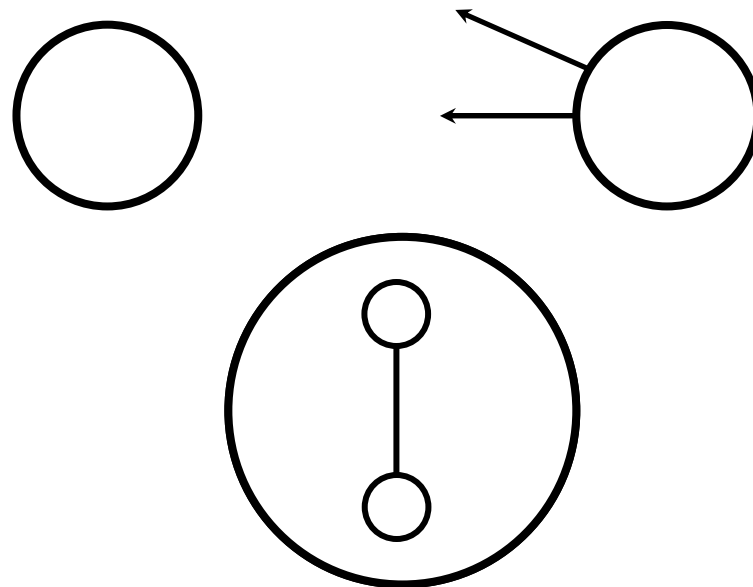


# Простые модели для описания неплотно упакованных кристаллических структур

Е.А. Подольская, А.М. Кударова

# Предисловие



# Основные сведения

- Работа посвящена неплотно упакованным кристаллическим структурам, для описания которых используются достаточно простые модели. Взаимодействие описывается модифицированным потенциалом Ми:

$$\Pi(r) = \lambda \frac{D}{n-m} \left[ m \left( \frac{a}{r} \right)^n - n \left( \frac{a}{r} \right)^m \right]$$

$\lambda = 1$       для незаряженных частиц  
 $\lambda = q_1 q_2$     для заряженных частиц

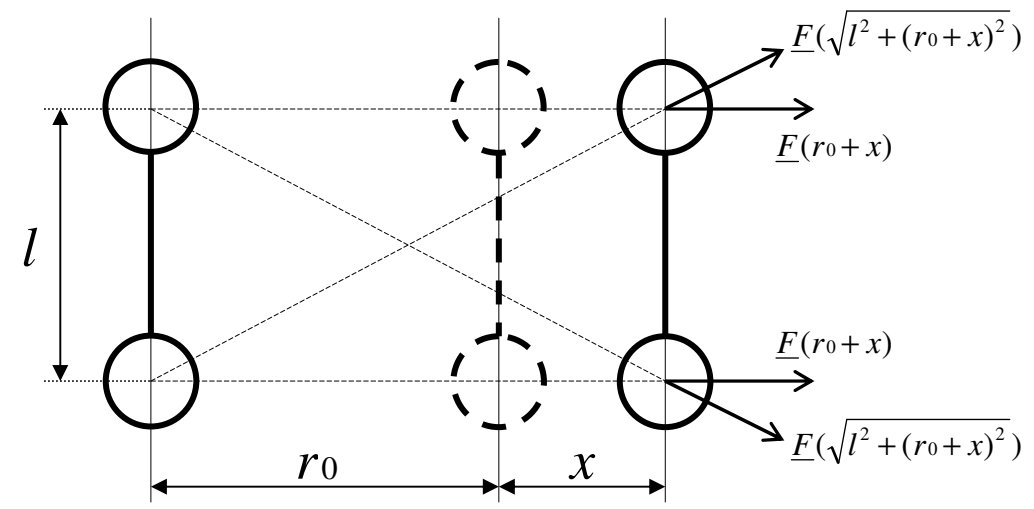
- Расчет жесткостей ведется двумя методами – динамическим и энергетическим. В соответствии с первым методом, жесткость  $C = \Pi''(r)$ , во втором методе используется разложение

$$\Pi(r_0 + x) = \Pi_0 + \alpha x + \frac{\beta}{2} x^2 + O(x^3),$$

где  $r_0$  равновесное расстояние,  $x$  малое отклонение,  $\beta$  искомая жесткость

