

МОДЕЛИ ДЛЯ ОПИСАНИЯ НЕПЛОТНО УПАКОВАННЫХ  
КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК

В данной работе рассматривается проблема моделирования кристаллических решеток с низкой плотностью упаковки. Парные потенциалы, как известно, не всегда позволяют построить устойчивые модели таких решеток, поскольку не обеспечивают достаточную величину поперечной жесткости межатомной связи. Традиционным решением является использование многочастичных потенциалов. Альтернативный подход состоит в учете моментного вклада в межатомное взаимодействие [1, 2]. В работе [1] предлагаются два пути решения этой проблемы в рамках второго подхода: построение моментного потенциала взаимодействия или подбор формирующих структуру частиц, которые представляют собой совокупности жестко связанных материальных точек, взаимодействующих с материальными точками других частиц посредством парного потенциала. Далее будет рассмотрен второй путь. В [1] было получено заниженное отношение поперечной жесткости межатомной связи к продольной по сравнению с известными экспериментальными значениями для решетки графита. Задача данной работы состоит в увеличении этого отношения. Предлагаются к рассмотрению шесть моделей, три из которых являются полярными, а три другие — неполярными.

Рассмотрим две частицы, каждая из которых состоит из двух жестко связанных между собой материальных точек (рис. 1). Пусть взаимодействие между материальными точками, формирующими частицы, описывается парным потенциалом  $\Pi(r)$ . Для конкретных расчетов будем использовать модифицированный потенциал  $M_i$

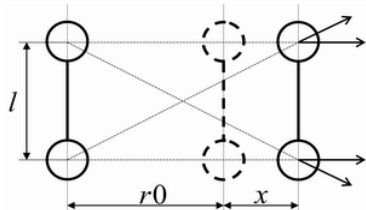


Рис. 1

$$\Pi(r) = \lambda \frac{D}{n-m} \left[ m \left( \frac{a}{r} \right)^n - n \left( \frac{a}{r} \right)^m \right]. \quad (1)$$

Здесь  $\lambda = 1$  для неполярных частиц,  $\lambda = \pm 1$  для полярных частиц,  $D$  — энергия взаимодействия,  $a$  — параметр, характеризующий протяженность взаимодействия,  $m$  и  $n$  — параметры потенциала. Отклоним одну частицу из положения равновесия (обозначенного на рисунке пунктиром) на малое расстояние  $x$  в направлении, указанном на рис. 1. Введем обозначения:  $r_0$  — равновесное расстояние,  $P(r) = \frac{F(r)}{r}$ ,  $F(r) = -\Pi'(r)$ .

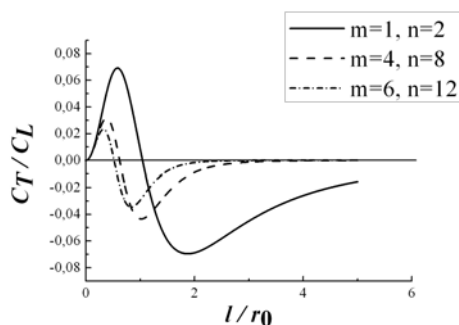


Рис. 2

На отклоненную частицу будет действовать сила

$$S(x) = 2P \left( \sqrt{l^2 + (r_0 + x)^2} \right) (r_0 + x) + 2F(r_0 + x).$$

Тогда продольная жесткость будет определяться формулой  $C_L = -S'(0)$ .

Аналогично получим выражение для поперечной жесткости  $C_T$ , рассмотрев отклонение частицы на малое расстояние  $y$  в направлении, перпендикулярном указанному на рис. 1. Таким образом, получены значения жесткостей в зависимости от геометрических характеристик

структур, а также параметров потенциала взаимодействия точек частиц. Результат представлен в виде графика на рис. 2. На оси абсцисс отложено отношение характерной длины частицы  $l$  к равному расстоянию между частицами  $r_0$ , на оси ординат — отношение поперечной жесткости  $C_T$  к продольной  $C_L$ .

Интерес представляет только та часть графика, которая соответствует положительному отношению жесткостей. В данном случае и продольная, и поперечная жесткости на рассматриваемом участке положительны, и система устойчива.

Теперь рассмотрим две частицы, каждая из которых состоит из двух жестко связанных между собой материальных точек. Эти точки будем называть условно «заряженными».

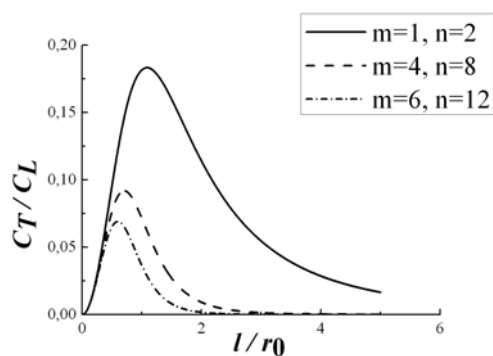


Рис. 3

Полагаем, что при взаимодействии одноименно «заряженных» точек коэффициент  $\lambda$  в формуле (1) равен 1, при взаимодействии разноименно «заряженных» точек  $\lambda = -1$ . На рис. 3 представлен график зависимости отношения поперечной жесткости к продольной ( $C_T/C_L$ ) от отношения характерной длины частицы к равному расстоянию между частицами ( $l/r_0$ ). Данная система не является устойчивой, так как и продольная, и поперечная жесткости отрицательны.

Далее рассмотрим структуры, состоящие из трех жестко связанных между собой материальных точек. Результаты аналогичны полученным выше: неполярные частицы составляют устойчивую систему, а внесение «заряда» приводит к неустойчивости.

Итак, в работе представлено шесть моделей для описания неплотно упакованных кристаллических структур. Было показано, что полярные модели позволяют получить более высокое отношение поперечной жесткости к продольной, чем неполярные, но при этом оказываются неустойчивыми. Максимальные отношения поперечной жесткости к продольной для представленных структур (в процентах) в зависимости от параметров потенциала сведены в табл. 1.

Таблица 1.

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

поперечной жесткости. Тем не менее, приведенный результат в четыре раза больше полученного в [1]. Таким образом, представляется целесообразным продолжить поиск другого вида частиц, формирующих структуру.

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. Беринский И.Е., Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. Изв. РАН, МТТ, №5, 2007.
2. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. ПММ. 2007. Т. 71. Вып. 4. с. 595-615.