

Аналіз можливостей використання потенціалу міжатомної взаємодії для моделювання механічних та теплових властивостей речовини

О.О. Гайша^{1,*}

¹ Національний університет кораблебудування імені адмірала Макарова,
пр. Героїв Сталінграду, 9, 54000, Миколаїв, Україна

(Одержано 07.09.2011, опубліковано online 08.05.2012)

У статті запропоновано підхід до моделювання різноманітних властивостей речовини (механічних, теплових, деяких електричних) на основі двохчасткових потенціалів міжатомної взаємодії. Сформульовано пряму та обернену задачі, відповідно, по розробці методик використання потенціалу, та по визначенню його форми та параметрів. Запропоновано розширити метод структурних одиниць на різні складові будови речовини.

Ключові слова: імітаційне моделювання, потенціал Морзе, потенціал Леннарда-Джонса, метод структурних одиниць, чисельні розрахунки.

PACS number: 61.50.Ah

1. ВСТУП

У сучасній фізиці відомо багато методів моделювання властивостей речовини. Однак, практично кожен метод призначений для знаходження переважно одного, а максимум кількох параметрів речовини, наприклад, теплоємності, або модуля пружності, або електропровідності, тощо [1-2]. Загальні методи, по яким можна було б знаходити різноманітні характеристики даної речовини на основі невеликої кількості певних уніфікованих її параметрів, відсутні.

2. ОПИС ОБ'ЄКТУ ТА МЕТОДІВ ДОСЛІДЖЕННЯ

Зважаючи на вищезазначене, логічною є постановка задачі дослідження можливостей моделювання більшості (основних) властивостей твердих тіл на базі однієї висхідної інформації. Слід, по-перше, обрати таку інформацію, на основі якої можна було б знаходити властивості речовин. По-друге, слід побудувати за допомогою розроблених методик моделі поведінки речовини у різних умовах її існування. По-третє, слід впевнитися, що задана висхідна інформація та запропоновані методики та моделі є адекватними, тобто дозволяють правильно розраховувати властивості речовин різних типів.

Аналізуючи, яка саме інформація могла б бути базою для знаходження макроскопічних властивостей тіл, слід звернутися до мікроскопічних характеристик речовини, а саме до її будови та характеру взаємодії між її окремими мікроскладовими. Такий підхід є базою для імітаційного методу частинок, описаного в [3], та який стає все більш популярним завдяки стрімкому зростанню обчислювальної потужності комп'ютерної техніки. Однак, на відміну від [3], пропонується за допомогою цього методу уніфіковано знаходити усі параметри тіл, а не лише механічні.

3. ОПИС ТА АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Отже, основою для усіх подальших розрахунків пропонується обрати функцію, що описує характер

взаємодії двох (або більшої кількості) частинок (атомів) даної речовини – потенціал міжатомної взаємодії. В загальному вигляді такий двохчастковий потенціал буде функцією шести змінних. Три з них наочніше всього задати у сферичній системі координат ($r; \varphi; \theta$). Саму систему координат можна помістити, наприклад, у центр однієї з частинок, направляючи полярну та азимутальну вісі завжди вздовж певних особливостей будови даної частинки (наприклад, вздовж лінії, що з'єднує центри атомів у молекулі; або вздовж вісі симетрії не сферично симетричної електронної оболонки, тощо). Положення центру другої частинки задаватиметься трьома згаданими сферичними координатами, а також орієнтацією другої частинки у просторі даної системи відліку (тобто фактично орієнтацією відносно першої частинки). Орієнтацію у просторі завжди можна задавати трьома кутами, наприклад ($\alpha; \beta; \gamma$). Отже, в цілому потенціал двохчасткової взаємодії є функцією шести змінних, тобто

$$W = W(r, \varphi, \theta, \alpha, \beta, \gamma). \quad (1)$$

У багатьох випадках залежність (1) можна сильно спростити, якщо знехтувати несиметричністю електронних оболонок (молекул), вважаючи їх сферично симетричними [4].