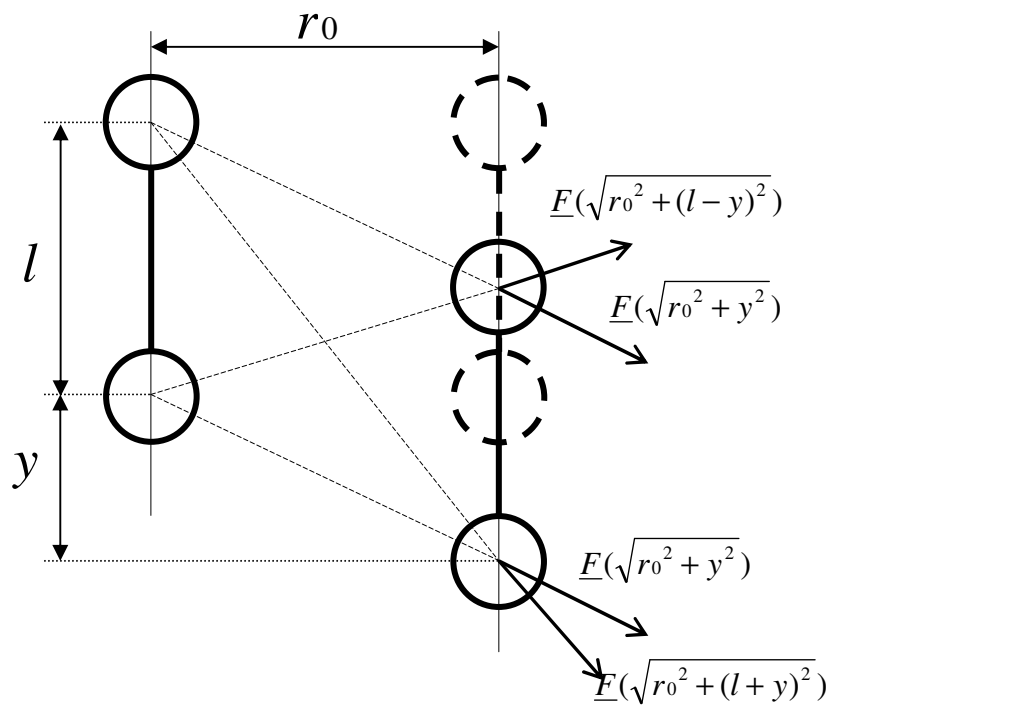
- $C_L$  продольная жесткость
- $C_T$  поперечная жесткость
- $S(x)$  сумма сил, действующих на частицу при горизонтальном смещении
- $Q(y)$  сумма сил, действующих на частицу при вертикальном смещении

# Взаимодействие неполярных частиц, состоящих из двух материальных точек



$$S(x) = 2F(\sqrt{l^2 + (r_0 + x)^2}) \frac{r}{\sqrt{l^2 + (r_0 + x)^2}} + 2F(r_0 + x)$$

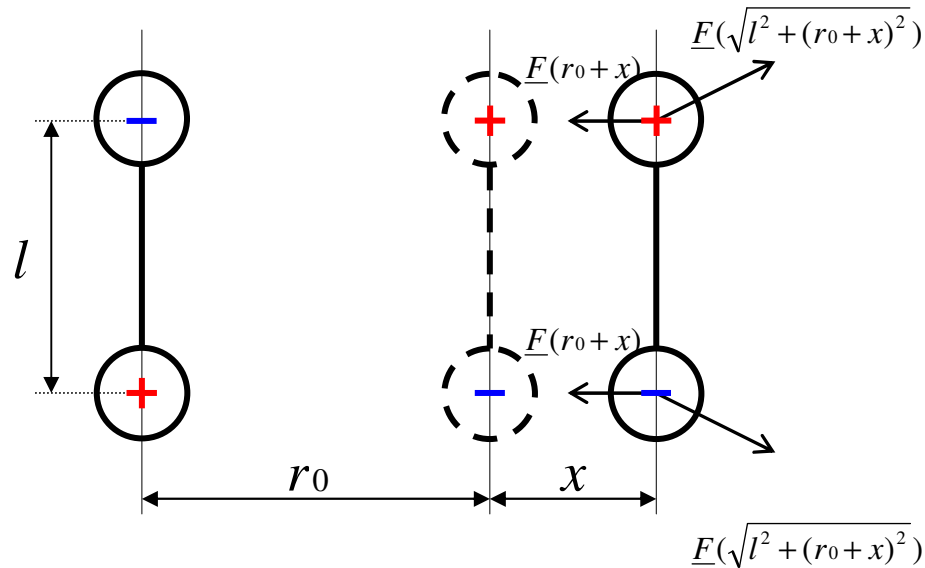
$$C_L = -S'(0)$$



$$Q(y) = F(\sqrt{r_0^2 + (l + y)^2}) \frac{l + y}{\sqrt{r_0^2 + (l + y)^2}} - F(\sqrt{r_0^2 + (l - y)^2}) \frac{l - y}{\sqrt{r_0^2 + (l - y)^2}} + 2F(\sqrt{r_0^2 + y^2}) \frac{r}{\sqrt{r_0^2 + y^2}}$$

