

ФИЗИКА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ

УДК 537.226.4

ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ ПОДХОД К РАСЧЕТУ ПЛОТНОСТИ СТРУКТУР ПОРИСТЫХ 2D МАТЕРИАЛОВ

О.В. Малышкина¹, Ю.А. Малышкин²

¹ Тверской государственной университет

² МГУ им. Ломоносова, механико-математический факультет

Для 2D структур, имеющих пористую структуру (или межкристаллитную аморфную фазу), проведен расчет плотности заполнения плоскости основной фазой. Показано, что максимальный коэффициент заполнения (т.е. плотность упаковки) составляет 90%.

Ключевые слова: пористые двухмерные структуры, плотность упаковки

Введение. В последнее время увеличился интерес к исследованию материалов, которые можно назвать двухмерными, поскольку их толщина значительно меньше линейных размеров. Если структурный подход к исследованию объемных материалов достаточно полно рассмотрен в кристаллографии, то подобные двухмерные структуры изучаются с помощью математической теории замощения (периодической мозаики). Существует только три правильных многоугольника, которыми можно замостить плоскость (правильный треугольник, квадрат и правильный шестиугольник), их можно принять за элементарную ячейку плоских структур.

В то же время, при формировании наноструктур на плоскости возможно отклонение от плотной упаковки – между кристаллитами остаются воздушные поры или происходит образование межкристаллитной аморфной фазы, отличающейся по свойствам от свойств основного материала. Для математического моделирования физических свойств данных структур важна такая характеристика, как плотность упаковки (w), т.е. отношение площади, заполненной основной фазой, к площади всей плоскости [1].

Поскольку случай кристаллитов произвольной формы, хаотически расположенных на плоскости, в общем виде не рассчитывается, то в данной работе рассмотрен идеализированный подход: предполагается, что кристаллиты имеют форму правильных многоугольников, которые заполняют плоскость *максимально плотно*, но при этом не имеют общих частей плоских фигур. Таким образом, цель работы – найти плотность упаковки n -угольников (w) на

плоскости, т.е. отношение площади всех многоугольников к площади всей плоскости.

Предельный случай $n \rightarrow \infty$ (круг). При заполнении плоскости равными кругами, каждый круг может быть окружен максимум шестью кругами. Такая упаковка является максимально плотной [2].

Для нахождения плотности упаковки опишем вокруг каждого круга шестиугольник. Поскольку правильные шестиугольники полностью заполняют плоскость, то:

$$w_{кр} = \frac{S_{кр}}{S_6},$$

$$S_{6k} = 0.5nar = \frac{nr^2}{\operatorname{tg}\left(\frac{90^\circ(n-2)}{n}\right)}$$

$$\frac{S_{кр} = \pi R^2}{S_6 = 2\sqrt{3}R^2} \Rightarrow w = \frac{\pi}{2\sqrt{3}},$$

где R – радиус круга. Для плотности заполнения плоскости кругами имеем $w_{кр} \approx 0,9069$.

1. Случай $n=2k, k \in \mathbb{N}$

$6k$ -угольник. Если вокруг окружности описать правильный $6k$ -угольник, то он будет находиться внутри правильного шестиугольника, описанного вокруг этой окружности. Если окружности упакованы наиболее плотно, то каждый $6k$ -угольник будет иметь общую сторону с шестью соседними $6k$ -угольниками, и, значит, $6k$ -угольники будут упакованы наиболее плотно. В результате плотность упаковки равна

$$w_{6k} = \frac{S_{6k}}{S_6},$$

где
$$S_{6k} = 0.5nar = \frac{nr^2}{\operatorname{tg}\left(\frac{90^\circ(n-2)}{n}\right)}.$$

Тогда
$$w_{6k} = \frac{n}{2\sqrt{3} \operatorname{tg}\left(\frac{90^\circ(n-2)}{n}\right)}. \quad (1)$$

Восьмиугольник. Рассмотрим ряд восьмиугольников, полученный параллельным переносом одного восьмиугольника вдоль некоторой произвольной прямой, проходящей через его центр, так,

чтобы два любых соседних восьмиугольника имели либо общую точку, либо общий отрезок.

Упакуем плоскость такими рядами. При этом прямые, соединяющие центры восьмиугольников, параллельны. Упаковка плоскости будет наиболее плотной тогда, когда ряды вставлены друг в друга (в этом случае каждый восьмиугольник касается шести других). Поскольку восьмиугольники можно располагать в ряды по-разному, то могут получиться различные заполнения плоскости. На рис. 1 приведены три различных примера таких упаковок.

