Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
Физико-механический факультет
Кафедра «Теоретическая механика»

Потенциалы взаимодействия. Потенциальная энергия простых кристаллических решеток.

М.А. Калмыкова, выпуск 2011
Руководители: д.ф.-м.н., проф. А.М. Кривцов , асс. А.Ю. Панченко

На сегодняшний день, в ходе развития методов молекулярной динамики, были созданы различные виды потенциалов взаимодействия, позволяющие описывать процессы в твердых, жидких и газообразных телах. Данная работа посвящена рассмотрению сплайнового потенциала, являющегося модификацией широко используемого потенциала Леннарда–Джонса. Основной задачей в работе является установление зависимости параметров потенциала взаимодействия от введенного радиуса обрезания, а так же определение равновесного расстояния и потенциальной энергии простых кристаллических решеток при стремлении радиуса обрезания к бесконечности. Определение потенциальной энергии кристаллических решеток необходимо для установления соответствия между параметрами потенциала и механическими характеристиками материала полученных экспериментально.

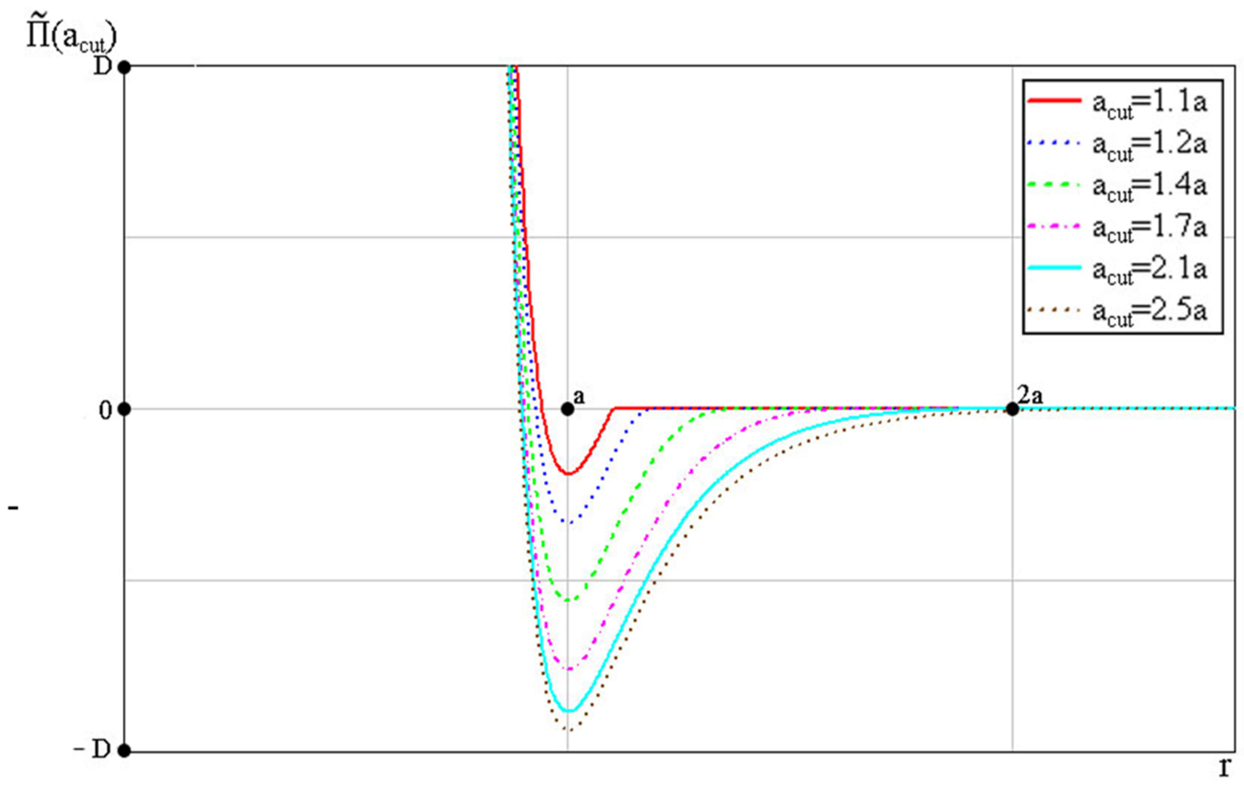
Определение сплайнового потенциала:

