

УДК 621.319.443

В. И. У л ь я н о в, А. М. Л а в р о в,  
О. Н. К л о ч к о в, В. В. Ч и с т ь к о в

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ ПОЛУЧЕНИЯ УПОРЯДОЧЕННЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ЧАСТИЦ СФЕРИЧЕСКОЙ ФОРМЫ

*Рассмотрены теоретические предпосылки получения тонких пленок при однослойной упаковке шаров одинакового радиуса с наполнителями цилиндрической формы, и найдены условия получения максимальной плотности.*

В настоящее время пленки толщиной сотни и десятки ангстрем практически из любого материала получают на специальном вакуумном оборудовании. Керамические пленки толщиной от 5 мкм и выше серийно выпускаются без специальной технологической среды на основе пленочной технологии. Монолитная структура пленки при этом обеспечивается спеканием материала диэлектрика в предварительно собранных пакетах.

Практический интерес представляет толщина пленок от 0,1 до 5 мкм, получаемых при нормальных условиях из частиц материала с определенным гранулометрическим составом, причем размер зерна, как правило, не должен превышать толщины пленки. Качество пленки можно обеспечить путем получения упорядоченных структур из составляющих ее частиц (микрокластеров), что требует учитывать не только размер частиц, но и их форму.

В настоящей статье приводятся результаты теоретических исследований по возможности получения однослойной упаковки в структуре пленки из частиц сферической формы (сферических кластеров).

Рассмотрим однослойную упаковку шаров одинакового радиуса  $r$ , лежащих на плоскости (т.е. расположенных в один слой между двумя параллельными плоскостями).

Обозначим через  $\alpha$  угол, образованный двумя непараллельными линиями центров касающихся друг друга шаров (рис. 1). При этом

$$\frac{\pi}{3} \leq \alpha \leq \frac{\pi}{2} \Leftrightarrow 60^\circ \leq \alpha \leq 90^\circ.$$

Задача состоит в следующем. Необходимо 1) вычислить плотность первоначальной упаковки в зависимости от  $\alpha$ ; 2) определить максимальный радиус прямого кругового цилиндра с основаниями на верхней и нижней плоскостях, касающегося шаров данного семейства

внешним образом; 3) вычислить плотность новой упаковки с учетом появления цилиндров согласно п. 2; 4) определить максимальный радиус прямого кругового цилиндра с основаниями на верхней и нижней плоскостях, касающегося элементов новой упаковки внешним образом; 5) вычислить плотность новой упаковки с учетом появления цилиндров согласно п. 4 и так далее до тех пор, пока добавление новых цилиндров не будет оказывать существенного влияния на плотность упаковки; б) выяснить, при каких значениях  $\alpha$  плотность соответствующей упаковки будет наибольшей, т.е. найти оптимальную упаковку.

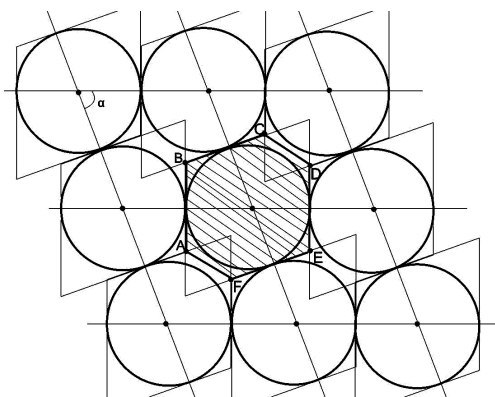


Рис. 1. Схема упаковки при  $60^\circ < \alpha < 90^\circ$

Существует несколько принципиально разных подходов к решению подобных оптимизационных задач. Так, в работах [1, 2] рассмотрены математические модели и оптимизационные методы геометрического проектирования, основанные на введенной авторами так называемой функции плотного размещения. В настоящей статье использован подход, близкий к классическому, изложенный, например, в работах [3, 4].

Рассмотрим систему  $\{G_i\}$ , содержащую счетное множество односвязных фигур (элементов упаковки), расположенных в  $n$ -мерном пространстве произвольным образом; пусть  $V_i$  — объем элемента  $G_i$ .

Обычно (см., например, [1], [2]), плотность упаковки определяется так: выбирается большая шарообразная область, скажем, радиуса  $R$ ; вычисляется отношение объема элементов упаковки, целиком попавших в эту область, к ее объему, и используется предельный переход  $R \rightarrow \infty$ :

$$\delta = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\sum V_i}{V_n(R)}, \quad (1)$$

где  $V_n(R)$  — объем  $n$ -мерного шара радиуса  $R$ , а  $\sum_R$  — знак суммирования, распространенного на те элементы упаковки  $G_i$ , которые целиком попали внутрь шара радиуса  $R$  с центром в начале координат.

Для расчета плотности упаковки введем понятие фундаментальной ячейки.

Пусть элементы первоначальной упаковки  $\{G_i\}$  представляют собой конгруэнтные множества, ограниченные гладкими выпуклыми поверхностями. Рассмотрим многогранники, образованные общими ка-

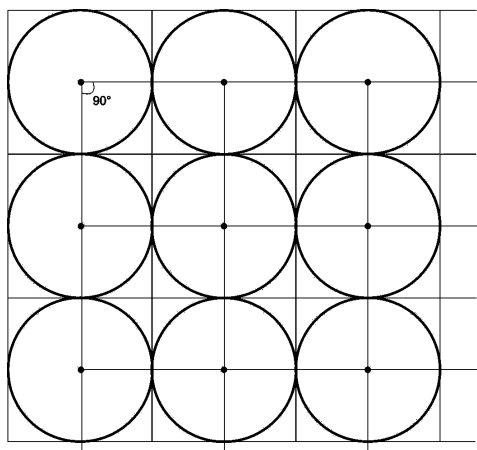


Рис. 2. Схема упаковки при  $\alpha = 90^\circ$

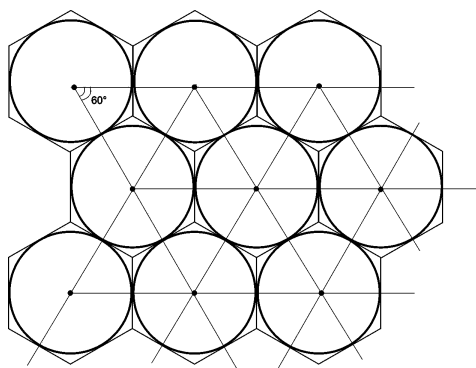


Рис. 3. Схема упаковки при  $\alpha = 60^\circ$

сательными плоскостями, проведенными через точки касания двух соседних элементов упаковки.