При таком заполнении плоскости между восьмиугольниками в рядах образуются "пустоты", каждая из которых окружена тремя восьмиугольниками. На каждый восьмиугольник приходится две пустоты (т.к. каждая пустота окружена тремя восьмиугольниками, а каждый восьмиугольник – шестью пустотами).

Один восьмиугольник и две окружающие его пустоты можно рассматривать как элементарную ячейку, замощающую плоскость. Для определения площади элементарной ячейки рассмотрим формы этих пустот на примере движения двух восьмиугольников вокруг третьего (рис. 2). Будем двигать верхний восьмиугольник вдоль прямой АВ со скоростью V_1 , а правый восьмиугольник вдоль прямой АС со скоростью V_2 так, чтобы они постоянно касались друг друга. При этом форма пустоты будет меняться от равнобедренного прямоугольника (рис. 1, а) до вогнутого четырехугольника, граница которого состоит из боковых сторон двух равнобедренных треугольников (рис. 1, в).

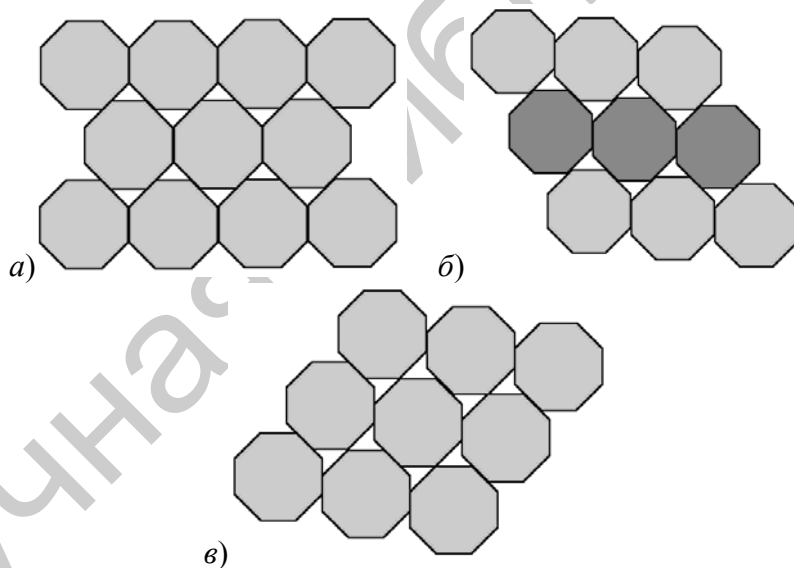


Рис. 1. Примеры упаковки плоскости правильными восьмиугольниками

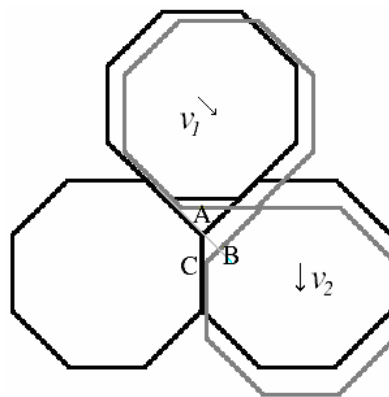


Рис. 2. "Движение" восьмиугольников

Найдем соотношение между скоростями V_1 и V_2 . Поскольку в восьмиугольнике угол равен 135° , то $\angle BCA = \angle BAC = 45^\circ$. Из рис. 2 видно, что $\frac{V_2}{V_1} = \frac{|AC|}{|AB|} = \sqrt{2}$. Найдем зависимость площади пустоты от времени при движении между двумя изображенными на рис. 2 положениями. Согласно рис. 3 она равна

$$S_{KMNL} = S_{KML} + S_{MNL} = 1/2 KM \cdot KL \cdot \sin \angle MKL + 1/2 MN \cdot NL \cdot \sin \angle MNL .$$

Рассмотрим форму пустоты в некоторый момент времени t (рис. 3).