$$\tilde{F}(r)=k(r)F(r)$$

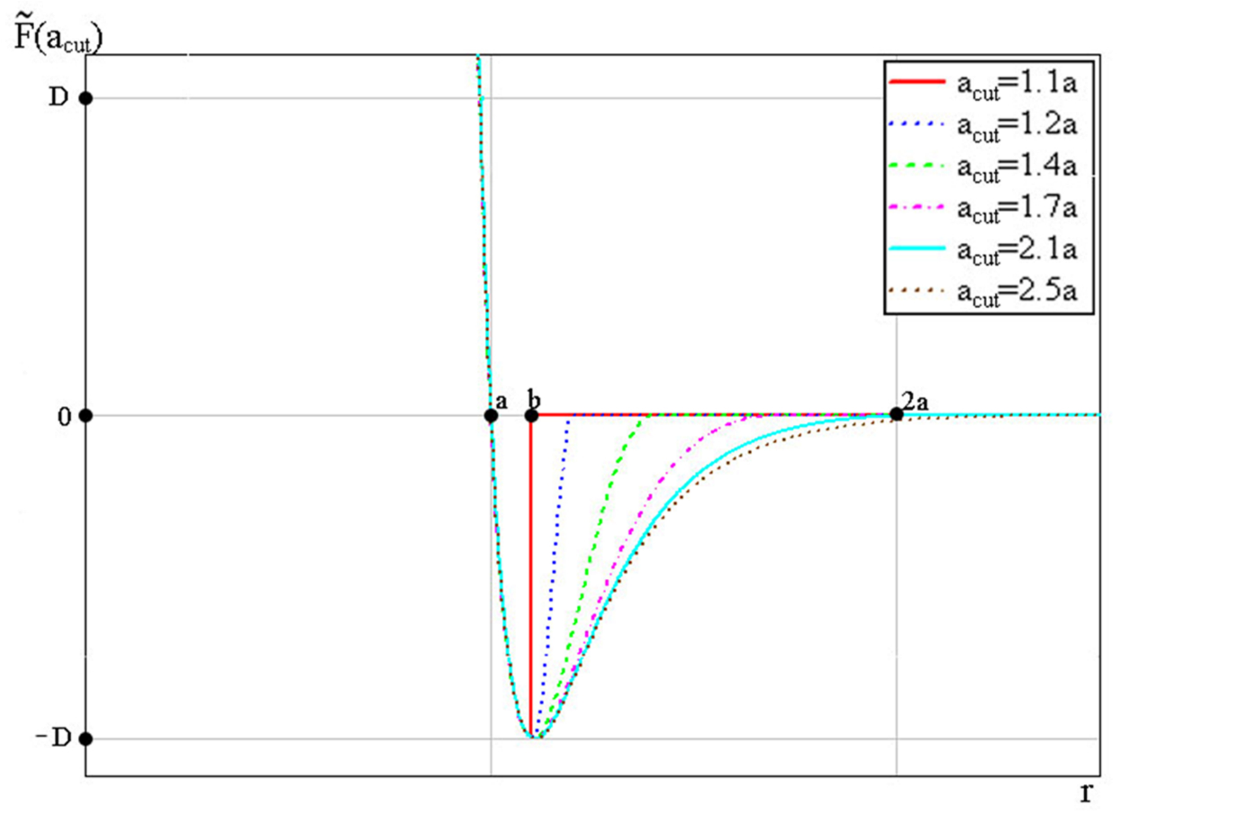
$$k(r)=\begin{cases}1 & r\le b\\ \left(1-\left(\dfrac{r^2-b^2}{a_{cut}^2-b^2}\right)^2\right)^2 & b<r\le a_{cut}\\ 0 & r>a_{cut}\end{cases}$$

$$\tilde{\Pi}(r)=\int_r^{a_{cut}} k'(r)\Pi(r)dr+k(r)\Pi(r)-k(a_{cut})\Pi(a_{cut})$$

a равновесное расстояние
a_{cut} радиус обрезания
b - расстояние разрыва связи
D - энергия связи, $\tilde{D}$ - энергия связи для сплайнового потенциала