В частности, в случае однослойной упаковки шаров эти плоскости вертикальны, а каждый многогранник представляет собой прямую призму и является описанным по отношению к соответствующему шару.

Если эти многогранники не имеют общих внутренних точек, то каждый из них по определению представляет собой фундаментальную ячейку, порожденную соответствующим элементом упаковки (рис. 2; 3).

Если же какой-то многогранник  $M$ , описанный около некоторого элемента упаковки, пересекается с соседними  $M_1, \dots, M_k$ , как например на рис. 1, то фундаментальной ячейкой, порожденной этим элементом, назовем выпуклую оболочку множества

$$M \setminus (M_1 \cup \dots \cup M_k) \equiv M \cap \overline{M_1} \cap \dots \cap \overline{M_k} :$$

$$FC = \text{Conv} [M \setminus (M_1 \cup \dots \cup M_k)] \equiv \text{Conv} (M \cap \overline{M_1} \cap \dots \cap \overline{M_k}), \quad (2)$$

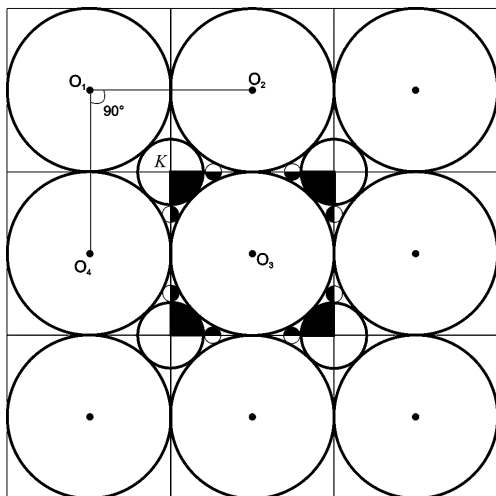
а так как при  $A \cap B = \emptyset$   $A \setminus B = A$ , то в определении фундаментальной ячейки можно брать *все* многогранники  $M_\alpha$ , а не только те, у которых пересечение с многогранником  $M$  непусто:

$$FC = \text{Conv} \left[ M \setminus \left( \bigcup_\alpha M_\alpha \right) \right] \equiv \text{Conv} \left[ M \cap \left( \bigcap_\alpha \overline{M}_\alpha \right) \right]. \quad (3)$$

В частности, в случае, изображенном на рис. 1, фундаментальной ячейкой является прямая призма с основанием в виде шестиугольника  $ABCDEF$  и высотой  $2r$ .

Прежде чем приступать к изучению случая произвольного  $\alpha \in \left[ \frac{\pi}{3}; \frac{\pi}{2} \right]$ , рассмотрим два частных варианта крайних значений  $\alpha$ , которые представляют также и самостоятельный интерес.

*Вариант 1.*  $\alpha = 90^\circ$  (см. рис. 2, рис. 4). Вначале вычислим плотность этой упаковки. При  $\alpha = 90^\circ$  фундаментальной ячейкой является прямоугольный параллелепипед высотой  $2r$ , основанием которого служит квадрат со стороной  $2r$  (описанный около окружности радиуса  $r$ ) площадью  $S_{\text{кв}} = 4r^2$ , т.е. куб объемом  $(2r)^3$ .



**Рис. 4.** Схема упаковки  $\alpha = 90^\circ$

Тем самым плотность первоначальной упаковки

$$\delta_0 = \delta_0 \left( \frac{\pi}{2} \right) = \frac{V_{\text{шара}}}{V_{\text{фунд.яч.}}} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{(2r)^3} = \frac{\pi}{6} \approx 0,52360.$$

Обозначим через  $x$  радиус прямого кругового цилиндра (цилиндрического наполнителя) с основаниями на нижней и верхней плоскостях, касающегося шаров с центрами в точках  $O_1, O_2, O_3, O_4$  внешним образом (см. рис. 4). Вычисления дают  $x = r(\sqrt{2} - 1)$ .

Следовательно, объем цилиндра высотой  $2r$ , радиус основания которого  $x = r(\sqrt{2} - 1)$ ,

$$V_{\text{цил.}x} = \pi x^2 \cdot 2r = \pi r^3 2(3 - 2\sqrt{2}).$$

В каждую фундаментальную ячейку попадают четыре четвертинки таких цилиндров суммарным объемом

$$V_x = 4 \cdot \frac{1}{4} V_{\text{цил.}x} = V_{\text{цил.}x} = 2\pi r^3 (3 - 2\sqrt{2}).$$

Тем самым объем тел, попавших в фундаментальную ячейку,

$$V_1 = V_{\text{ш}} + V_x = \frac{4}{3}\pi r^3 + 2\pi r^3 (3 - 2\sqrt{2}) = 2\pi r^3 \frac{11 - 6\sqrt{2}}{3},$$

а плотность упаковки стала равной

$$\delta_1 = \delta_1 \left( \frac{\pi}{2} \right) = \frac{V_1}{V_{\text{фунд.яч.}}} = \frac{\pi (11 - 6\sqrt{2})}{12} \approx 0,65835.$$

Добавка к плотности составила

$$\Delta_1 \delta = \frac{V_x}{V_{\text{фунд.яч.}}} = \frac{\pi (3 - 2\sqrt{2})}{4} \approx 0,13475.$$

Это увеличение составило

$$\frac{\Delta_1 \delta}{\delta_0} \cdot 100\% = 150 \left( 3 - 2\sqrt{2} \right) \% \approx 25,74 \%$$