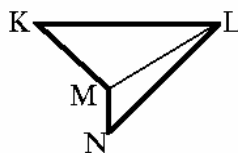


Рис. 3. Нахождение объема пустоты

В момент времени $t = 0$ ML совпадает с NL , тогда: $KM = LN = KL \sqrt{2}/2 = a\sqrt{2}/2$, где a – сторона восьмиугольника. Поэтому в момент времени t $KM = a\sqrt{2}/2 - V_1 t$; $NL = a\sqrt{2}/2 + V_1 t$; $MN = V_2 t = V_1 t \sqrt{2}$; $\angle MKL = \angle MNL = 45^\circ$. Тогда

$$S_{KMNL} = 1/2 \cdot (a\sqrt{2}/2 - V_1 t) \cdot a\sqrt{2}/2 + 1/2 \cdot V_1 t \sqrt{2} \cdot (a\sqrt{2}/2 + V_1 t) \cdot \sqrt{2}/2 ,$$

или, после преобразования,

$$S_{KMNL} = 1/4 \cdot (a^2 - a \cdot V_1 t \sqrt{2} + a \cdot V_1 t \sqrt{2} + 2(V_1 t)^2) = 1/4 \cdot (a^2 + 2(V_1 t)^2) .$$

Поскольку $2(V_1 t)^2 \geq 0$, то $S_{\min} = a^2/4$, при $t = 0$.

Заметим, что при дальнейшем движении форма пустоты будет изменяться в обратном порядке. Таким образом, упаковка плоскости правильными восьмиугольниками будет максимально плотной в случае, изображенном на рис. 1, а.

Найдем плотность упаковки для правильных восьмиугольников:

$$w_8 = \frac{S_8}{S_8 + 2S_{\text{пустоты}}},$$

$$S_8 = \frac{8 \cdot \operatorname{tg}\left(\frac{90^\circ(8-2)}{8}\right) a^2}{4} = 2a^2 \operatorname{tg}67,5^\circ,$$

$$w_8 = \frac{2a^2 \operatorname{tg}67,5^\circ}{2a^2 \operatorname{tg}67,5^\circ + 2a^2/4},$$

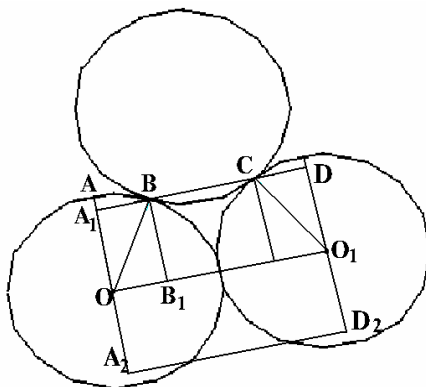
$$w_8 \approx 0,9062.$$

4k- угольник. Найдем плотность упаковки плоскости 4k-угольниками. Будем заполнять плоскость аналогично заполнению, показанному на рис. 1, а (т.е. в ряду два соседних 4k-угольника имеют общую сторону). Как было показано выше, это заполнение является наиболее плотным. Для вывода общей формулы, найдем, на какую глубину вставляется один ряд в другой. Рассмотрим (рис. 4) три соседних 4k-угольника ($k = 4$). Глубина вставки равна $2 \cdot AA_1$. Заметим, что вследствие симметрии отрезок $OB_1 = 1/2 \cdot BC = 1/4 \cdot OO_1$ и равен половине радиуса вписанной в 4k-угольник окружности. С учетом (П2), получаем:

$$OB_1 = \frac{1}{4} \operatorname{tg}\left(\frac{90^\circ(4k-2)}{4k}\right).$$

Спроецируем стороны, лежащие между точками А и В, на ось OO_1 . Получим: $1/2a$; $a \cdot \cos(90^\circ/k)$; $a \cdot \cos(90^\circ \cdot 2/k)$; ...; $a \cdot \cos(90^\circ \cdot m/k)$; $p \cdot a \cdot \cos(90^\circ \cdot (m-1)/k)$, где a – длина стороны, m – число целых сторон на участке от А до В, p – отношение длины отрезка, отсекаемого точкой В на стороне к длине стороны.

Аналогичные проекции на ось ОА: $a \cdot \sin(90^\circ/k)$; $a \cdot \sin(90^\circ \cdot 2/k)$; ...; $a \cdot \sin(90^\circ \cdot m/k)$; $p \cdot a \cdot \sin(90^\circ \cdot (m-1)/k)$.