Вид потенциала взаимодействия для радиусов обрезания от b до 2.5a

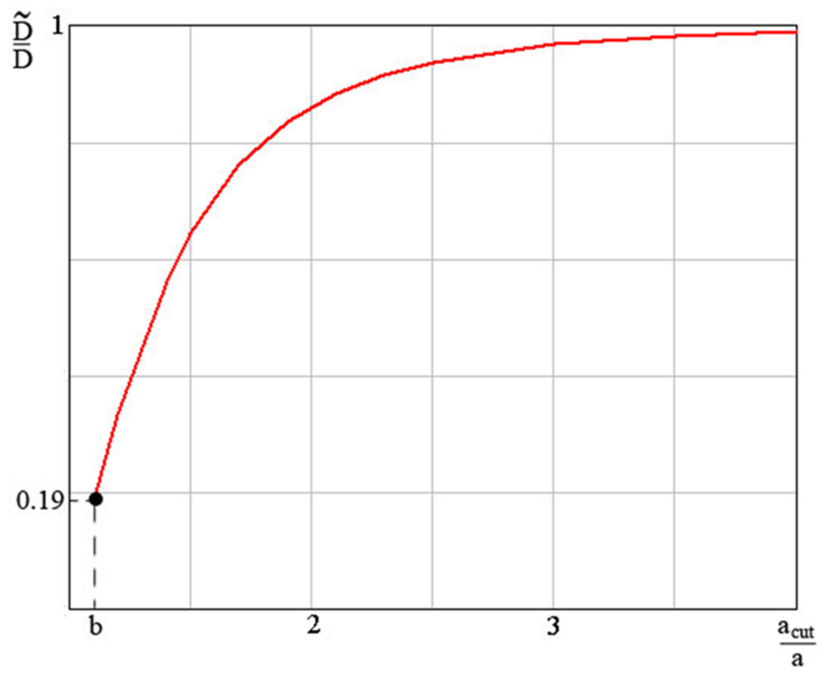


Вид силы взаимодействия для радиусов обрезания от b до 2.5a

Зависимость энергии связи от радиуса обрезания

Энергия связи это разность между энергией связанной системы частиц и суммарной энергией этих частиц в свободном состоянии. Для устойчивых систем энергия связи отрицательна и тем больше по абсолютной величине, чем прочнее система. Энергия связи для сплайнового потенциала изменяется в зависимости от радиуса обрезания.

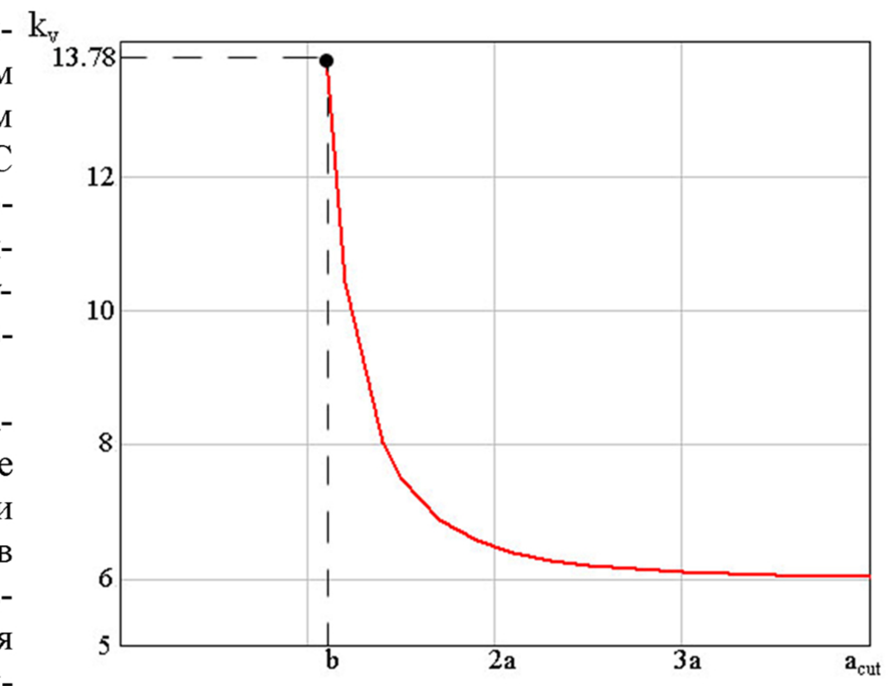
При увеличении значения радиуса обрезания значение энергии связи стремится к значению энергии связи для потенциала Леннард-Джонса. Минимальное значение энергии связи будет при $a_{cut}=b$. Разница в 1% достигается при $a_{cut}=4a$.