$$C_T = -Q'(0)$$

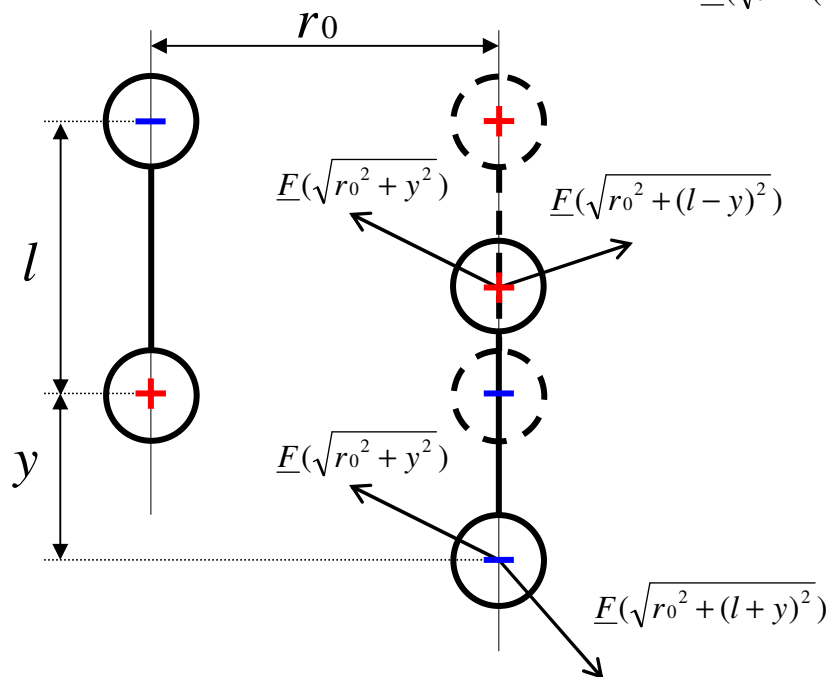
# Взаимодействие полярных частиц, состоящих из двух материальных точек



$$S(x) = 2F(\sqrt{l^2 + (r_0 + x)^2}) \frac{r}{\sqrt{l^2 + (r_0 + x)^2}} -$$

$$- 2F(r_0 + x)$$

$$C_L = -S'(0)$$



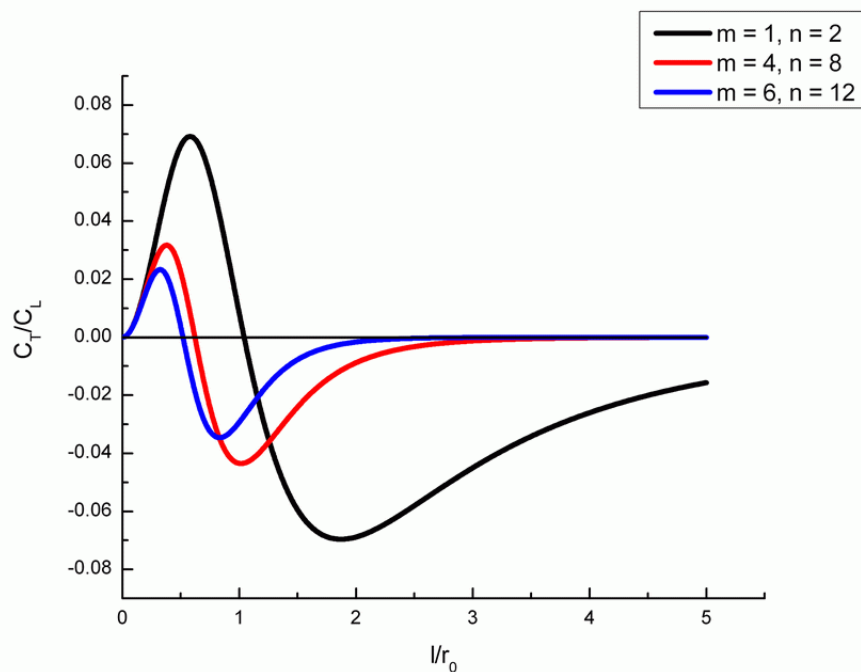
$$Q(y) = F(\sqrt{r_0^2 + (l + y)^2}) \frac{l + y}{\sqrt{r_0^2 + (l + y)^2}} -$$