Р и с . 4. Максимально плотное расположение $4k$ -угольников

Величину AA_1 можно определить, решая систему уравнений:

$$\begin{cases} AA_1 = a \cdot \sin(90^\circ / k) + \dots + a \cdot \sin(90^\circ \cdot m / k) + p \cdot a \cdot \sin(90^\circ \cdot (m+1) / k) \\ \frac{1}{4} \operatorname{tg}\left(\frac{90^\circ(4k-2)}{4k}\right) = 0,5 + \cos(90^\circ / k) + \dots + \cos(90^\circ \cdot m / k) + p \cdot \cos(90^\circ \cdot (m+1) / k) \end{cases}$$

$m \in Z, m \geq 0; \quad 0 < p \leq 1$

Определим элементарную ячейку, которой будем заполнять плоскость. Построим прямоугольник $OO_1D_2A_2$, симметрично относительно прямой OO_1 . Прямоугольник $A_1A_2D_2D$ является элементарной ячейкой, поскольку отрезок OO_1 есть расстояние между центрами $4k$ -угольников, а отрезок A_1A_2 – расстояние между прямыми, на которых лежат центры восьмиугольников в полосках. Заметим, что на одну элементарную ячейку приходится один $4k$ -угольник и две пустоты, поэтому плотность упаковки равна:

$$w_{4k} = \frac{S_{4k}}{S_{A_1DD_2A_2}}, \text{ где:}$$

$$S_{4k} = \frac{n \cdot a^2 \cdot \operatorname{tg}\left(\frac{90^\circ(n-2)}{n}\right)}{4},$$

$$S_{A_1DD_2A_2} = OO_1 \cdot A_1A_2 = 2r \cdot (2r - 2AA_1) = a \cdot \operatorname{tg}\left(\frac{90^\circ(n-2)}{n}\right) \times \left(a \cdot \operatorname{tg}\left(\frac{90^\circ(n-2)}{n}\right) - 2AA_1 \right)$$

$$w_{4k} = \frac{n \cdot a^2 \cdot \operatorname{tg}\left(\frac{90^\circ(n-2)}{n}\right)}{4 \cdot a^2 \cdot \operatorname{tg}\left(\frac{90^\circ(n-2)}{n}\right) \cdot \left(\operatorname{tg}\left(\frac{90^\circ(n-2)}{n}\right) - 2 \frac{AA_1}{a}\right)}$$

$$w_{4k} = \frac{n}{4 \cdot \left(\operatorname{tg}\left(\frac{90^\circ(n-2)}{n}\right) - 2 \frac{AA_1}{a}\right)} \quad (2)$$

Десятиугольник. Для десятиугольников, как и для восьмиугольников, существуют различные способы заполнения плоскости. Рассмотрим два крайних случая (рис. 5), поскольку сразу не очевидно, в каком из них плотность упаковки максимальна.

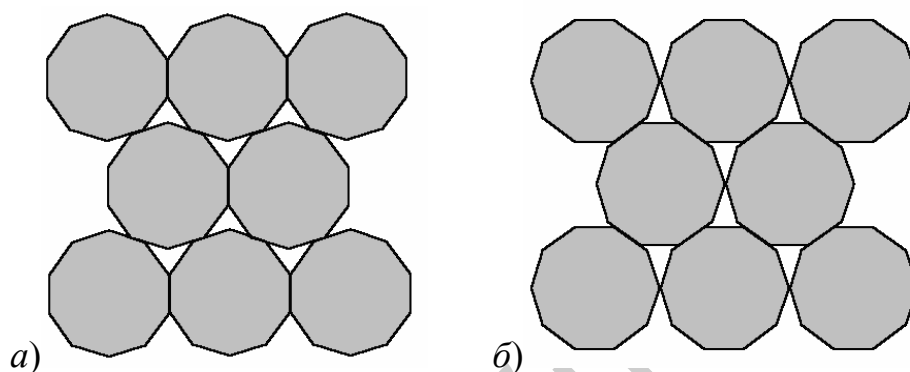


Рис. 5. Примеры возможных заполнений плоскости десятиугольниками

Найдем площади пустот для каждого из представленных случаев (рис. 6).