Зависимость коэффициента динамичности от радиуса обрезания

Коэффициент динамичности характеризует, насколько быстро распространяются возмущения в материале, состоящем из взаимодействующих частиц, по отношению к критическим скоростям, которые могут вызвать разрушение материала. С другой стороны, коэффициент динамичности может использоваться для характеристики хрупкости материала — действительно, материал с большими значениями коэффициента будет разрушаться при ударах со скоростями, малыми по сравнению со скоростью распространения упругих волн.

При уменьшении радиуса обрезания коэффициент динамичности для сплайнового потенциала увеличивается больше чем в 2 раза по сравнению к коэффициентом динамичности для потенциала Леннарда-Джонса. Для реальных материалов значения коэффициента динамичности принимают еще большие значения. Таким образом, введение радиуса обрезания приводит к тому, что параметры принимают более реалистические значения.



Равновесное расстояние и потенциальная энергия простых кристаллических решеток

Рассмотрим параметры кристаллической решетки при использовании сплайнового потенциала взаимодействия. Рассмотрим двумерные: треугольную и квадратную, и трехмерные ОЦК и ГЦК кристаллические решётки. При рассмотрении более 1-ной координационной сферы равновесное расстояние изменяется. Для моделирования решетки в ненапряженном состоянии необходимо найти новое равновесное расстояние. В равновесном состоянии тензор напряжений должен быть равен нулю. Запишем тензор напряжений в форме Коши и приравняем к нулю, получаем уравнение, для нахождения равновесного расстояния.
Тензор напряжений в простой кристаллической решетке имеет вид:

$$\tau=-\frac{1}{2V_0}\sum\frac{1}{a_\alpha}f(a_\alpha)\underline{a}_\alpha\underline{a}_\alpha$$

Для треугольной и квадратной двумерных решеток, а так же для всех кубических трехмерных решеток при отсутствии внешних сил тензор напряжений должен быть шаровым (в силу симметрии), что позволяет записать тензор напряжения в виде:

$$\tau=-\frac{1}{2V_0 d}\sum a_\alpha f(a_\alpha)\underline{\underline{E}}$$

Приравнивая тензор напряжений к нулю, получаем условие равновесия решетки. Тогда уравнение примет вид:

$$\sum a_\alpha f(a_\alpha)=0$$

Очевидно не все расстояния a_α различны. Если сгруппировать их по координационным сферам, то предыдущую формулу можно переписать в следующем виде:

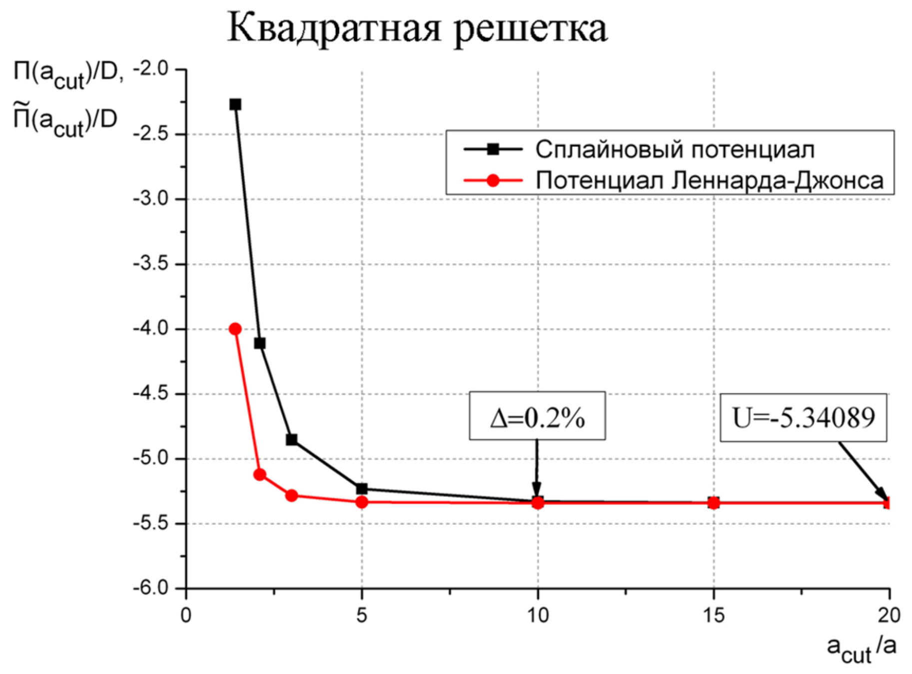
$$\sum_{k=1}^{n}N_k a_k f(a_k)=0$$

где k – номер координационной сферы, N_k – число лежащих на ней атомов; a_k – ее радиус; n – число сфер, принимаемых к рассмотрению (может быть 1). Решение уравнения будем искать в виде $a_k=\rho_k\tilde{a}$, где ρ_k – известные из геометрических соображений константы; $\tilde{a}$ – неизвестная величина, как правило, расстояние между некоторыми двумя атомами в решетке. При изменении $\tilde{a}$ вся решетка изменяется, оставаясь подобной самой себе. Теперь соотношение принимает вид уравнения относительно одной скалярной неизвестной:

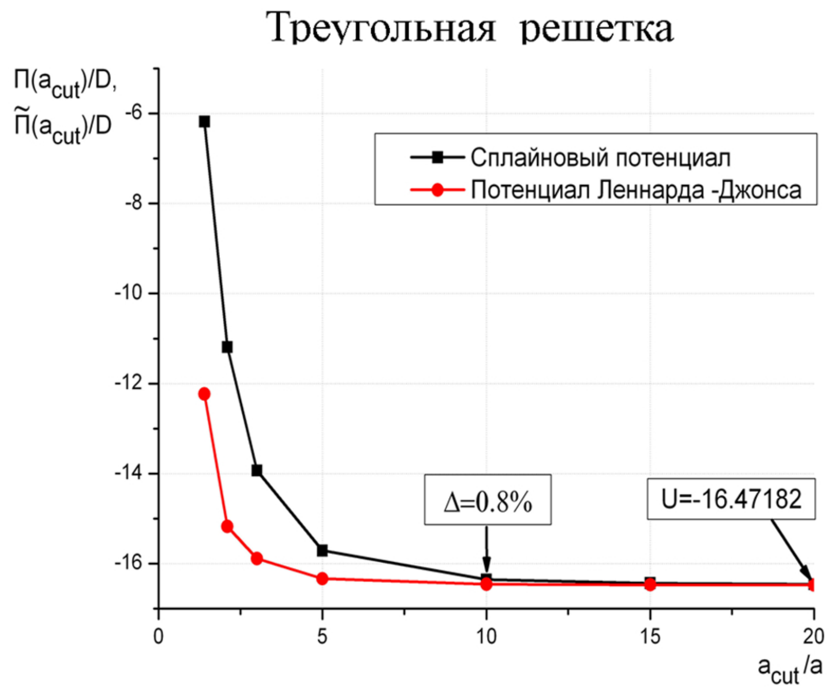
$$\sum_{k=1}^{n}N_k\rho_k f(\rho_k\tilde{a})=0$$

При изменении равновесного расстояния меняется и потенциальная энергия связи. Определим потенциальную энергию кристаллических решеток в равновесном состоянии для сплайнового потенциала .