$$- F(\sqrt{r_0^2 + (l - y)^2}) \frac{l - y}{\sqrt{r_0^2 + (l - y)^2}} -$$

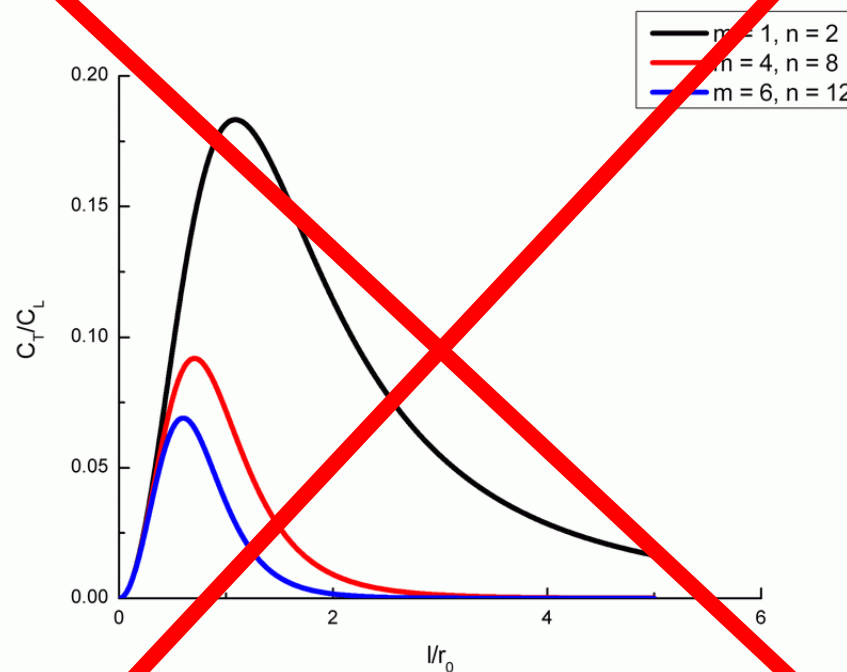
$$- 2F(\sqrt{r_0^2 + y^2}) \frac{r}{\sqrt{r_0^2 + y^2}}$$

$$C_T = -Q'(0)$$

# Графики зависимости отношения поперечной жесткости к продольной от геометрических характеристик и параметров потенциала