Наприклад, якщо розглядати дихотомічну взаємодію симетричної та несиметричної частинок, то, розміщуючи початок координат у центрі несиметричної частинки, без збитку для загальності можна задавати потенціал функцією трьох координат:

$$W = W(r, \varphi, \theta).$$

Самий же простий варіант взаємодії двох частинок отримуємо за умови сферичної симетрії кожної з них. При цьому маємо найпростіший вигляд (1), в якому прибрана залежність від кутових координат (за рахунок сферичної симетрії):

$$W = W(r). \quad (2)$$

Завдання потенціалу у формі (2) часто викорис-

* physics2005@mail.ru

товується на практиці, наприклад, при моделюванні поведінки частинок реального газу (сили Ван-дер-Ваальса). Конкретний вид формули (2) може задаватися різними функціональними залежностями, найпростішими з яких є потенціали Леннарда-Джонса та Морзе – відповідно (3) та (4):

$$W(r) = D \left(\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right) \quad (3)$$

$$W(r) = D \left(e^{-2\alpha(r-a)} - 2e^{-\alpha(r-a)} \right), \quad (4)$$

де r – відстань між центрами атомів; D – енергія дисоціації, яку слід затратити, щоб роз'єднати два атоми, що взаємодіють; a – рівноважна відстань між центрами атомів; α – коефіцієнт.

Також часто використовуються потенціали Мі, сплайнний, тощо. Залежності (3) та (4) та аналогічні, мають однаковий характер (рис. 1), та можуть окрім величин, що мають ясний фізичний зміст (як D та a), містити різні коефіцієнти (типу α у потенціалі Морзе), які лише визначають форму кривої рис.1. Форма залежності виду (2) може бути і значно складнішою, такою, як потребує модель та експериментальні дані для узгодження.

Потенціал виду (2) дозволяє легко визначити силу міжатомної взаємодії та коефіцієнт жорсткості міжатомного зв'язку (динамічний) – див. рис. 1:

$$F(r) = - \frac{dW(r)}{dr} \quad (5)$$

$$k(r) = - \frac{dF(r)}{dr} \quad (6)$$

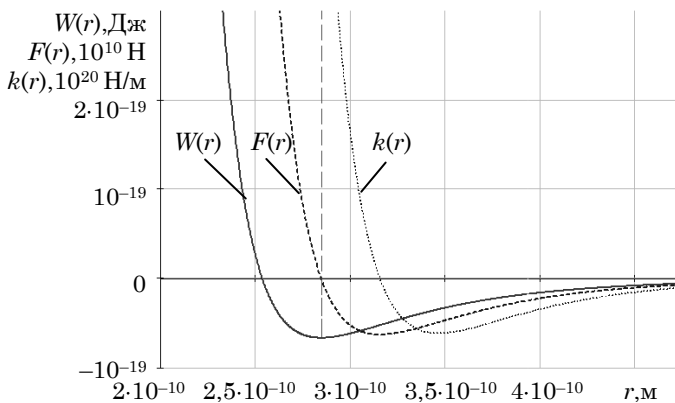


Рис. 1 – Характер потенціалу міжатомної взаємодії для Al

У більш загальному випадку (1) сила, як відомо, визначається через градієнт потенціального поля:

$$\vec{F} = -\text{grad } W.$$

Відправною точкою для подальших досліджень слугуватиме твердження (яке треба довести відповідними розрахунками): на основі потенціалу міжатомної взаємодії типу (1), або в простих випадках (2), можна визначити більшість макроскопічних характеристик речовини (пряма задача). В такій постановці дану задачу можна вважати феноменологічною.

Однак, для розрахунку необхідна форма потенціалу, яку будемо знаходити на основі експериментальних даних про деякі характеристики речовини, які більш легко і достатньо точно підлягають визначенню. Такі розрахунки складають суть оберненої задачі по знаходженню форми потенціалу (1) або (2) для кожної конкретної речовини.