Плотность первоначальной упаковки возросла в

$$k = \frac{\delta_1}{\delta_0} = 5,5 - 3\sqrt{2} \approx 1,2574 \text{ раза.}$$

Обозначим через  $y$  радиус прямого кругового цилиндра с основаниями на верхней и нижней плоскостях, касающегося внешним образом шаров с центрами в точках  $O_1$  и  $O_4$  и цилиндра с центром в точке  $K$  (см. рис. 4). Вычисления дают  $y = r \frac{5 - 3\sqrt{2}}{7}$ . Следовательно, объем цилиндра радиусом  $y$  и высотой  $2r$

$$V_{\text{цил.}y} = \pi y^2 \cdot 2r = 2\pi r^3 \frac{43 - 30\sqrt{2}}{49}.$$

В каждую фундаментальную ячейку попадают (см. рис. 4) восемь половинок таких цилиндров суммарным объемом

$$V_y = 8 \cdot \frac{1}{2} V_{\text{цил.}y} = 4V_{\text{цил.}y} = 8\pi r^3 \frac{43 - 30\sqrt{2}}{49}.$$

Тем самым объем тел, попавших в фундаментальную ячейку,

$$V_2 = V_1 + V_y = 2\pi r^3 \frac{11 - 6\sqrt{2}}{3} + 8\pi r^3 \frac{43 - 30\sqrt{2}}{49} = \frac{2\pi r^3}{147} \left( 1055 - 654\sqrt{2} \right).$$

Плотность упаковки стала равной

$$\delta_2 = \delta_2 \left( \frac{\pi}{2} \right) = \frac{V_2}{V_{\text{фунд.яч.}}} = \frac{\pi (1055 - 654\sqrt{2})}{588} \approx 0,69513.$$

По сравнению с предыдущей плотность увеличилась на

$$\Delta_2 \delta = \frac{V_y}{V_{\text{фунд.яч.}}} = \frac{\pi r^3 (43 - 30\sqrt{2})}{49r^3} \approx 0,03678.$$

Это увеличение составило

$$\frac{\Delta_2 \delta}{\delta_1} \cdot 100\% = \frac{12}{49} \frac{113 - 72\sqrt{2}}{49} \cdot 100\% \approx 5,586 \%$$

По сравнению с первоначальной плотностью это увеличение составило

$$\frac{\Delta_2 \delta}{\delta_0} \cdot 100\% = \frac{\pi (43 - 30\sqrt{2}) \cdot 6}{49\pi} \cdot 100\% \approx 7,02 \%,$$

а это в 3,7 раз меньше, чем увеличение плотности упаковки на первом этапе.

*Вариант 2.*  $\alpha = 60^\circ$ . Вначале вычислим плотность этой упаковки. При  $\alpha = 60^\circ$  фундаментальной ячейкой является правильная шестиугольная призма высотой  $2r$ , основанием которой служит правильный шестиугольник, описанный около окружности радиусом  $r$  со стороной (см. рис. 5)  $a = 2r \operatorname{tg} 30^\circ = \frac{2r}{\sqrt{3}}$ . Тем самым

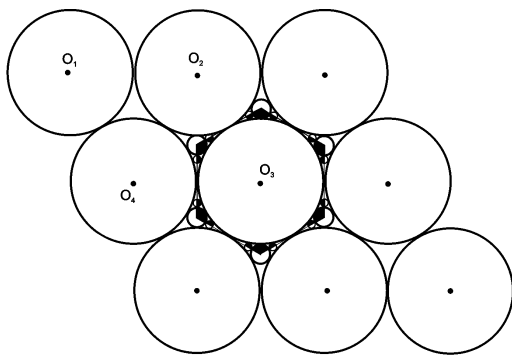


Рис. 5. Схема упаковки  $\alpha = 60^\circ$

площадь основания  $S_{\text{осн}} = 6 \frac{a^2 \sqrt{3}}{4} = 2r^2 \sqrt{3}$ , объем фундаментальной ячейки  $V_{\text{фунд.яч.}} = S_{\text{осн.}} \cdot 2r = 4r^3 \sqrt{3}$ , а плотность первоначальной упаковки

$$\delta_0 = \delta_0 \left( \frac{\pi}{3} \right) = \frac{V_{\text{шара}}}{V_{\text{фунд.яч.}}} = \frac{\frac{4}{3} \pi r^3}{4r^3 \sqrt{3}} = \frac{\pi \sqrt{3}}{9} \approx 0,60460$$

(напомним, что  $\delta_0 \left( \frac{\pi}{2} \right) = \frac{\pi}{6} \approx 0,52360$ ).

Обозначим  $x$  — радиус прямого кругового цилиндра с основаниями на нижней и верхней плоскостях, касающегося шаров с центрами в точках  $O_1, O_2, O_4$  внешним образом (см. рис. 5). Вычисления дают  $x = \frac{r}{\sqrt{3}} (2 - \sqrt{3})$ . Следовательно, объем цилиндра высотой  $2r$ , радиус основания которого  $x = \frac{r}{\sqrt{3}} (2 - \sqrt{3})$ , равен

$$V_{\text{цил.х}} = \pi x^2 2r = \frac{2\pi r^3}{3} (7 - 4\sqrt{3}).$$

В каждую фундаментальную ячейку попадает (см. рис. 5)  $6 \times \frac{1}{3}$  таких цилиндров суммарным объемом

$$V_x = 6 \cdot \frac{1}{3} V_{\text{цил.х}} = \frac{4\pi r^3}{3} (7 - 4\sqrt{3}).$$

Тем самым объем тел, попавших в фундаментальную ячейку, равен

$$V_1 = V_{\text{ш}} + V_x = \frac{4}{3} \pi r^3 + \frac{4\pi r^3}{3} (7 - 4\sqrt{3}) = \frac{16}{3} \pi r^3 (2 - \sqrt{3});$$

а плотность упаковки

$$\delta_1 = \delta_1 \left( \frac{\pi}{3} \right) = \frac{V_1}{V_{\text{фунд.яч.}}} = \frac{4\pi (2\sqrt{3} - 3)}{9} \approx 0,64801$$

(напомним, что  $\delta_1 \left(\frac{\pi}{2}\right) = \frac{\pi(11 - 6\sqrt{2})}{12} \approx 0,65835$ ).