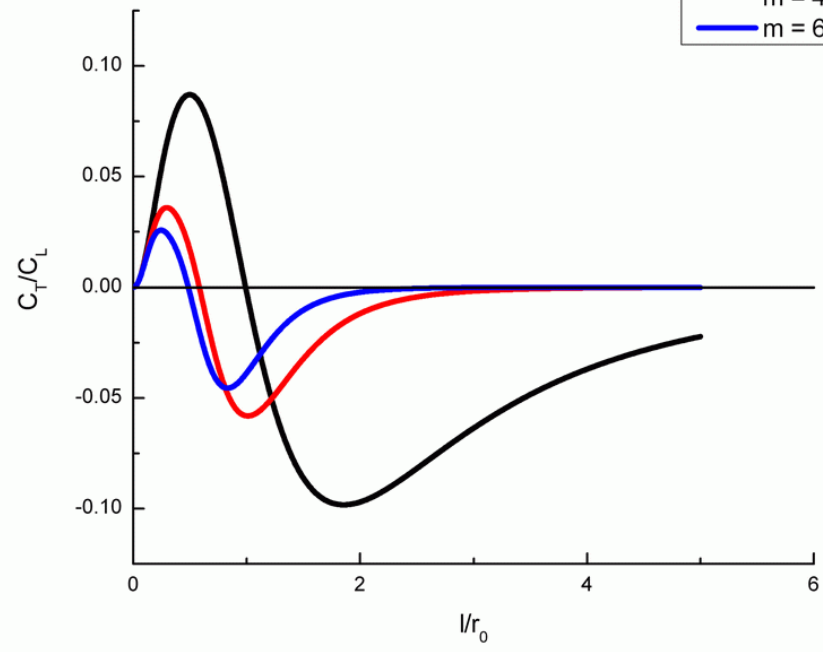
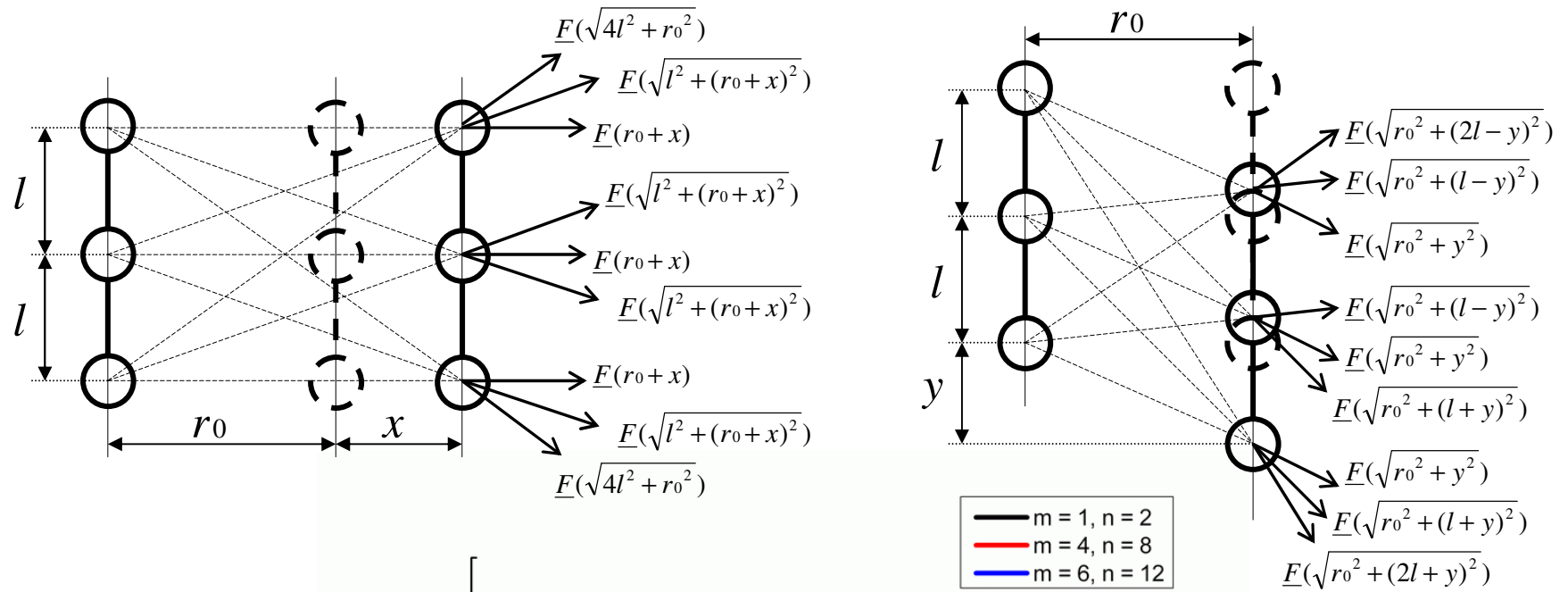
неполярная структура



