

Отчет по расчетному заданию:
“Сплайновый потенциал, потенциальная энергия ОЦК решетки”

Работу выполнил:
Ковалев О.О.
Группа 30510/1

2013 г.

Зависимость энергии связи от радиуса обрезания a_{cut}

Сплайновый потенциал имеет следующий вид:

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

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

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

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

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

Сила взаимодействия равна:

$$\tilde{f}(r) = k(r)\Pi'(r).$$

Энергия связи зависит от a_{cut} . Ниже приведен график, иллюстрирующий энергию связи при различных радиусах обрезания (рис. 1).

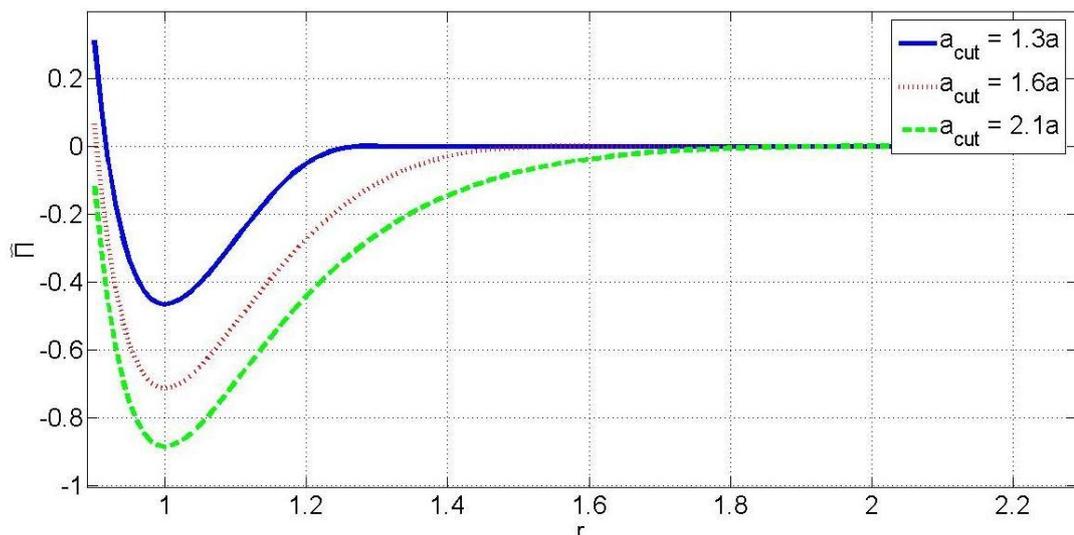


Рис. 1: Зависимость энергии связи от a_{cut} .

Как видно из таблицы 1, при увеличении a_{cut} , энергия связи растет и стремится к -1.

$\frac{a_{cut}}{a}$	$\frac{\tilde{\Pi}(a)}{D}$
1.3	-0.4659
1.4	-0.5676
1.5	-0.6487
1.6	-0.7131
1.7	-0.7640
1.8	-0.8046
1.9	-0.8370
2.0	-0.8632
2.1	-0.8844
2.3	-0.9159
2.6	-0.9458
10.0	-0.9997

Таблица 1: Зависимость энергии связи от радиуса обрезания*.

*вычисления производились в среде matlab; интеграл (1) брался численно с использованием квадратурных формул Ньютона - Котеса 2-го порядка (правило Симпсона).

Потенциальная энергия для ОЦК решетки

Вычисляется энергия связи для ОЦК решетки при $a_{cut} = 1.4$ и $a_{cut} = 2.1$.

Радиус координационной сферы	Число частиц, лежащих на координационной сфере
a	8
$\frac{2}{\sqrt{3}}a$	6
$2\sqrt{\frac{2}{3}}a$	12
$\sqrt{\frac{11}{3}}a$	24
$2a$	8

Таблица 2: Параметры координационных сфер.

При $a_{cut} = 1.4a$ получаем

$$\tilde{\Pi}_{св} = 8\tilde{\Pi}(a) + 6\tilde{\Pi}\left(\frac{2}{\sqrt{3}}a\right) = -6.1683D.$$

При $a_{cut} = 2.1a$ получаем

$$\begin{aligned}\tilde{\Pi}_{CB} &= 8\tilde{\Pi}(a) + 6\tilde{\Pi}\left(\frac{2}{\sqrt{3}}a\right) + 12\tilde{\Pi}\left(2\sqrt{\frac{2}{3}}a\right) + 24\tilde{\Pi}\left(\sqrt{\frac{11}{3}}a\right) + 8\tilde{\Pi}(2a) \\ &= -11.1838D\end{aligned}$$

Равновесное расстояние в ОЦК решетке

В кристаллических решетках, в зависимости от a_{cut} , частицы будут располагаться на расстоянии, отличном от a . В таблице 3 приведены значения новых равновесных расстояний в зависимости от a_{cut} .

a_{cut}	a_{new} (новое равновесное расстояние)
$1.4a$	0.9758
$2.1a$	0.9671

Таблица 4: Новое равновесное расстояние.

Корректировка потенциала

$$\tilde{\Pi}_{new}(r) = \tilde{\Pi}(r) - (\tilde{\Pi}(a) - \tilde{\Pi}(a_{new}))$$

a_{cut}	$(\tilde{\Pi}(a) - \tilde{\Pi}(a_{new}))$
$1.4a$	0.0297
$2.1a$	0.0124

Таблица 5: Корректировочная добавка к потенциалу.