УДК 539.215.2

СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РЕГУЛЯРНОЙ ШАРОВОЙ УПАКОВКИ

В.Г. Бондарев, Л.В. Мигаль, Т.П. Бондарева

Белгородский государственный национальный исследовательский университет
bondarev@bsu.edu.ru

Исходя из представлений о шестимерности физического пространства получено уравнение плотности регулярной упаковки шаров как функции эффективного координационного числа и размерности пространства. Дополнительно также улучшена полуэмпирическая формула для определения зависимости координационного числа от расстояния до второй координационной сферы регулярной упаковки.

Ключевые слова: моделирование, регулярная шаровая упаковка, плотность упаковки, координационное число, размерность пространства.

Как отмечалось ранее [1, 2], в теории плотноупакованных систем частиц важнейшими структурными характеристиками их упаковки являются плотность упаковки и координационное число. При этом плотность упаковки характеризует способ пространственного размещения частиц вокруг некоторой отдельно выбранной частицы, а координационное число указывает количество частиц, контактирующих или расположенных вблизи выбранной частицы. Основными результатами, полученными при проведении исследований, явились численные данные по плотности упаковки шаров η в зависимости от величины координационного числа Z в пространствах различных размерностей (см. табл.).

Как видно из таблицы, наибольшую из возможных плотность упаковки имеет регулярная упаковка шаров в одномерном пространстве, где плотность упаковки достигает своего максимального значения равного единице [6]. Система дисков, расположенных в двухмерном пространстве, имеет только две возможные плотные регулярные упаковки. Это квадратная упаковка, имеющая координационное число равное четырем, и гексагональная упаковка с координационным числом равным шести.

Плотность регулярной упаковки η шаров в зависимости от координационного числа Z и размерности n пространства

Размерность, n	Координационное число, Z						
	2	4	6	8_1	8_2	10	12
1	1						
2		0,7854	0,9069				
3			0,5236	0,6046	0,6802	0,6981	0,7405
R_2			$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2/3}$	$\sqrt{6}/2$	$\sqrt{3}$

Примечание: 8_1 – Кубическая гранецентрированная упаковка;
8_2 – Кубическая объемно центрированная упаковка;
R_2 – Расстояние до второй координационной сферы.

Наибольшую группу регулярных упаковок представляет система шаров, расположенная в трехмерном пространстве. К ним относятся кубическая простая (Z=6), объемно центрированная кубическая (ОЦК) и кубическая гексагональная упаковка (Z=8), тетрагональная (Z=10), а также гранецентрированная кубическая (ГЦК) и гексагональная плотная упаковка (ГПУ), имеющие одинаковые координационные числа Z=12.

Особое положение занимают упаковки, имеющие одинаковые значения координационных чисел. К ним относятся упаковки шаров в трехмерном пространстве с одинаковыми координационными числами и Z=12. Это такие упаковки, как объемно центрированная кубическая и кубическая гексагональная упаковка с координационным числом Z=8, а также гранецентрированная кубическая и гексагональная плотная упаковка, имеющие координационное число Z=12. Если последние отличаются между собой топологически, то ОЦК и кубическая гексагональная упаковки разнятся по структурному расположению шаров во второй координационной сфере. Необходимо также отметить и аналогичную закономерность в тетрагональной упаковке. Для определения однозначного отличия данных шаровых упаковок было предложено ввести понятие эффективного координационного числа [3]. Для ОЦК-упаковки эффективное координационное число определяется как 8+(6), где число 6 является количеством шаров во второй координационной сфере. Аналогично значение эффективного координационного числа для кубической гексагональной упаковки принято представлять в виде 10+(4). Однако такое представление координационного числа не дает нам возможности для сравнения координационных чисел различных упаковок и более того не позволяет использовать их в математических расчетах. Именно для решения данной задачи в этой работе приведены результаты вывода уравнения для определения плотности упаковки регулярных шаровых упаковок плотноупакованных систем частиц в зависимости от координационного числа и размерности пространства, а также определения зависимостей координационных чисел от расстояний между частицами в шаровой упаковке.

При построении математической модели, определяющей зависимость плотности регулярной упаковки частиц от координационного числа в пространствах различной размерности необходимо сделать ряд априорных допущений. Во-первых, будем считать, что пространство, в котором расположена рассматриваемая система шаров, будет определяться как шестимерное пространство [4], имеющее жесткую парную связь собственных одномерных пространств и антипространств. Основанием для такого утверждения также является и известное выражение для определения пространственного интервала s [5]

$$s = \pm\sqrt{\sum_{i=1}^{3} x_i^2}\ , \qquad (1)$$

где i – номер выбранного одномерного подпространства.

Во-вторых, введем понятие приведенного координационного числа u, которое будет представлять собой число возможных контактов в шестимерном пространстве. В третьих, будем считать прямо пропорциональными бесконечно малые изменения абсолютных значений относительного приращения объема W шестимерного пространства и обратно пропорциональными относительно изменения приведенного координационного числа u. Данное утверждение можно записать в следующем виде

$$dW = A\frac{W}{u}du\ , \qquad (2)$$

где A – коэффициент пропорциональности (при дальнейшем рассмотрении априорно примем данный коэффициент пропорциональности численно равным единице).

Проинтегрировав данное уравнение в пределах для объема от максимального значения W_{max} до некоторого текущего значения W, а для приведенного координационного числа от минимального значения u_{min} до текущего значения u получим

$$W = \frac{W_{max} u_{min}}{u}. \tag{3}$$

Согласно [6], объем области W, занимаемый частицами в шестимерном пространстве, можно выразить через объем V трехмерного пространства: $W = V^2$, что позволяет записать выражение (3) в следующем виде

$$V = V_{max} \sqrt{\frac{u_{min}}{u}}. \tag{4}$$

Плотность упаковки частиц η по определению можно представить в виде

$$\eta = \frac{V_p}{V}, \tag{5}$$

где V_p – объем твердой фазы шаровой упаковки.