Добавка к плотности составила

$$\Delta_1 \delta = \frac{V_x}{V_{\text{фунд.яч.}}} = \frac{\pi(7\sqrt{3} - 12)}{9} \approx 0,04341,$$

а увеличение плотности

$$\frac{\Delta_1 \delta}{\delta_0} \cdot 100\% = (7 - 4\sqrt{3}) \cdot 100\% \approx 7,18\%.$$

Плотность первоначальной упаковки возросла в

$$k = \frac{\delta_1}{\delta_0} = \frac{4\pi(2\sqrt{3} - 3)9}{9\pi\sqrt{3}} = 4(2 - \sqrt{3}) \approx 1,0718 \text{ раз.}$$

Обозначим  $y$  — радиус прямого кругового цилиндра с основаниями на верхней и нижней плоскостях, касающегося внешним образом шаров с центрами в точках  $O_1$  и  $O_3$  и цилиндра с центром в точке  $K$  (см. рис. 5). Вычисления дают  $y = \frac{r}{33}(9 - 4\sqrt{3})$ . Следовательно, объем цилиндра радиусом  $y$  и высотой  $2r$

$$V_{\text{цил.}y} = \pi y^2 \cdot 2r = \frac{\pi r^2}{33^2} (9 - 4\sqrt{3})^2 \cdot 2r = \frac{2\pi r^3}{33^2} (129 - 72\sqrt{3}).$$

В каждую фундаментальную ячейку попадают (см. рис. 5) двенадцать половинок таких цилиндров суммарным объемом

$$V_y = 12 \cdot \frac{1}{2} V_{\text{цил.}y} = 6V_{\text{цил.}y} = \frac{4\pi r^3 (129 - 72\sqrt{3})}{363}.$$

Тогда объем тел, попавших в фундаментальную ячейку,

$$V_2 = V_1 + V_y = \frac{16}{3} \pi r^3 (2 - \sqrt{3}) + \frac{4\pi r^3 (129 - 72\sqrt{3})}{363} = \frac{4}{3} \pi r^3 \frac{1097 - 556\sqrt{3}}{121},$$

а плотность упаковки равна

$$\begin{aligned} \delta_2 = \delta_2 \left(\frac{\pi}{3}\right) &= \frac{V_2}{V_{\text{фунд.яч.}}} = \\ &= \frac{4\pi r^3 (1097 - 556\sqrt{3})}{3 \cdot 121 \cdot 4r^3 \cdot \sqrt{3}} = \frac{\pi (1097\sqrt{3} - 1668)}{1089} \approx 0,66946 \end{aligned}$$

(напомним, что  $\delta_2 \left(\frac{\pi}{2}\right) = 0,69513$ ).

По сравнению с предыдущей плотность среды увеличилась на

$$\Delta_2 \delta = \frac{V_y}{V_{\text{фунд.яч.}}} = \frac{\pi(129\sqrt{3} - 216)}{1089} \approx 0,021448$$

и это увеличение составило

$$\frac{\Delta_2 \delta}{\delta_1} \cdot 100\% = \frac{25}{121} (42 - 15\sqrt{3}) \% \approx 3,31\%.$$

По сравнению с первоначальной плотностью увеличение составило

$$\frac{\Delta_2 \delta}{\delta_0} \cdot 100\% = \frac{129 - 72\sqrt{3}}{121} \cdot 100\% \approx 3,547\%,$$

что в 2 раза меньше, чем увеличение плотности упаковки на первом этапе.

*Вариант 3.*  $60^\circ < \alpha < 90^\circ$ . Вначале вычислим плотность этой упаковки. При  $60^\circ < \alpha < 90^\circ$  фундаментальной ячейкой является прямая шестиугольная призма высотой  $2r$ , основанием которой служит шестиугольник  $ABCDEF$  (см. рис. 6), площадь которого

$$S_{\text{осн}} = S_{BTEU} - 2S_{\Delta AFU} = \frac{4r^2}{\sin \alpha} - 4r^2 \frac{\cos^2 \alpha}{\sin \alpha} = \frac{4r^2}{\sin \alpha} (1 - \cos^2 \alpha) = 4r^2 \sin \alpha$$

а объем фундаментальной ячейки

$$V_{\text{фунд.яч.}} = S_{\text{осн.}} \cdot 2r = 4r^2 \sin \alpha \cdot 2r = 8r^3 \sin \alpha.$$

Тем самым плотность первоначальной упаковки

$$\delta_0 = \delta_0(\alpha) = \frac{V_{\text{шара}}}{V_{\text{фунд.яч.}}} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{8r^3 \sin \alpha} = \frac{\pi}{6 \sin \alpha}.$$

График функции  $\delta_0(\alpha)$  изображен на рис. 7.

При возрастании  $\alpha$  от  $\frac{\pi}{3}$  до  $\frac{\pi}{2}$  плотность упаковки строго монотонно убывает от величины  $\delta_0\left(\frac{\pi}{3}\right) \approx 0,6046$  до  $\delta_0\left(\frac{\pi}{2}\right) \approx 0,5236$ .