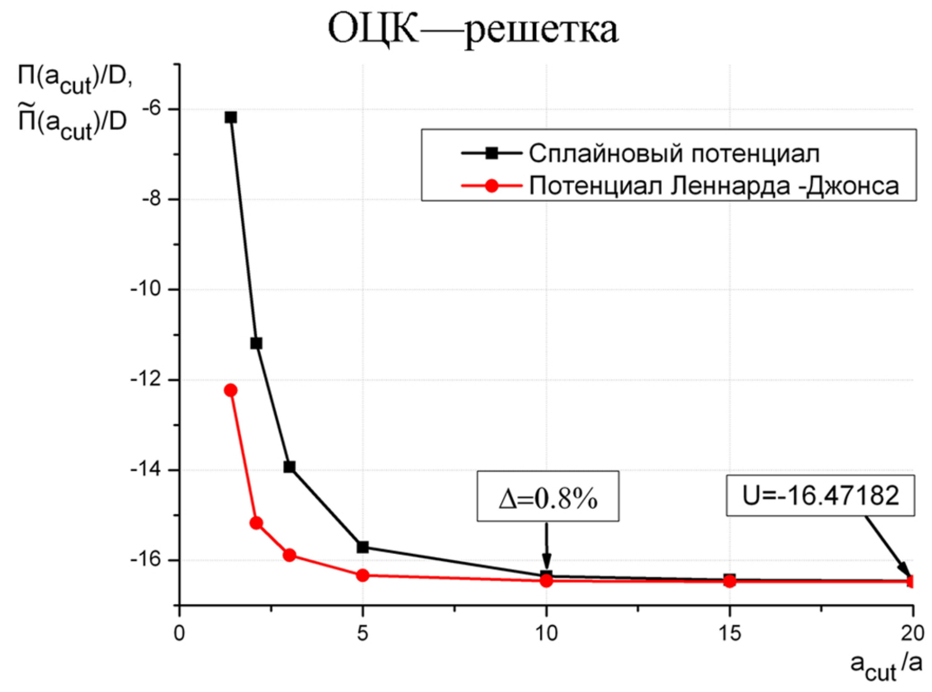
Квадратная решетка



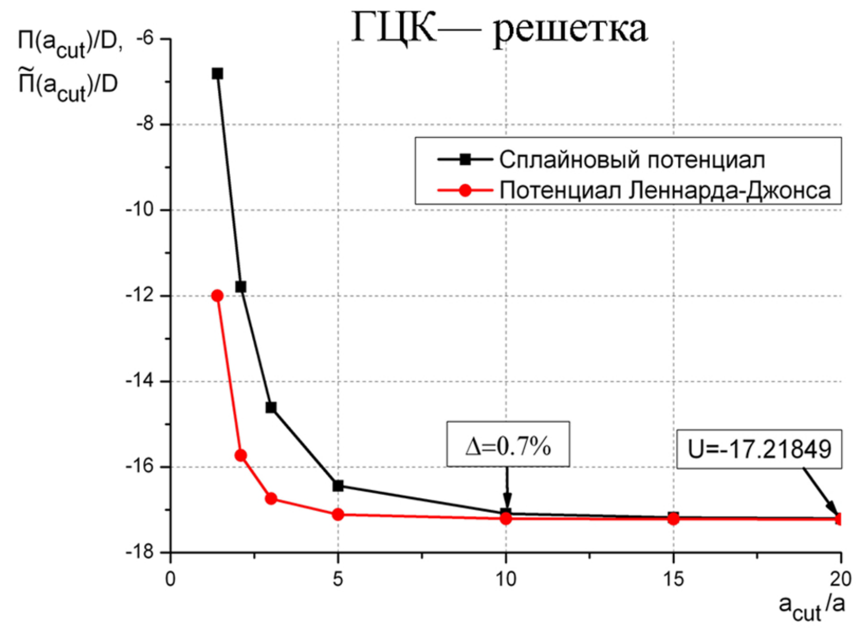
Треугольная решетка



ОЦК—решетка



ГЦК— решетка



тип решетки	$\tilde{a}/a\ (a_{cut}=1.4a)$	$\tilde{a}/a\ (a_{cut}=2.1a)$	$\tilde{a}/a\ (a_{cut}\to\infty)$
квадратная	1.0000000	0.9842128	0.951938
треугольная	1.0000000	0.9970161	0.969321
ОЦК	0.9676701	0.9664703	0.8927
ГЦК	1.0000000	0.9865126	0.9123

Равновесное расстояние простых кристаллических решеток

тип решетки	$U_{SLJ}(\tilde{a})/D$	$U_{MLJ}(\tilde{a})/D$	$U(\tilde{a})/D$
квадратная	-2.27025	-4.10985	-5.34089
треугольная	-3.40538	-5.38263	-6.76425
ОЦК	-6.17722	-11.18846	-16.47182
ГЦК	-6.81076	-11.79444	-17.21849

Потенциальная энергия простых кристаллических решеток

$\tilde{a}$ – равновесное расстояние при $a_{cut}\to\infty$
$\Delta=\dfrac{\Pi(a_{cut})-\Pi(20a)}{\Pi(20a)}\cdot 100\%$
U – потенциальная энергия кристалла при $a_{cut}\to\infty$
U_{SLJ} – потенциальная энергия кристалла при $a_{cut}=1.4a$
U_{MLJ} – потенциальная энергия кристалла при $a_{cut}=2.1a$

Включение в рассмотрение только первой координационной сферы дает ошибку более 260% в определении потенциальной энергии кристалла. Для потенциала Леннарда-Джонса энергия кристалла достигает значения с $\Delta<1\%$ при $a_{cut}=5a$,а при использовании сплайнового потенциала только при $a_{cut}=10a$