Если принять объем твердой фазы V_p неизменяемой величиной, то подставляя в выражение (5) формулу (4) для плотности упаковки частиц получим следующее уравнение

$$\eta = \eta_{min} \sqrt{\frac{u}{u_{min}}} \tag{6}$$

Приведенное координационное число u является функцией самого координационного числа Z и размерности пространства n. Если мы будем считать, что координационное число и размерность пространства являются независимыми параметрами, то это позволяет нам записать выражение для приведенного координационного числа u в интегральном виде

$$u(Z,n) = \int_0^Z dZ + \int_{2n}^6 dn, \tag{7}$$

здесь нижний предел для размерности пространства учитывает выше сделанное допущение о жесткой парной связи одномерных подпространств. После проведения интегрирования уравнения (7) для приведенного координационного числа u получим следующее выражение

$$u(Z,n) = Z + 2(3-n). \tag{8}$$

Подставляя выражение (8) в формулу (6) для плотности упаковки частиц получим следующее уравнение

$$\eta = \eta_{\min} \sqrt{\frac{Z + 2(3-n)}{Z_{\min}}} . \qquad (9)$$

Минимальную плотность упаковки $\eta_{\min}$ можно также выразить через размерность пространства в виде

$$\eta_{\min} = \left(\frac{\pi}{2n}\right)^{\delta(n)} , \qquad (10)$$

где $\delta(n)$ – прерывная функция, которую можно представить следующим образом

$$\delta(n) = \begin{cases} 0, & n = 1; \\ 1, & n = 2,3. \end{cases} \qquad (11)$$

Учитывая, что минимальное координационное число $Z_{\min}$ в трехмерном пространстве для плотной шаровой упаковки составляет значение равное шести, окончательно получим

$$\eta = \left(\frac{\pi}{2n}\right)^{\delta(n)} \cdot \sqrt{\frac{Z + 2(3-n)}{6}} . \qquad (12)$$

Полученное уравнение (12) для плотности регулярной упаковки позволяет нам рассчитывать ее значения для рассмотренных ранее пространственных измерений. В тоже время, реальные значения плотности упаковки для ОЦК-упаковки, а также для кубической гексагональной, будут иметь несколько иные значения координационных чисел. Так, в этом случае, эффективное координационное число для ОЦК-упаковки вместо значения восемь составит величину 10,125, а для кубической гексагональной упаковки вместо значения десять – 10,6665.

С целью проверки правильности нашего подхода к определению эффективного координационного числа дополнительно проведем анализ формулы для плотности упаковки через зависимость координационного числа от расстояний между выбранной частицей и ее соседями во второй координационной сфере. Для этого воспользуемся полуэмпирическим выражением для данной зависимости, предложенным нами ранее [7]

$$Z = \sum_{i=1}^{m} \exp\{\alpha[1 - (r_i / \sigma)^6]\} , \qquad (13)$$

где r_i – расстояние между частицей и ее i-м соседом; σ – диаметр частицы; m – число частиц, входящих в области первой и второй координационных сфер; α – константа (в работе [7] принималась равной единице для двумерного случая).

Величину константы α определим на основании значений координационного числа частицы в случае кубической объемно центрированной упаковки. Подставив в уравнение (13) значения эффективного координационного числа для данной упаковки (Z= 10,125), а также значение расстояния r для частиц второй координационной сферы из таблицы, можно рассчитать величину данной константы. Ее значение в данном случае составит: α = 0,75744. Проведя расчет по данной формуле (13), с учетом значения данной константы, для тетрагональной упаковки получим величину эффективного координационного числа: Z = 10,6665, что совпадает с расчетным значением с точностью до 4 знака после запятой.

Литература

1. Сережкин В.Н., Пушкин Д.В. Кристаллохимические радиусы и координационные числа атомов. – Самара: Самарский ун-т, 2004. – 52 с.

2. Белик В.Д. Связь между плотностью упаковки и координационным числом порошковых смесей. 1. Двухчастичная функция микрочастиц и её геометрическая интерпретация // Порошковая металлургия. 1989. №6. С.21-25.

3. Жданов Г.С. Физика твердого тела. – М.: Изд-во МГУ, 1962. – 504 с.

4. Наан Г.И. Симметричная Вселенная // Публикации Тартуской астрономической обсерватории. 1964. Т. XXXIV, № 2. С. 421-444.

5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Теория поля. – М., Наука, 1988. – 509 с.

6. Conway J.H., Sloane N.J.A. Sphere Packings, Lattices and Groups. – New York: Springer Verlag, 1998. – 816 p.

7. Бондарев В.Г., Мигаль Л.В., Бондарева Т.П. Имитационное моделирование структуры плотноупакованных систем твердых дисков // Научные ведомости БелГУ. Серия: Математика. Физика. 2008. Т. 14. № 9(49). С. 248-260.

MATHEMATICAL MODEL REGULAR BALL PACKING

V.G. Bondarev, L.V. Migal, T.P. Bondareva

Belgorod State National Research University

Based on the representations of the six-dimensional physical space obtained by the equation density regular packing of spheres as a function of effective coordination number and dimension of the space. In addition, also improved semi-empirical formula for determining the dependence of the effective coordination of the distance to the second coordination sphere of the regular package.

Keywords: modeling, regular spherical packing, packing density, the coordination number, the dimension of space.