Серед величин, що відносно легко та відносно точно підлягають визначенню, можна назвати густину ρ , модуль пружності E , швидкість звуку (поздовжніх хвиль) v , температура плавлення $T_{пл}$ та випаровування $T_{вип}$, коефіцієнт лінійного теплового розширення α , границя міцності (та, можливо, текучості). Серед величин, що визначатимуться за допомогою потенціалу, можна назвати модуль зсуву G , коефіцієнт теплопровідності κ , питома теплоємність c , питома теплота плавлення λ та випаровування L , коефіцієнт Пуассона μ , стисливість K , швидкість поперечних хвиль $v_{п}$, тощо.

Результатом подібної роботи може бути:

- знайдена форма потенціалу (1) (або хоча б (2)) для кожної речовини, задана, наприклад, у табличній чи графічній формі, або у вигляді апроксимаційної формули зі знайденими її параметрами (таким чином, мова йде про рішення оберненої задачі дослідження);

- набір методик, за якими по відомому потенціалу можна знайти необхідні характеристики речовини (рішення прямої задачі).

Слід сказати, що за наявності можливості безпосередніх квантово-механічних розрахунків потенціалу взаємодії для усіх відомих атомів форма залежності (1) стане відомою. Тоді, відповідно, сформульована обернена задача, вирішена на основі експериментальних даних (емпіричних коефіцієнтів), втрачає зміст. Однак, на даний момент розрахунок потенціалів взаємодії виконано для обмеженої кількості елементів (переважно дуже простих), а подальші розрахунки є надто математично складними. Зважаючи на це, сформульована вище обернена задача для багатьох речовин є актуальною. Що ж стосується прямої задачі визначення фізичних властивостей речовин на основі відомого потенціалу взаємодії, то вона є актуальною як на даний момент, так і після можливого точного (теоретичного) знаходження потенціалів взаємодії різних атомів.

Окрім труднощів науково-методичного характеру, при вирішенні поставленої задачі існує також принципова проблема, яка стримує широке використання методу частинок в цілому, а саме, – обмежені обчислювальні можливості ЕОМ. Для спрощення чисельних розрахунків можна застосувати метод структурних одиниць, запропонований в [5] професором Мочаловим. Суть методу полягає у розрахунку фізичних властивостей для однієї структурної одиниці речовини, з яких вона в цілому складається, а саме – елементарної комірки кристалічної решітки твердого тіла. Так як структура тіла повторює структуру комірки, то і фізичні властивості будуть відповідними. Число ж атомів у одній комірці невелике, тому розрахунки на ЕОМ займають для однієї такої структурної одиниці прийнятний час при задовільній точності.

Доцільно в деяких випадках розширити згаданий метод структурних одиниць, і розраховувати власти-

вості певних структурних одиниць, відмінних від однієї комірки. Наприклад, якщо розраховується теплоємність речовини, то можна рахувати теплоємність такої структурної одиниці, як сам атом, а не комірки в цілому. Якщо розраховується коефіцієнт Пуассона, то доцільно розглядати половину чи чверть елементарної комірки, тощо. Отже, з використанням розширеного метода структурних одиниць можна значно зменшити необхідні для розрахунків потужності ЕОМ, що дозволяє використовувати метод частинок без суттєвого погіршення точності результатів.

На основі запропонованого підходу, створено програмне забезпечення для моделювання механічних (та в подальшому теплових) властивостей твердих тіл методом молекулярної динаміки. Зразок моделюється у вигляді монокристалу правильної геометричної форми. Інтегрування рівнянь руху частинок ведеться за неявною симетричною різницевою схемою (швидкісна форма алгоритму Верле). Для уникнення впливу поверхневих ефектів у програмі є опція, яка «включає взаємодію» атомів, що належать бічним граням, із відповідними атомами, що лежать на протилежній грані зразка (опція може включатися для обраних граней).

