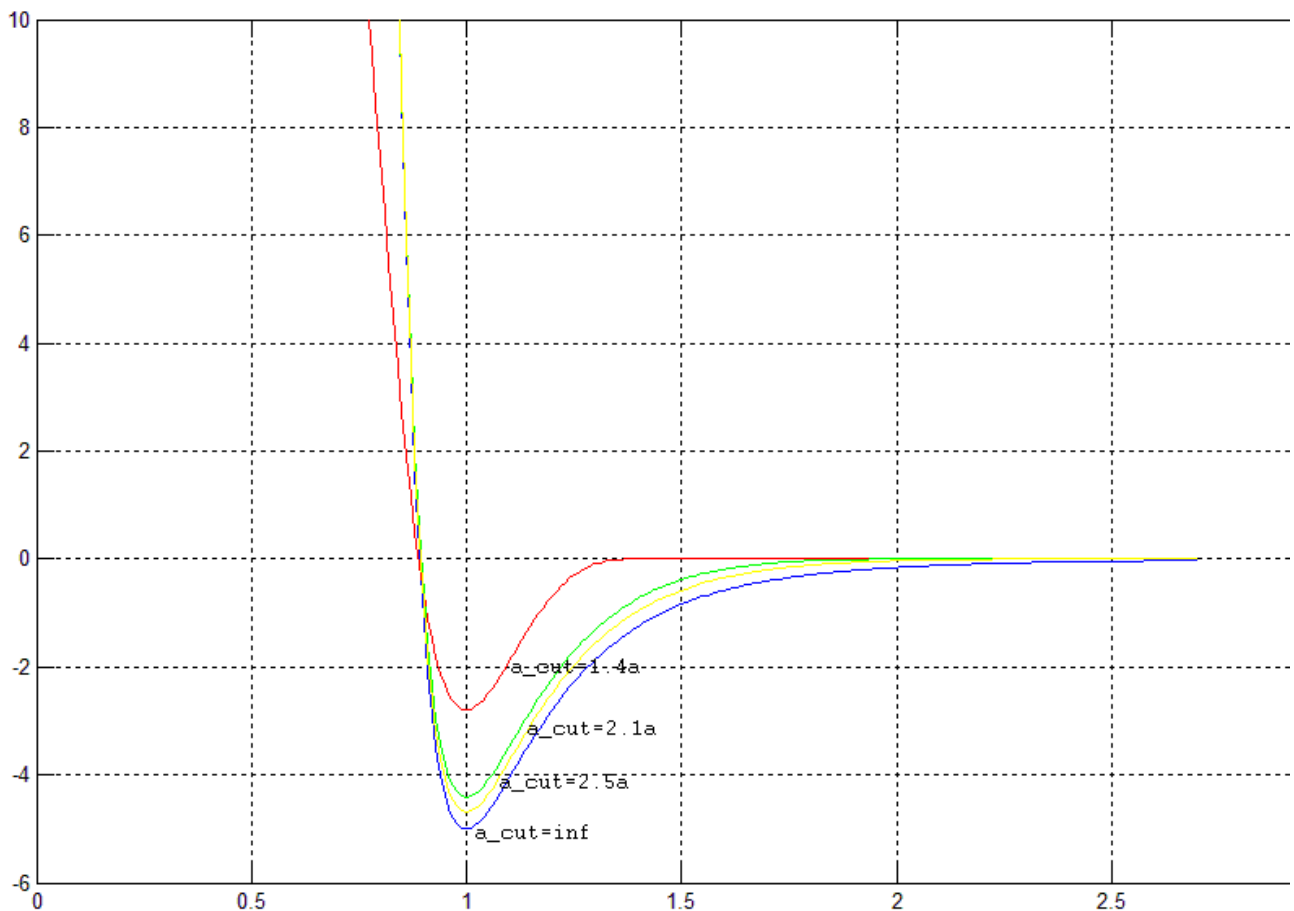
Выполнил:

Дзенушко Д. В., группа 30510/1

Санкт-Петербург 2013

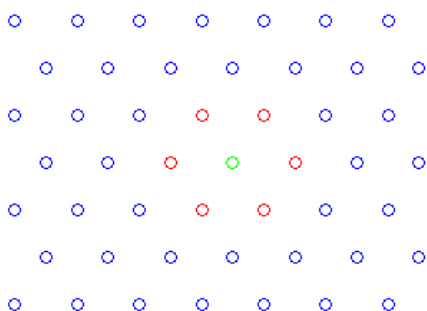
Построение сплайновых потенциалов

Для значений радиуса обрезания $a_{\text{cut}} = 1.4, 2.1, 2.5$ были построены сплайновые потенциалы Леннарда-Джонса. При $D = 5$. Их графики:

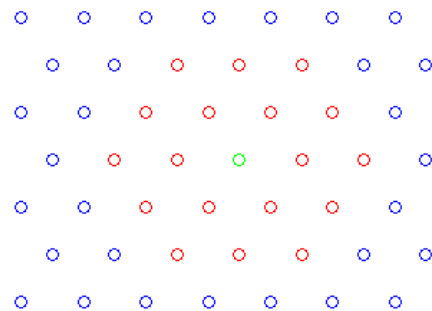


Координационные сферы

$a_{\text{cut}} = 1.4$



$a_{\text{cut}} = 2.1$ и $a_{\text{cut}} = 2.5$



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

$$P_{\text{скор}}(r) = P(r) - (P(a) - P(a_{\text{равн}}))$$

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