В данной работе была исследована зависимость вида потенциальной энергии и коэффициента динамичности для сплайнового потенциала Леннарда-Джонса. Показано что глубина потенциальной ямы уменьшается в 2 раза при радиусе обрезания равном 1.4a по сравнению с радиусом обрезания стремящемся к бесконечности. Установлено, что коэффициент динамичности увеличивается при уменьшении радиуса обрезания, приближаясь к значениям соответствующим эксперименту. Так же вычислено равновесное расстояние в простых кристаллических решетках и исследовано его изменение в зависимости от величины радиуса обрезания. Для двумерных решеток изменение равновесного расстояния при учете бесконечного количества координационных сфер в решетке по сравнению с равновесным расстоянием для потенциала Леннарда-Джонса составляет 4,81% и 3,07% для квадратной и треугольной решетки соответственно; для ОЦК – 10,7%, для ГЦК – 8,8%. Получена зависимость потенциальной энергии простых кристаллических решеток от радиуса обрезания. Установлено, что для корректного учёта энергии кристалла (погрешность менее 1%) необходимый радиус обрезания для сплайнового потенциала Леннарда-Джонса составляет не менее 10a.

Список литературы:
1. Борн М. Динамика кристаллической решетки. - М., 1932.
2. Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. -304с.
3. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов. Учебное пособие под ред. А.М. Кривцова. СПб.: Изд-во Политехнического Университета, 2009. -125 с.
4. A.M. Krivtsov, E.E. Pavlovskaya, M. Wiercigroch. Impact fracture of rock materials due to percussive drilling action. Proceedings of 21st International Congress of Theoretical and Applied Mechanics. 2004. Warsaw, Poland. 275 p.
5. Lennard-Jones, J. E. — Proc. Roy. Soc., 1924, v. A 106, p. 463.