В случае, показанном на рис. 6, а, пустота имеет форму четырехугольника ABCD. Его площадь найдем как сумму площадей двух равных треугольников ABD и BCD. Учтем, что $\angle\alpha = \angle\beta = 36^\circ$, как угол смежный с внутренним углом десятиугольника, равным 144° . Имеем

$$S_{BCD} = \frac{1}{2} a \cdot \frac{a}{2} \operatorname{tg}\alpha,$$

тогда

$$S_{ABCD} = \frac{a^2}{2} \operatorname{tg}36^\circ.$$

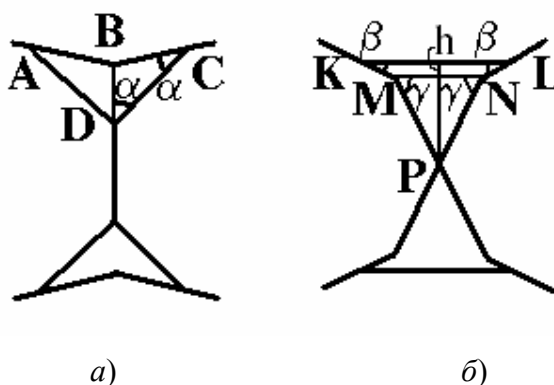


Рис. 6. Нахождение объема пустот упаковок десятиугольников, представленных на рис. 5

В случае, показанном на рис. 6, б, пустота имеет форму пятиугольника KLNPM, площадь которого найдем как сумму площадей треугольника MNP и трапеции KLMN. Т. к. $\angle NPM = \alpha$, то $\gamma = 72^\circ$. Поскольку $MN = 2a \cdot \cos \gamma$, то

$$S_{PMN} = \frac{1}{2} 2a \cdot \cos \gamma \cdot a \cdot \sin \gamma,$$

$$S_{KLMN} = \frac{a + 2a \cdot \cos \gamma}{2} \cdot h,$$

где
$$h = \frac{a - 2a \cdot \cos \gamma}{2} \operatorname{tg} \beta.$$

В результате для трапеции имеем

$$S_{KLMN} = \frac{(1 - 2 \cdot \cos \gamma) \cdot (1 + 2 \cdot \cos \gamma)}{4} \cdot \operatorname{tg} 36^\circ \cdot a^2.$$

Таким образом, площадь пятиугольника KLNPM равна

$$S_{KLNPM} = \left(\frac{1 - 4 \cdot \cos^2 72^\circ}{4} \cdot \operatorname{tg} 36^\circ + \cos 72^\circ \cdot \sin 72^\circ \right) \cdot a^2.$$

Сравним площади пустот при $a = 1$:

$$S_{ABCD} \approx 0.3633 < 0.4061 \approx S_{KLNPM}$$

Следовательно, упаковка, изображенная на рис. 5, а, максимально плотная. Найдем плотность этой упаковки.

(4k+2)-угольник. В данном случае для получения максимальной упаковки будем заполнять плоскость способом, аналогичным показанному на рис. 5, а. Для нахождения глубины вставки ($2h$)

поступим так же, как и в случае $4k$ -угольника. В результате получим следующую систему:

$$\left\{ \begin{array}{l} h = \sin \frac{360^\circ \cdot 1/2}{n} + \sin \frac{360^\circ \cdot (1+1/2)}{n} + \dots + \sin \frac{360^\circ \cdot (m+1/2)}{n} + \\ + p \cdot \sin \frac{360^\circ (m+3/2)}{n} \\ \frac{1}{4} \operatorname{tg} \frac{90^\circ (n-2)}{n} = \cos \frac{360^\circ \cdot 1/2}{n} + \dots + \cos \frac{360^\circ \cdot (m+1/2)}{n} + \\ + p \cdot \cos \frac{360^\circ (m+3/2)}{n} \end{array} \right.$$

$m \in \mathbb{Z}, m \geq 0; \quad 0 < p \leq 1$

Ход решения аналогичен случаю $4k$ -угольника; ширина элементарной ячейки равна двум радиусам вписанной в $4k+2$ -угольник окружности, а высота – двум радиусам описанной окружности без глубины вставки. Поэтому плотность упаковки $4k$ -угольников равна

$$w_{4k+2} = \frac{S_{4k+2}}{2r \cdot (2R - 2h)} = \frac{n \cdot \operatorname{tg} \left(\frac{90^\circ (n-2)}{n} \right)}{4 \cdot \operatorname{tg} \left(\frac{90^\circ (n-2)}{n} \right) \cdot \left(\frac{1}{\cos(90^\circ (n-2)/n)} - 2h \right)},$$

$$w_{4k+2} = \frac{n \cdot \cos \frac{90^\circ (n-2)}{n}}{4 \cdot \left(1 - 2h \cdot \cos \frac{90^\circ (n-2)}{n} \right)}. \quad (3)$$

2. Случай $n = 2k+1, k \in \mathbb{N}$

При заполнении плоскости полосками, составленными из правильных многоугольников с нечетным числом сторон, возможно два варианта: один аналогичен случаю $2k$ -многоугольников (рис. 7, а), во втором случае берутся две зеркальные полоски $2k+1$ -многоугольников, стыкуются острыми углами, и плоскость упаковывается такими удвоенными полосками (рис. 7, б).