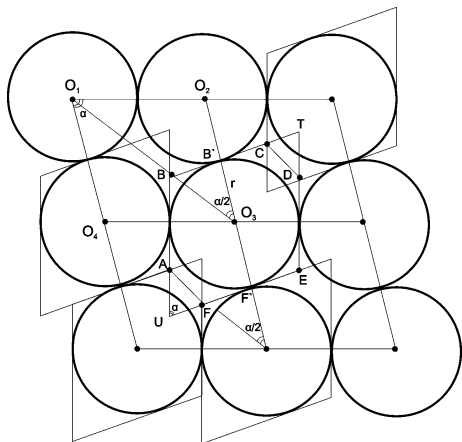


Рис. 6. Схема упаковки при  $60^\circ < \alpha < 90^\circ$

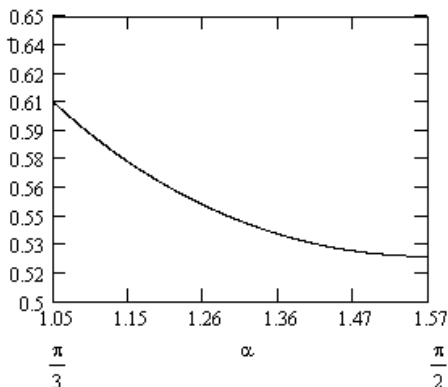


Рис. 7. График функции  $\delta_0(\alpha)$



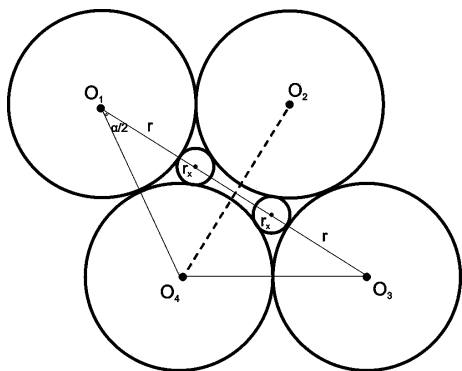


Рис. 8. Схема размещения цилиндров

есть место тогда и только тогда, когда

Обозначим через  $x$  радиус прямого кругового цилиндра с основаниями на нижней и верхней плоскостях, касающегося шаров с центрами в точках  $O_1, O_2, O_4$  внешним образом (см. рис. 6). Вычисления дают  $x = r \left( 1 - \cos \frac{\alpha}{2} \right) / \left( \cos \frac{\alpha}{2} \right)$ .

Рассмотрим случай, когда в область между шарами с центрами  $O_1, O_2, O_3, O_4$  поместятся два таких цилиндра (см. рис. 8). Это имеет место тогда и только тогда, когда

$$\begin{aligned}
 O_1 O_3 \geq 2r + 4x &\Leftrightarrow 2 \cdot 2r \cos \frac{\alpha}{2} \geq 2r + 2 \cdot 2r \frac{1 - \cos \frac{\alpha}{2}}{\cos \frac{\alpha}{2}} \Rightarrow \\
 &\Rightarrow 2 \cos \frac{\alpha}{2} \geq 1 + 2 \frac{1 - \cos \frac{\alpha}{2}}{\cos \frac{\alpha}{2}}.
 \end{aligned}$$

Обозначив  $\cos \frac{\alpha}{2} = t$ , получаем неравенство

$$2t \geq 1 + 2 \frac{1-t}{t} \Rightarrow 2t^2 + t - 2 \geq 0. \quad (4)$$

Корни квадратного трехчлена в левой части уравнения (4)

$$t_{1,2} = \frac{-1 \pm \sqrt{17}}{4};$$

тогда решения неравенства (4) будут следующие:

$$t \leq \frac{-1 - \sqrt{17}}{4}; \quad (5)$$

$$t \geq \frac{-1 + \sqrt{17}}{4}. \quad (6)$$

Но  $t = \cos \frac{\alpha}{2} \geq -1$ , а  $\frac{-1 - \sqrt{17}}{4} < -1$ . Следовательно, неравенство (5) невозможно, а неравенство (6) дает

$$\begin{aligned}
 \cos \frac{\alpha}{2} \geq \frac{-1 + \sqrt{17}}{4} &\Rightarrow 0 \leq \frac{\alpha}{2} \leq \arccos \left( \frac{\sqrt{17} - 1}{4} \right) \Rightarrow \\
 &\Rightarrow 0 \leq \alpha \leq \alpha_{\text{кр}} = 2 \arccos \left( \frac{\sqrt{17} - 1}{4} \right).
 \end{aligned}$$

С учетом того, что  $\alpha \geq \frac{\pi}{3}$ , получаем, что, в случае  $60^\circ \leq \alpha \leq \alpha_{кр} = 2 \arccos\left(\frac{\sqrt{17}-1}{4}\right) \approx 77,337^\circ$ , в область между шарами с центрами в точках  $O_1, O_2, O_3, O_4$  поместятся два цилиндра радиусом  $x$ .

**З а м е ч а н и е .** Можно записать явное выражение для  $\alpha_{кр}$  по другому: а так как  $\cos\left(\frac{\alpha_{кр}}{2}\right) = \frac{\sqrt{17}-1}{4}$ , то  $\cos \alpha_{кр} = 2 \cos^2\left(\frac{\alpha_{кр}}{2}\right) - 1 = \frac{5-\sqrt{17}}{4}$ , откуда  $\alpha_{кр} = \arccos\left(\frac{5-\sqrt{17}}{4}\right) \approx 77,337^\circ$ , т.е. то же самое численное значение.

Далее рассмотрим следующие два случая.

*Случай*  $60^\circ < \alpha \leq \alpha_{кр}$  (рис. 9). В этом случае в каждую фундаментальную ячейку попадают две части цилиндров, соответствующих центральному углу  $(\pi - \alpha)$  и четыре части цилиндров, соответствующих центральному углу  $\alpha + \frac{\pi - \alpha}{2} = \frac{\pi + \alpha}{2}$  суммарным объемом

$$V_x = 2 \frac{\pi - \alpha}{2\pi} V_{\text{цил.}x} + 4 \frac{\pi + \alpha}{2 \cdot 2\pi} V_{\text{цил.}x} = 2V_{\text{цил.}x}, \text{ где } V_{\text{цил.}x} = \pi x^2 \times \times 2r = 2\pi r^3 \left(1 - \cos \frac{\alpha}{2}\right)^2 / \cos^2 \frac{\alpha}{2}.$$

Добавочный объем составляет

$$V_x = 4\pi r^3 \left(\frac{1 - \cos \frac{\alpha}{2}}{\cos \frac{\alpha}{2}}\right)^2,$$

объем тел, попавших в фундаментальную ячейку,

$$V_1 = V_{\text{ш}} + V_x = \frac{4}{3}\pi r^3 + 4\pi r^3 \left(\frac{1 - \cos \frac{\alpha}{2}}{\cos \frac{\alpha}{2}}\right)^2,$$

