Санкт-Петербургский Государственный Политехнический Университет

Курсовой проект по предмету

современные проблемы естествознания

Тема: «Сплайновый потенциал Леннарда-Джонса»

Студента группы 30510/1
Степанова Алексея

СПб 2013

Оглавление

I. Определение зависимости энергии связи потенциала Леннарда-Джонса от радиуса обрезания.....3

II. Определение потенциальной энергии для радиусов обрезания 1.4a, 2.1a, 2.5a для квадратной решетки. 4

III. Нахождение равновесного расстояния для радиусов обрезания из пункта II. 5

IV. Корректировка значения потенциальной энергии 6

I. Определение зависимости энергии связи потенциала Леннарда-Джонса от радиуса обрезания.

```
function [a] = fun1(x, ksi, c)
    a = 0;
    b = (13/7)^(1/6);
    if(c/ksi>=x)
        a = 0;
        return;
    end
    if(c/b <= x)
        a = (c^(13)*x.^(13) - c^(-7)*x.^(7));
        return;
    end
    k = (1 - ( ( 1 - x.^(2)*(b/c)^(2) ) / ( (ksi/c)^2*x.^(2) -
(x.^(2)*(b/c)^(2) )).^2)).^2;
    a = k*(c^(-13)*x.^(13) - c^(-7)*x.^(7));
end

%ksi*a = a_cut
%П'(x*a)
%x = x*a
Пример вызова функции в MatLab
a_cut2 = 1.4;
x2 = 1 : 0.001 : a_cut2;
c = 1;
P2 = fun1(1./x2, a_cut2, c)
```

Зависимость энергии связи от радиуса обрезания для сплайнового потенциала Леннарда-Джонса приведена в Таблица 1.

$\frac{\widetilde{\Pi}}{D}$	$\frac{a_cut}{a}$
-0.1897	1.1
-0.5583	1.4
-0.8839	2.1
-0.9374	2.5

Таблица 1

Сравнение полученных результатов с предложенными дает следующие результаты(см. Таблица 2)

$\frac{a_cut}{a}$	$\frac{\widetilde{\Pi}}{D}$	$\frac{\widetilde{\Pi}}{D}$, предоженное	Отклонение,%
1.1	-0.1897	-0.1897	0
1.4	-0.5203	-0.5583	7
2.1	-0.9006	-0.8839	2
2.5	-0.9545	-0.9374	2

Таблица 2

II. Определение потенциальной энергии для радиусов обрезания 1.4a, 2.1a, 2.5a для квадратной решетки.

a_cut – радиус обрезания	R – радиус координационной сферы	N – количество частиц на сфере	$\widetilde{\Pi}(a_cut)$
1.4	a	4	-2.2330
2.1	$\sqrt{2}a$	4	-2.7660
2.5	2a	4	-2.7930

III. Нахождение равновесного расстояния для радиусов обрезания из пункта II.

a_cut – радиус обрезания	Новое равновесное расстояние
1.4a	1
2.1a	0.9871
2.5a	0.9862

IV. Корректировка значения потенциальной энергии

Воспользуемся формулой

$$\Pi_{cor}(r) = \Pi(r) - (\Pi(a) - \Pi(a_{\text{равн}}))$$

a_cut – радиус обрезания	R – радиус координационной сферы	N – количество частиц на сфере	$\widetilde{\Pi}(a_cut)$ – скорректированное значение
1.4	a	4	-2.2330
2.1	$\sqrt{2}a$	4	-2.7901
2.5	2a	4	-2.8440