На даний момент існує можливість проведення чисельних експериментів з дослідження деформацій, що виникають при навантаженні за трьома осями кристала. Спостереження за розвитком деформації можна вести в динаміці з різним масштабом за часом. Отже, зокрема, можна досліджувати квазістатичний режим деформації. Проведені чисельні експерименти для чистого заліза показали задовільне співпадіння з відомими кривими навантаження (на даний момент не враховується зерниста структура реального металу, який у першому наближенні розраховується як монокристал). Присутня можливість контролю швидкості розповсюдження збурень (поздовжніх та поперечних хвиль) вздовж осей кристалу, а також миттєвих

(теплових) швидкостей атомів зразка, оцінки та аналізу їх розподілу. Програма має опцію візуального спостереження за динамікою атомів у тривимірній решітці («молекулярне кіно»), яку зручно використовувати для контролю цілісності зразка. Якісний та кількісний аналіз результатів моделювання для різних речовин виходить за рамки даної публікації.

Оскільки теплові властивості напряму пов'язані із характеристиками коливань атомів на мікрорівні, за допомогою цієї ж моделі планується дослідження і явищ теплопровідності, теплоємності, теплового розширення, тощо.

4. ВИСНОВОК

Таким чином, в статті запропонована розробка підходу, який дозволяє на базі певної заданої інформації, а саме, двохчасткового потенціалу міжатомної взаємодії, отримувати фізичні властивості речовини. Як висновок, можна сказати, що даний підхід до моделювання макроскопічних властивостей тіл на базі потенціалу міжатомної взаємодії на даному етапі розвитку фізики є актуальним (причому, як пряма задача моделювання властивостей, так і обернена задача знаходження самого потенціалу на базі експериментальних відомостей), а використання методу структурних одиниць дозволяє зменшити число атомів, що розглядаються при застосуванні метода частинок, до задовільних величин (при яких розрахунок виконується достатньо швидко на сучасних ЕОМ). Частина запропонованих методик уже реалізована і знаходиться на різних стадіях публікації (зокрема, розрахунок швидкості розповсюдження коливань, коефіцієнта пружності, коефіцієнта Пуассона, теплоємності); у перспективі планується розробка необхідних методик для розрахунку інших фізичних властивостей, згаданих вище.

Анализ возможностей использования потенциала межатомного взаимодействия для моделирования свойств вещества

А.А. Гайша¹

¹ *Національний університет кораблебудування імені адмірала Макарова, пр. Героев Сталинграда, 9, 54000, Николаев, Україна*

В статье предложен подход к моделированию разнообразных свойств вещества (механических, тепловых, некоторых электрических) на основе двухчастичных потенциалов межатомного взаимодействия. Сформулирована прямая и обратная задачи, соответственно, по разработке методик использования потенциала, и по определению его формы и параметров. Предложено расширить метод структурных единиц на разные составляющие строения вещества.

Ключевые слова: Имитационное моделирование, потенциал Морзе, потенциал Леннарда-Джонса, метод структурных единиц, численные расчеты.

Analysis of the possibilities of using interatomic potential for modeling of the matter properties

A.A. Gaisha¹

¹ *National University of Shipbuilding named after admiral Makarov, 9, Geroev Stalingrada Av., 54000 Mykolaiv, Ukraine*

The approach to the modeling of different matter properties (mechanical, thermal, some electrical) based on two-particle interatomic potential is proposed. The direct and indirect problems are formulated,

which are, respectively, consist in the development of the techniques of potential use and in the determination of its form and parameters. It is proposed to extend the unit structure method on other parts of matter structure.

Keywords: Simulation, Morse potential, Lennard-Jones potential, Unit structure method, Numerical calculations.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. А.А. Берлин, Н.К. Балабаев, *Соросовский Образовательный журнал. – Физика* №11, 85 (1997).
2. М.А. Баранов, Е.А. Дубов, *Научный сборник АГТИ* №11, 97 (2007).
3. А.М. Кривцов, Н.В. Кривцова, *Дальневосточный математический журнал ДВО РАН* 3 №2, 254 (2002).
4. М.А. Баранов, *ЭФТЖ* 1, 34 (2006).
5. А.А. Мочалов, А.А. Гайша, К.Д. Евфимко, *Ж. нано-электрон. физ.* 1, №1 70 (2009) (A.A. Mochalov, A.A. Gaisha, K.D. Evfimko, *J. Nano- Electron. Phys.* 1 No1, 62 (2009)).