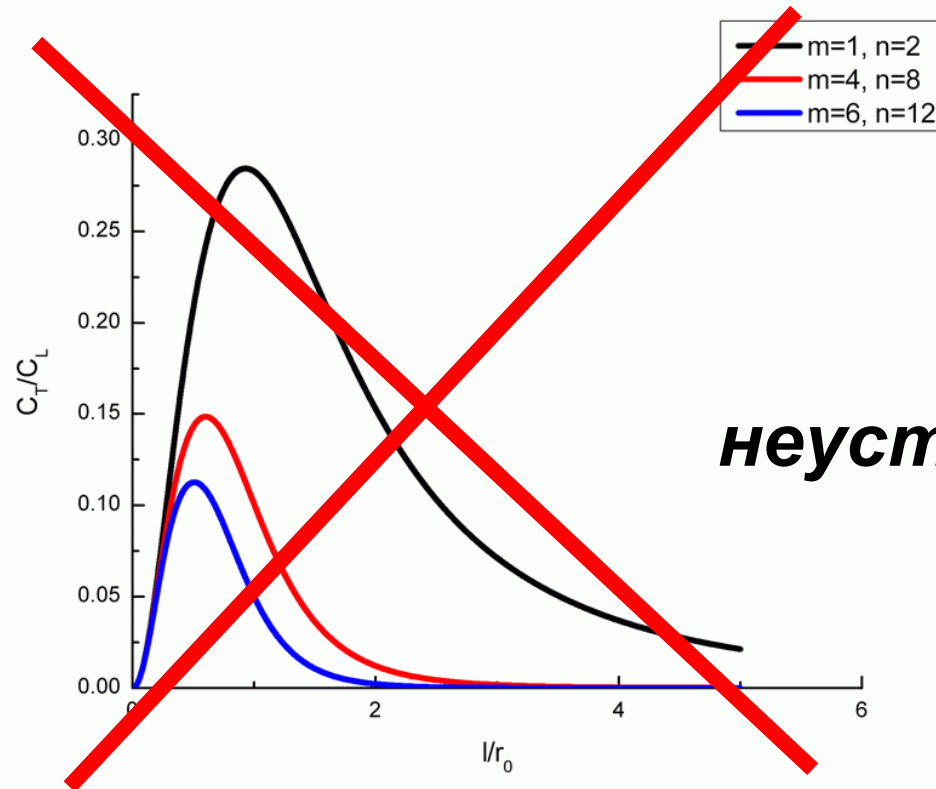
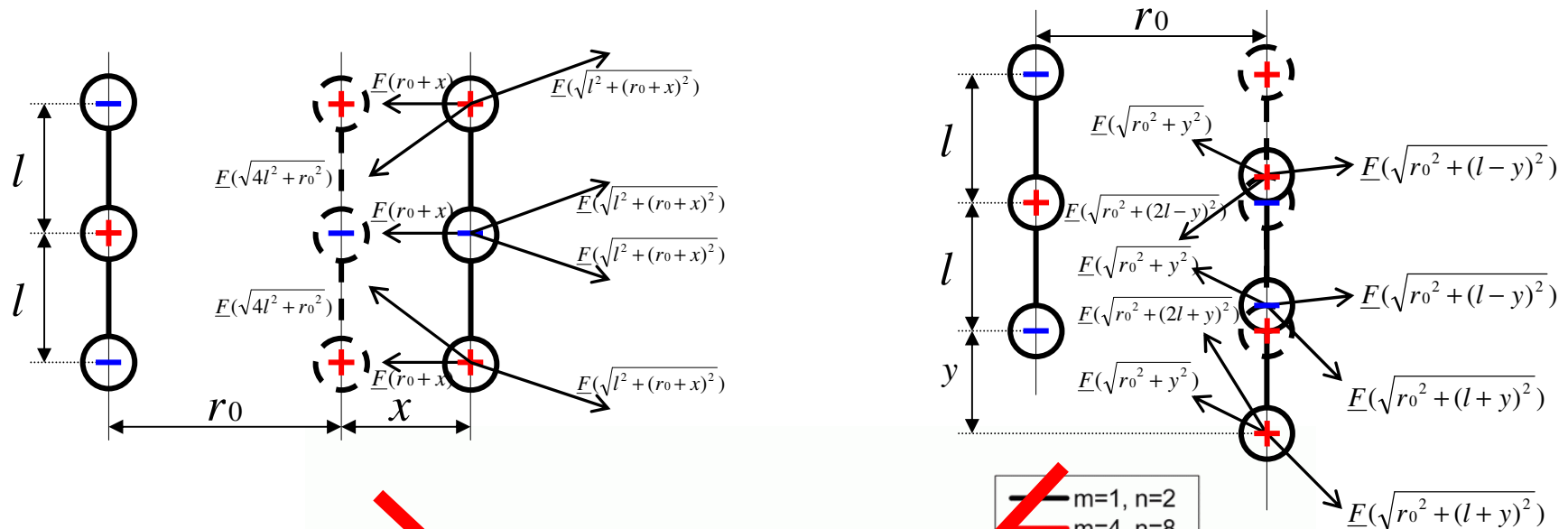
полярная структура