Какая из упаковок более плотная, рассмотрим на примере правильного семиугольника.

Семиугольник. Плотности упаковок правильных семиугольников, показанных на рис. 7, найдем аналогично случаям, рассмотренным ранее.

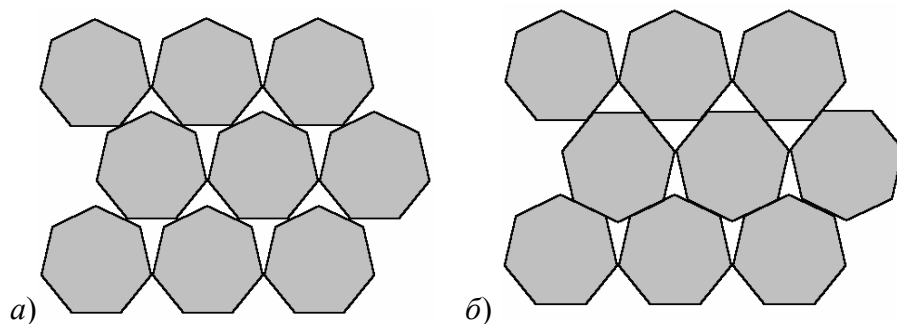


Рис. 7. Возможные упаковки правильных семиугольников

Для заполнения, представленного на рис. 7, а, плотность упаковки равна:

$$w_7^a = \frac{7 \cdot \operatorname{tg} \frac{450^\circ}{7}}{7 \cdot \operatorname{tg} \frac{450^\circ}{7} + 4 \cdot \frac{\sin(270^\circ/7) \cdot \sin(180^\circ/7)}{\sin(810^\circ/7)} + 4 \cdot \frac{\sin \frac{180^\circ}{7} - \operatorname{tg} \frac{180^\circ}{7}}{\sin(810^\circ/7)}}$$

$$w_7^a \approx 0,8555.$$

Для рис. 7, б: $w_7^b = \frac{7 \cdot \operatorname{tg} \frac{450^\circ}{7}}{7 \cdot \operatorname{tg} \frac{450^\circ}{7} + 4 \cdot \frac{\sin(360^\circ/7) \cdot \sin(90^\circ/7)}{\sin(810^\circ/7)} + \operatorname{tg} \frac{360^\circ}{7}}$

$$w_7^b \approx 0,87765.$$

Мы получили, что во втором случае упаковка более плотная, т.е.

$$w_7 \approx 0,87765.$$

Обобщение. Из рассмотрения, проведенного для правильных семиугольников, можно сделать вывод, что для нечетных n -угольников упаковка является более плотной, когда в элементарную ячейку входит два правильных $2k+1$ -многоугольника, т.е. упаковка с удвоением элементарной ячейки. При этом с одной стороны многоугольники в полосках соприкасаются углами, с другой стороны – сторонами.

Ширина элементарной ячейки в данном случае равна длине наибольшей диагонали $2k+1$ -многоугольника. Найдем диагональ d . Для этого рассмотрим треугольник, образованный этой диагональю и двумя радиусами описанной вокруг $2k+1$ -многоугольника окружности. Поскольку диагональ наибольшая, то угол между этими радиусами равен $\frac{360^\circ}{2k+1} \cdot k$. Найдем диагональ по теореме косинусов:

$$\text{равен } \frac{360^\circ}{2k+1} \cdot k.$$

$$d = \sqrt{R^2 + R^2 - 2R^2 \cdot \cos\left(180^\circ \frac{2k}{2k+1}\right)} = R \cdot \sqrt{2 \cdot \left(1 + \cos \frac{180^\circ}{2k+1}\right)}.$$

С учетом (ПЗ)

$$d = \frac{a}{2 \cos\left(90^\circ \frac{n-2}{n}\right)} \cdot \sqrt{2 \cdot \left(1 + \cos\left(2 \cdot \frac{90^\circ}{n}\right)\right)} = a \cdot \frac{\cos(90^\circ/n)}{\cos(90^\circ(n-2)/n)}.$$