а плотность упаковки в этом случае равна

$$\begin{aligned} \delta_1 = \delta_1(\alpha) &= \frac{V_1}{V_{\text{фунд.яч.}}} = \\ &= \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 + 4\pi r^3 \left(1 - \cos \frac{\alpha}{2}\right)^2 / \cos^2 \frac{\alpha}{2}}{8r^3 \sin \alpha} = \\ &= \frac{\pi}{2 \sin \alpha} \left\{ \frac{1}{3} + \left[ \frac{1 - \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)}{\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)} \right]^2 \right\}. \end{aligned}$$

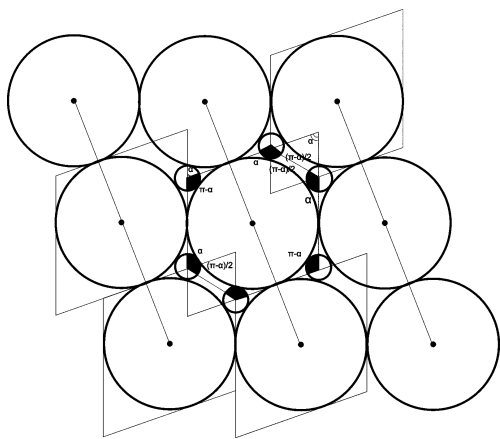


Рис. 9. Схема упаковки при  $60^\circ < \alpha \leq \alpha_{кр}$

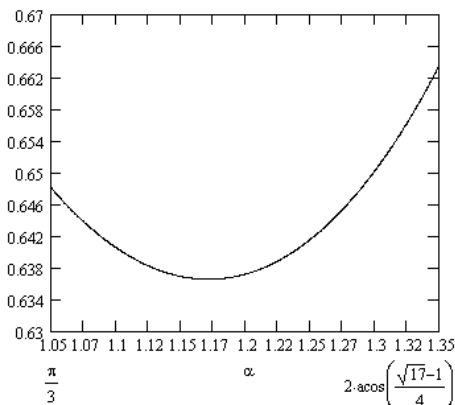


Рис. 10. График функции  $\delta_1(\alpha)$

В частности,

$$\delta_1\left(\frac{\pi}{3}\right) = \frac{\pi}{2 \sin 60^\circ} \left[ \frac{1}{3} + \left( \frac{1 - \cos 30^\circ}{\cos 30^\circ} \right) \right] = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}} (2 - \sqrt{3}) \approx 0,64801;$$

$$\begin{aligned} \delta_1(\alpha_{кр}) &= \frac{\pi}{2\sqrt{1 - \cos^2 \alpha_{кр}}} \left\{ \frac{1}{3} + \left[ \frac{1 - \cos\left(\frac{\alpha_{кр}}{2}\right)}{\cos\left(\frac{\alpha_{кр}}{2}\right)} \right]^2 \right\} = \\ &= \frac{\pi}{12} \frac{47 - 9\sqrt{17}}{\sqrt{10\sqrt{17} - 26}} \approx 0,66357. \end{aligned}$$

График функции  $\delta_1(\alpha)$  при  $\alpha \in \left[\frac{\pi}{3}; \alpha_{кр}\right]$  приведен на рис. 10.

Исследования показывают, что функция  $\delta_1(\alpha)$  имеет на отрезке  $\left[\frac{\pi}{3}; \alpha_{кр}\right]$  единственный минимум  $\alpha^* \approx 1,169$ , т.е. при  $\frac{\pi}{3} < \alpha < \alpha^*$  функция  $\delta_1(\alpha)$  строго монотонно убывает от величины  $\delta_1\left(\frac{\pi}{3}\right) \approx 0,648$  до  $\delta_1(\alpha^*) \approx 0,637$ , а при  $\alpha^* < \alpha < \alpha_{кр}$  — возрастает от  $\delta_1(\alpha^*) \approx 0,637$  до  $\delta_1(\alpha_{кр}) \approx 0,665$ .

Вернемся к задаче о вычислении плотности упаковки. Добавка к плотности составила

$$\begin{aligned} \Delta_1 \delta(\alpha) &= \frac{V_x}{V_{\text{фунд.яч.}}} = \frac{4\pi r^3 \left( \left(1 - \cos \frac{\alpha}{2}\right) / \cos \frac{\alpha}{2} \right)^2}{8r^3 \sin \alpha} = \\ &= \frac{\pi}{2 \sin \alpha} \left( \frac{1 - \cos \frac{\alpha}{2}}{\cos \frac{\alpha}{2}} \right)^2. \end{aligned}$$

Покажем, что при  $\frac{\pi}{3} \leq \alpha \leq \alpha_{\text{кр}}$  эта величина строго монотонно возрастает. Рассмотрим функцию

$$g(\alpha) = \frac{1}{\sin \alpha} \left( \frac{1 - \cos \frac{\alpha}{2}}{\cos \frac{\alpha}{2}} \right)^2 = \frac{\left( 1 - \cos \frac{\alpha}{2} \right)^2}{\sin \alpha \cos^2 \frac{\alpha}{2}}$$

и вычислим ее производную

$$g'(\alpha) = \frac{\left( 1 - \cos \frac{\alpha}{2} \right)^2}{\sin^2 \alpha \cos^2 \frac{\alpha}{2}} \left( 3 + 2 \cos \frac{\alpha}{2} - 2 \cos^2 \frac{\alpha}{2} \right).$$