**неустойчивость**

# Взаимодействие неполярных частиц, состоящих из трех материальных точек



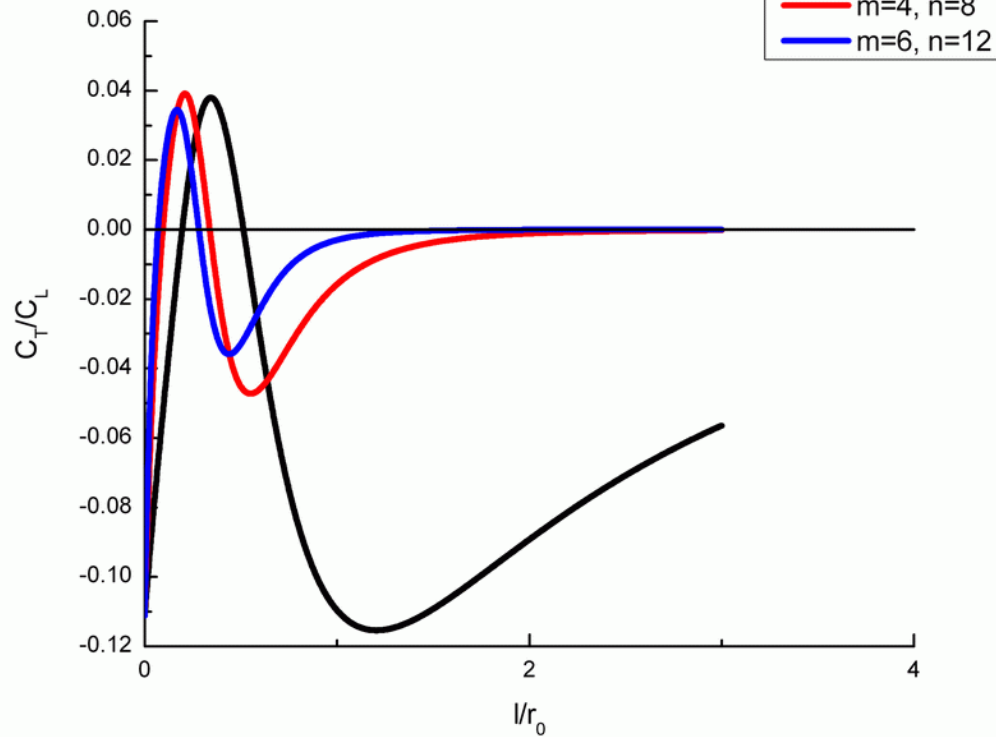
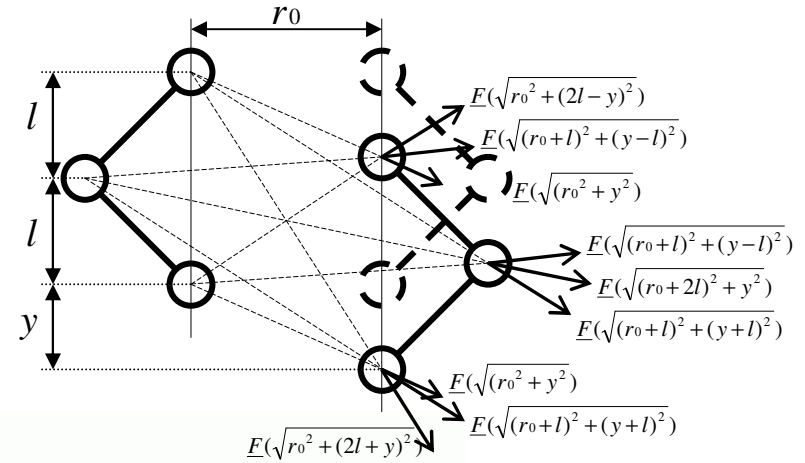
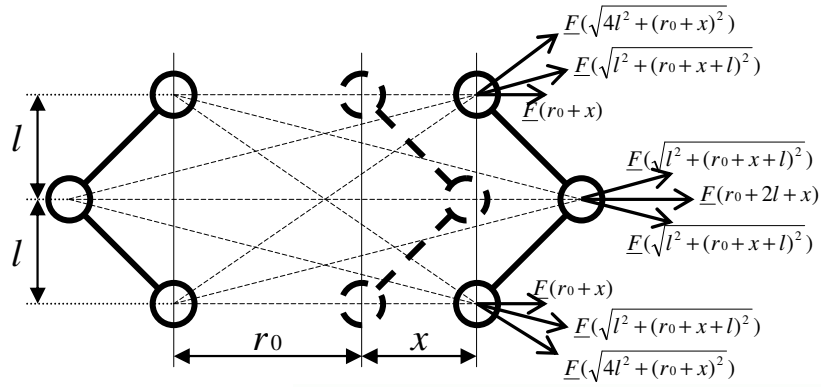
# Взаимодействие полярных частиц, состоящих из трех материальных точек