Глубина вставки в случае h_1 , когда многоугольники в полосках соприкасаются углами, определяется так же, как и для $4k+2$ -угольника, а в случае h_2 многоугольники соприкасаются сторонами, как для $4k$ -угольника (обозначим). Следовательно, значения h_1 и h_2 можно определить из следующих систем:

$$\left\{ \begin{array}{l} h_1 = \sin \frac{360^\circ / 2}{n} + \sin \frac{360^\circ \cdot (1+1/2)}{n} + \dots + \sin \frac{360^\circ \cdot (m_1 + 1/2)}{n} + \\ \quad + p_1 \cdot \sin \frac{360^\circ (m_1 + 3/2)}{n} \\ \frac{1}{4} \cdot \frac{\cos(90^\circ/n)}{\cos(90^\circ(n-2)/n)} = \cos \frac{360^\circ \cdot 1/2}{n} + \dots + \cos \frac{360^\circ \cdot (m_1 + 1/2)}{n} + \\ \quad + p_1 \cdot \cos \frac{360^\circ (m_1 + 3/2)}{n} \end{array} \right.$$

$$m_1 \in Z, m_1 \geq 0 \quad 0 < p_1 \leq 1$$

$$\left\{ \begin{array}{l} h_2 = a \cdot \sin\left(\frac{360^\circ}{n}\right) + \dots + a \cdot \sin\left(\frac{360^\circ \cdot m_2}{n}\right) + p_2 \cdot a \cdot \sin\left(\frac{360^\circ \cdot (m_2 + 1)}{n}\right) \\ \frac{1}{4} \cdot \frac{\cos(90^\circ/n)}{\cos(90^\circ(n-2)/n)} = 0,5 + \cos\left(\frac{360^\circ}{n}\right) + \dots + \cos\left(\frac{360^\circ \cdot m_2}{n}\right) + \\ \quad + p_2 \cdot \cos\left(\frac{360^\circ \cdot (m_2 + 1)}{n}\right) \end{array} \right.$$

$$m_2 \in Z, m_2 \geq 0, \quad 0 < p_2 \leq 1$$

Отсюда высота элементарной ячейки равна: $R + r - h_1 - h_2$, где R – радиус описанной окружности, r – радиус вписанной окружности.

Плотность упаковки получаем равной:

$$w_{2k+1} = \frac{S_{2k+1}}{d \cdot (R + r - h_1 - h_2)},$$

где
$$S_{2k+1} = \frac{n \cdot \operatorname{tg}(90^\circ \cdot (n-2)/n)}{4} \cdot a^2.$$

В результате для плотности упаковки имеем:

$$w_{2k+1} = \frac{n \cdot \sin \frac{90^\circ (n-2)}{n}}{4 \cdot \cos \frac{90^\circ}{n} \cdot \left(\left(1 + \sin \frac{90^\circ (n-2)}{n} \right) / \left(2 \cos \frac{90^\circ (n-2)}{n} - h_1 - h_2 \right) \right)}. \quad (4)$$

Пятиугольники. Заметим, что при заполнении плоскости правильными пятиугольниками с удвоением элементарной ячейки, с той стороны, где полосы соприкасаются углами, пустоты отсутствуют, и полосы не вставляются одна в другую, как у других правильных n -угольников (рис. 8, а).

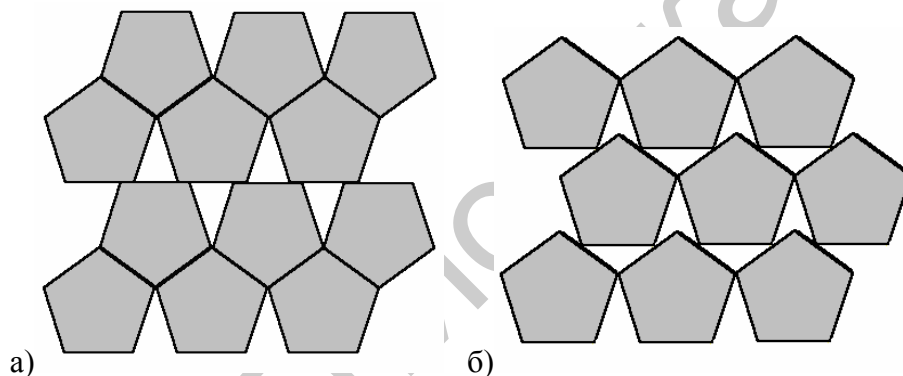


Рис. 8. Заполнение плоскости правильными пятиугольниками

Расчет плотности упаковки дает величину $w_5^a \approx 0,8541$, что совпадает с расчетом по формуле (4).