Знак производной  $g'(\alpha)$  определяется знаком величины  $3 + 2 \cos \frac{\alpha}{2} - 2 \cos^2 \frac{\alpha}{2}$ . Обозначим  $\cos \frac{\alpha}{2} = t$  и рассмотрим квадратный трехчлен  $h(t) = 3 + 2t - 2t^2$ . Его корни (рис. 11)

$$t_{1,2} = \frac{1 \pm \sqrt{1+6}}{2} = \frac{1 \pm \sqrt{7}}{2},$$

а так как  $t = \cos \frac{\alpha}{2}$  и  $\frac{\pi}{3} \leq \alpha \leq \alpha_{\text{кр}} = 2 \arccos \left( \frac{\sqrt{17}-1}{4} \right)$ , то  $\frac{\sqrt{17}-1}{4} \leq t \leq \cos \frac{\pi}{6} = \frac{\sqrt{3}}{2}$ , а на этом отрезке многочлен  $h(t)$  положителен. Следовательно, при  $\frac{\pi}{3} \leq \alpha \leq \alpha_{\text{кр}}$   $g'(\alpha) > 0$  и функция  $g(\alpha)$ , а с ней и величина  $\Delta_1 \delta(\alpha)$  строго монотонно возрастают. При этом

$$\Delta_1 \delta \left( \frac{\pi}{3} \right) = \frac{\pi}{3\sqrt{3}} (7 - 4\sqrt{3}) \approx 0,04341;$$

$$\begin{aligned} \Delta_1 \delta(\alpha_{\text{кр}}) &= \frac{\pi}{2 \sin(\alpha_{\text{кр}})} \left[ 1 - \cos \left( \frac{\alpha_{\text{кр}}}{2} \right) / \cos \left( \frac{\alpha_{\text{кр}}}{2} \right) \right]^2 = \\ &= \frac{\pi}{4} \frac{13 - 3\sqrt{17}}{\sqrt{10\sqrt{17} - 26}} \approx 0,12692. \end{aligned}$$

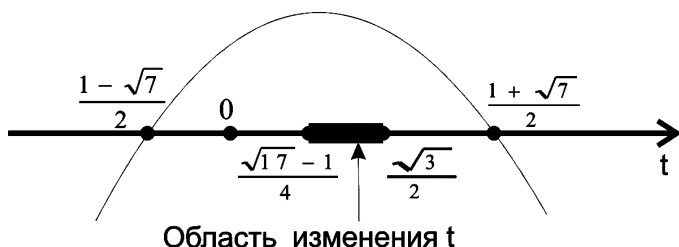
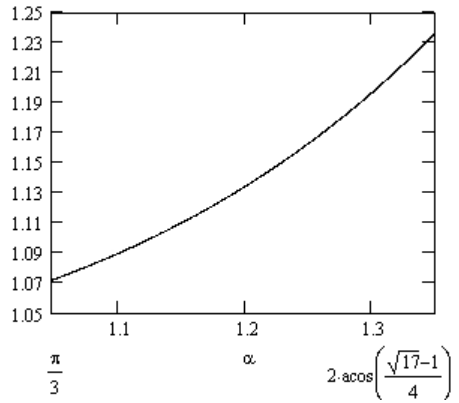
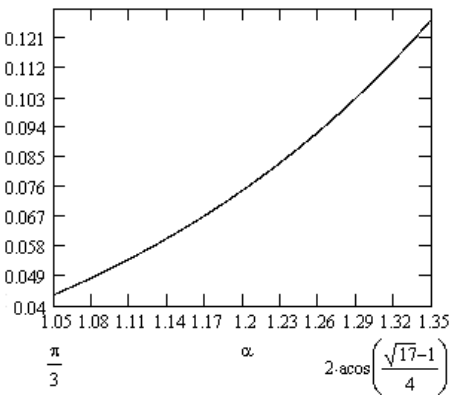


Рис. 11. График функции  $h(t)$



**Рис. 12. График функции  $\Delta_1\delta(\alpha)$**

**Рис. 13. График функции  $k(\alpha)$**

График функции  $\Delta_1\delta(\alpha)$  изображен на рис. 12.

Плотность первоначальной упаковки возросла в

$$k(\alpha) = \frac{\delta_1(\alpha)}{\delta_0(\alpha)} = 1 + 3 \left( \frac{1 - \cos \frac{\alpha}{2}}{\cos \frac{\alpha}{2}} \right)^2 \text{ раз.}$$

При  $\frac{\pi}{3} \leq \alpha \leq \alpha_{\text{кр}}$  эта функция строго монотонно возрастает как супер-

позиция строго монотонно убывающих функций  $h(t) = 1 + 3 \left( \frac{1-t}{t} \right)^2$

( $0 < t < 1$ ) и  $t = \cos \frac{\alpha}{2}$  ( $\frac{\pi}{3} \leq \alpha \leq \alpha_{\text{кр}}$ ). При этом

$$k\left(\frac{\pi}{3}\right) = 4 \left( 2 - \sqrt{3} \right) \approx 1,0718,$$

$$k(\alpha_{\text{кр}}) = 1 + 3 \left( \frac{1 - \cos \left( \frac{\alpha_{\text{кр}}}{2} \right)}{\cos \left( \frac{\alpha_{\text{кр}}}{2} \right)} \right)^2 = \frac{47 - 9\sqrt{17}}{8} \approx 1,23650.$$

График функции  $k(\alpha)$  изображен на рис. 13

*Случай  $\alpha_{\text{кр}} < \alpha < 90^\circ$ .* При  $\alpha \approx 90^\circ$  в оставшуюся область входят два одинаковых цилиндра радиусом  $y_1$  и еще два одинаковых цилиндра радиусом  $y_2$ ; при  $\alpha \rightarrow 90^\circ$   $y_1, y_2 \rightarrow y$ . При  $\alpha \approx \alpha_{\text{кр}}$  в оставшуюся область входит один цилиндр с максимальным радиусом  $z$ ; при  $\alpha \rightarrow \alpha_{\text{кр}}$   $z \rightarrow x$ . В этом случае в каждую фундаментальную ячейку попадает часть цилиндра с осью, проходящей через точку  $O'_1$ , две одинаковых части цилиндров с осями, проходящими через точки  $O'_2$  и  $O'_4$  и, возможно, часть цилиндра с осью, проходящей через точки  $O'_3$  (рис. 14). При этом с уменьшением значения  $\alpha$  от  $90^\circ$  до  $\alpha_{\text{кр}}$  доля этой части будет уменьшаться, пока не обратится в ноль, но будет возрастать неучтенная часть цилиндров, изображенных на рис. 14 пунктиром.