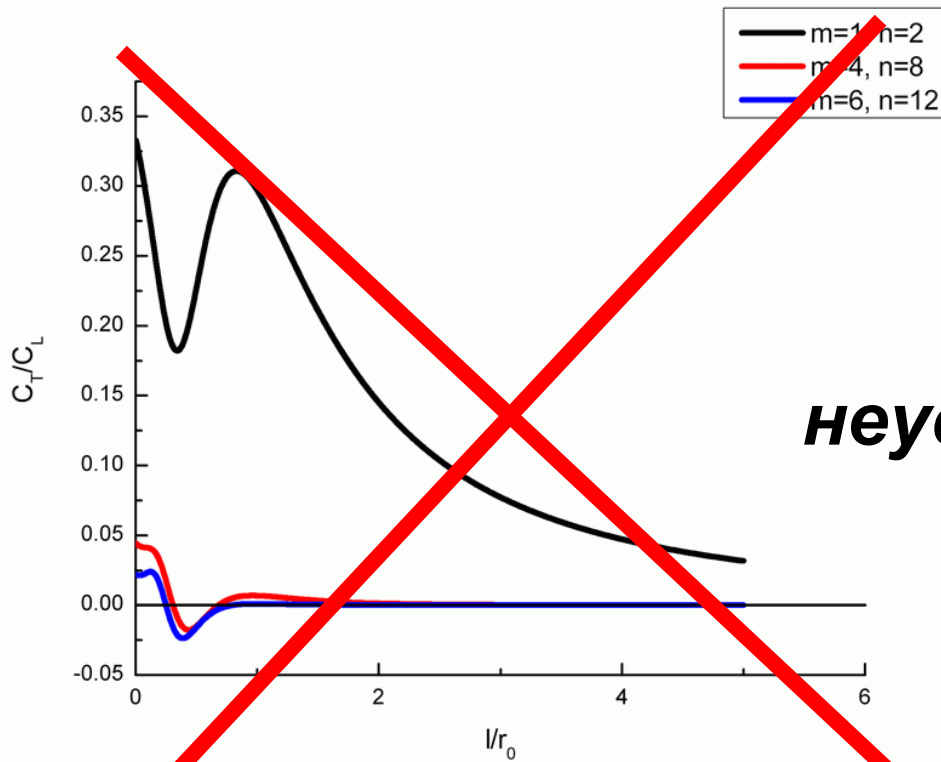
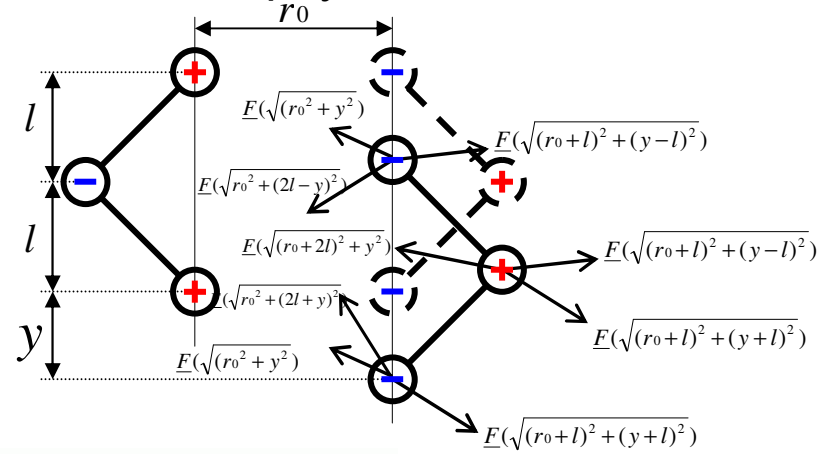
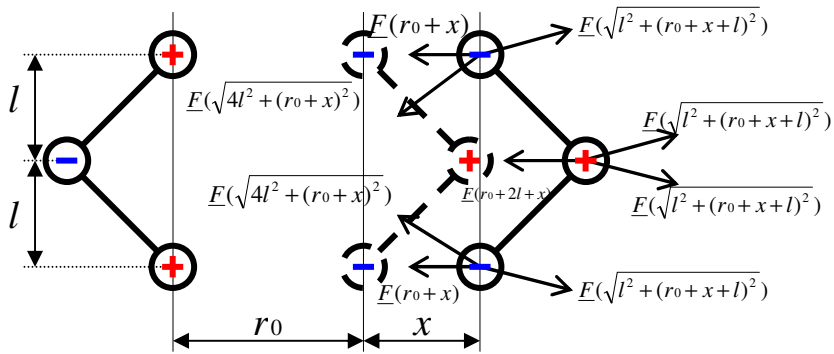
**неустойчивость**



# Взаимодействие неполярных частиц вида «треугольник»


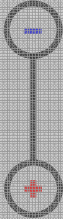


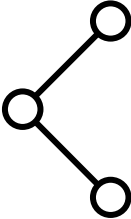
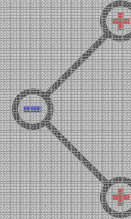


# Взаимодействие полярных частиц вида «треугольник»



**неустойчивость**

# Результаты

структура						
m,n						
1, 2	6.90	18.32	8.71	28.50	3.80	33.30
3, 6	3.86	11.02	4.50	17.53	4.10	7.00
4, 8	3.17	9.19	3.60	14.57	3.85	4.40
6, 12	2.34	6.90	2.58	11.27	3.45	2.40