При заполнении плоскости без удвоения (рис. 8, б), имеем для плотности упаковки:

$$w_5^b = \frac{5 \operatorname{ctg}(36^\circ)}{4(1 + 2 \cos(72^\circ)) \cdot (\sin(72^\circ) + 0,5 \operatorname{tg}(36^\circ))},$$

$$w_5^b = 0,8090.$$

Заключение. В работе приведены расчеты плотности упаковки плоскости идеальными (правильными) многоугольниками. На практике образование наноструктур при напылении на подложки происходит произвольным образом, но при необходимости всегда можно подобрать наиболее близкий случай. В то же время, анализ плотностей упаковок, рассчитанных для ряда многоугольников (таблица 1) показывает, что с увеличением n плотность упаковки n -угольников приближается к

плотности упаковки кругов и для большинства структур, состоящих из плотно упакованных правильных многоугольников, её можно принять равной 0,9. Исключение составляют 12-угольники, 7-угольники и 5-угольники. Правильные 12-угольники заполняют плоскость максимально плотно (не считая квадрата и правильных треугольника и шестиугольника), а правильные 5-угольники (без удвоения ячейки) дают заполнение с минимальной плотностью.

Таблица 1

$n = 4k$		$n = 4k+2$		$n = 2k+1$	
n	w	n	w	n	w
8	0,9062	10	0,9137	5	0,8541
12*	0,9282	14	0,9075	7	(0,8090**)
16	0,9090	18*	0,9162	9	0,8777
24*	0,9121	26	0,9072	17	(0,8555**)
32	0,9071	30*	0,9102	51	0,8986
36*	0,9092	46	0,9071	71	0,9021
52	0,90705	54*	0,9079		0,906614
60*	0,9077	62	0,90697		0,90662
180*	0,90699	66*	0,9076		
		126*	0,90709		
		846*	0,906904		
круг	0,906899				

* – n -угольники, число сторон которых кратно шести (т.е. $6k$ -угольники).

** – расчет для упаковки плоскости без удвоения элементарной ячейки.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Соотношения для правильных многоугольников, используемые в расчетах

1. Площадь правильного n -угольника со стороной a :

$$S_n = \frac{n \cdot \operatorname{tg} \frac{90 \cdot (n-2)}{n}}{4} \cdot a^2. \quad (\text{П1})$$

2. Радиус вписанной окружности:

$$r = \frac{a}{2} \cdot \operatorname{tg} \left(90 \frac{n-2}{n} \right). \quad (\text{П2})$$

3. Радиус описанной окружности:

$$R = \frac{a}{2 \cos \left(90 \frac{n-2}{n} \right)}. \quad (\text{П3})$$

Список литературы

1. Силибин М.В. Исследование и разработка методов контроля параметров наноразмерных пленок твердых растворов титаната-цирконата свинца: дис. ...канд. физ.-мат. наук : 05.11.13; МГИЭТ. (тех. ун-т). Москва, 2010. 146 с.
2. Китайгородский А.И. Порядок и беспорядок в мире атомов. М., "Наука", 1977.

**GEOMETRICAL APPROACH TO THE CALCULATION OF
STRUCTURE DENSITY OF 2D POROUS MATERIALS**

O. V. Malyshkina¹, Yu. A. Malyshkin²

¹Tver State University

Chair of Physics of Ferroelectrics and Piezoelectrics

²Lomonosov Moscow State University

Faculty of Mechanics and Mathematics

The surface packing density of 2D structures containing pores (or intergranular amorphous phase) the packing density of the main phase is calculated. It is shown that the maximum filling coefficient (i.e., the packing density value) is 90%.

Keywords: porous 2D structures, packing density

Об авторах:

МАЛЫШКИНА Ольга Витальевна – доктор физ.-мат. наук, профессор кафедры физики сегнетоэлектриков и пьезоэлектриков Тверского государственного университета, *e-mail:* olga.malyshkina@mail.ru;

МАЛЫШКИН Юрий Андреевич – студент механико-математического факультета МГУ им. Ломоносова.