Санкт-Петербургский государственный

политехнический университет

Курсовая работа по кристаллографии
Тема: Сплайновый потенциал Леннард-Джонса

Выполнил студент

30510/1 группы

Физико-механический факультет

Р.Н. Симонов

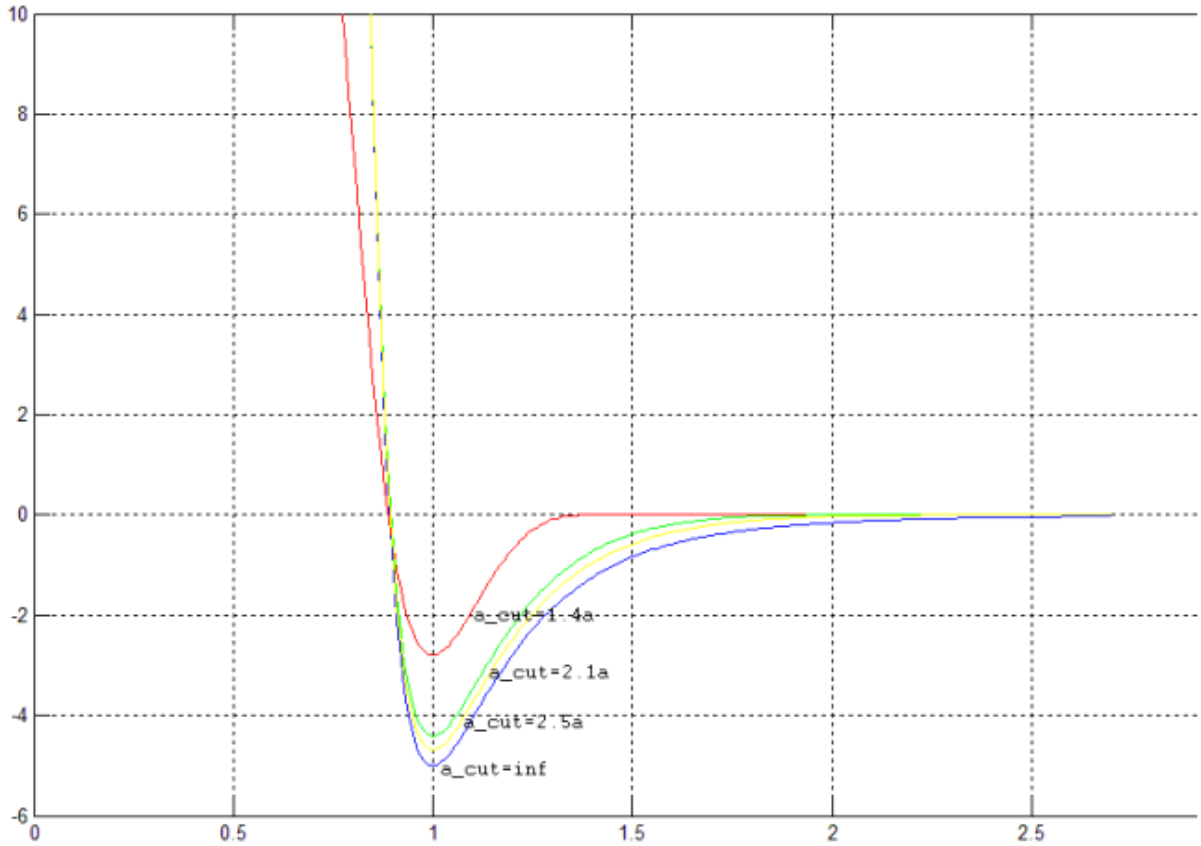
3” июня 2013г

Санкт-Петербург

2013

Сплайновый потенциал Леннард-Джонса

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



Зависимость энергии связи от радиуса обрезания

a_cut – радиус обрезания	П/D
1.17	-0.2000
1.4	-0.5583
1.5	-0.6440
1.6	-0.7102
1.7	-0.7622
1.8	-0.8033
1.9	-0.8361
2.0	-0.8625
2.1	-0.8840
2.2	-0.9013
2.3	-0.9156
2.4	-0.9275
2.5	-0.9374

Определить значение коэффициента объемного сжатия для данных радиусов обрезания

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

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

μ – координационное число решетки, d – размерность пространства

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

a_cut	***K***
2.1	$\frac{22.72352836\,D}{a^3}$
2.5	$\frac{25.72819836\,D}{a^3}$

Равновесное расстояние

a_cut	***Равновесное расстояние***
2.1a	***0.9969a***
2.5a	***0.9942a***

Корректировка значения коэффициента объемного сжатия

a_cut	***K***
2.1	$\frac{1.59731768\,D}{a^3}$
2.5	$\frac{3.13487271\,D}{a^3}$