**Выводы.** 1. Математически обоснован выбор расчетной модели — фундаментальной ячейки и проведен расчет плотности ее упаковки при различных значениях определяющего параметра (угла  $\alpha$  взаимного расположения фундаментальных ячеек).

2. На основе расчетов установлено, что плотность упаковки фундаментальной ячейки  $\delta_0$  при возрастании угла  $\alpha$  с  $\frac{\pi}{3}$  до  $\frac{\pi}{2}$  монотонно убывает от величины  $\delta_0\left(\frac{\pi}{3}\right) \approx 0,6046$  до

$\delta_0\left(\frac{\pi}{2}\right) \approx 0,5236$  без цилиндрических наполнителей и увеличивается от  $\delta_1\left(\frac{\pi}{3}\right) \approx 0,64801$  до  $\delta_1\left(\frac{\pi}{2}\right) \approx 0,65835$  с цилиндрическим наполнителем.

3. В области изменения угла  $\alpha$  от  $\frac{\pi}{3}$  до  $\frac{\pi}{2}$  найден критический угол  $\alpha_{кр} \approx 77,337^\circ$ , при котором не нарушаются условия существования фундаментальной ячейки и одновременного размещения в области между шарами двух цилиндрических наполнителей. Для этого случая функция  $\delta_1(\alpha)$  при  $\frac{\pi}{3} < \alpha < \alpha^*$  строго монотонно убывает от  $\delta_1\left(\frac{\pi}{3}\right) \approx 0,648$  до  $\delta_1(\alpha^*) \approx 0,637$ , а в области  $\alpha^* < \alpha < \alpha_{кр}$  возрастает от  $\delta_1(\alpha^*) \approx 0,637$  до  $\delta_1(\alpha_{кр}) \approx 0,665$ .

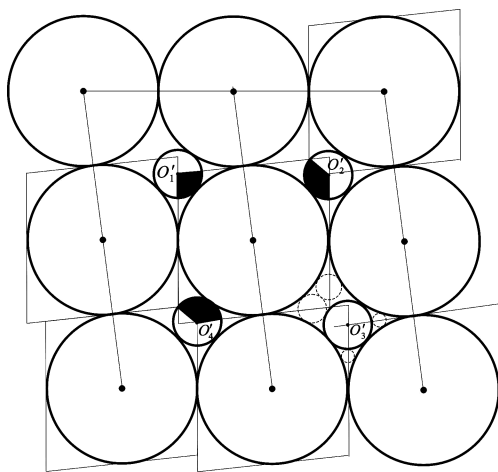


Рис. 14. Схема упаковки при  $\alpha_{кр} < \alpha < 90^\circ$

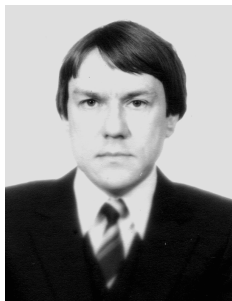
## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Стоян Ю. Г., Яковлев С. В. Математические модели и оптимизационные методы геометрического проектирования. – Киев: Наук. думка, 1986. – 268 с.
2. Стоян Ю. Г., Гиль Н. И. Свойства и способы реализации функции плотного размещения. – Киев: АН УССР, 1972. – 48 с.
3. Конвей Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решетки и группы. В 2-х томах. Т. 1. – М.: Мир, 1990. – 415 с. Т. 2. – 376 с.
4. Готт Л. Ф. Расположения на плоскости, на сфере и в пространстве. – М.: ГИФМЛ, 1958. – 364 с.

Статья поступила в редакцию 13.06.2006

Владимир Иванович Ульянов родился в 1947 г., окончил МВТУ им. Н.Э. Баумана в 1974 г. Канд. техн. наук, доцент кафедры “Управление качеством и сертификация” Рязанского государственного радиотехнического университета. Автор 70 научных работ в области автоматизации производственных процессов и технологии получения тонких диэлектрических пленок.

V.I. Uliyanov (b. 1947) graduated from the Bauman Moscow Higher Technical School in 1974. Ph. D. (Eng.), assoc. professor of “Quality Control and Certification” department of the Ryazan State Radio-technical University. Author of 70 publications in the field of automation of production processes and technology of thin dielectric films.



Александр Михайлович Лавров родился в 1955 г., окончил МГУ им. М.В. Ломоносова в 1977 г. Канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры “Вычислительная математика” Рязанского государственного радиотехнического университета. Автор 90 научных работ в области теоретической и математической физики, теории случайных процессов и обобщенных функций.

A.M. Lavrov (b. 1955) graduated from the Lomonosov State University in 1977. Ph. D. (Phys.-Math.), assoc. professor of “Quality Control and Certification” department of the Ryazan State Radio-technical University. Author of 90 publications in the field of theoretical and mathematical physics, theory of stochastic processes and generalized functions.



Олег Николаевич Клочков родился в 1980 г., окончил Рязанскую государственную радиотехническую академию в 2002 г. Аспирант кафедры “Управление качеством и сертификация” Рязанского государственного радиотехнического университета. Автор 10 научных работ в области автоматизации производственных процессов и технологии тонких диэлектрических пленок.

O.N. Klochkov (b. 1980) graduated from the Ryazan State Radio-technical Academy in 2002. Post-graduate of “Quality Control and Certification” department of the Ryazan State Radio-technical University. Author of 10 publications in the field of automation of production processes and technology of thin dielectric films.



Владислав Владимирович Чистяков родился в 1980 г., окончил Рязанскую государственную радиотехническую академию в 2002 г. Инженер ЗАО “Нефтегазкомплектсервис”, г. Луховицы, Московская область. Автор 10 научных работ в области автоматизации производственных процессов и технологии тонких диэлектрических пленок.

V.V. Chistyakov (b. 1980) graduated from the Ryazan State Radio-technical Academy in 2002. Engineer of the limited stock company “Neftegaskomplektservis”, town Lukhovitsy, Moscow region. Author of 10 publications in the field of automation of production processes and technology of thin dielectric films.