

**Полная исследовательская публикация** Тематический раздел: Термодинамические исследования.  
Идентификатор ссылки на объект – ROl: jbc-01/15-44-10-104 Подраздел: Физическая химия.  
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>  
УДК 532.74. Поступила в редакцию 26 августа 2015 г.

## Линейная зависимость квадрата радиуса координационной сферы кристаллов от ее номера

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович

Лаборатория моделирования. ФГБУН «Институт теплофизики СО РАН». Пр-кт Лаврентьева, 1.  
г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: [tepliza@academ.org](mailto:tepliza@academ.org)

**Ключевые слова:** кристалл, решетка, координационное число, простая кубическая решетка, объемно-центрированная кубическая решетка, гранецентрированная кубическая решетка, гексагональная плотная упаковка, алмазная упаковка, тетраэдрическая упаковка, решетка гексагонального льда, решетка  $\beta$ -вольфрама, квазикристаллическая модель.

### Аннотация

Показано, что зависимость квадрата радиуса координационной сферы от номера этой сферы простой, объемно-центрированной и гранецентрированной кубических решеток, кристаллов с гексагональной плотной и алмазной (тетраэдрической) упаковками, решеток гексагонального льда, решетка и  $\beta$ -вольфрама с хорошей точностью может быть представлена линейной функцией, и точность этого представления растет с ростом номера координационной сферы. На основе этой зависимости установлено, что номер первого исчезающего пика радиальной функции распределения в кристаллах обратно пропорционален температуре.