

Расчет давления и атомных напряжений в МД

Давление в МД. Теорема вириала 1

$$G = \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i^{tot} \quad \vec{F}_i^{tot} - \text{полная сила на частицу } i$$

$$\langle G \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \sum_i \vec{r}_i(t) \cdot \vec{F}_i(t) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \sum_i \vec{r}_i(t) \cdot m \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} =$$

$$= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{\tau} \sum_i m \vec{r}_i(t) \frac{d\vec{r}_i(t)}{dt} \Big|_0^\tau - \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \sum_i m \left| \frac{d\vec{r}_i(t)}{dt} \right|^2 \right] =$$

0

Давление в МД. Теорема вириала 2

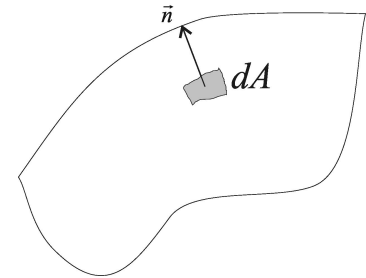
$$= -\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \sum_i m \left| \frac{d\vec{r}_i(t)}{dt} \right|^2 =$$
$$= \left| \left\langle m \left| \frac{d\vec{r}_i(t)}{dt} \right|^2 \right\rangle = 3k_B T \right| = -3Nk_B T$$

Давление в МД. Теорема вириала 3

$$\underline{\underline{F}}_i^{tot} = \underline{\underline{F}}_i + \underline{\underline{F}}_i^{ext}$$

$$\langle \underline{\underline{r}}_i \cdot \underline{\underline{F}}_i^{tot} \rangle = \langle \underline{\underline{r}}_i \cdot \underline{\underline{F}}_i \rangle + \langle \underline{\underline{r}}_i \cdot \underline{\underline{F}}_i^{ext} \rangle$$

$$d\underline{\underline{F}}_i^{ext} = -P \underline{\underline{n}} dA$$



$$\sum_i \underline{\underline{r}}_i \cdot \underline{\underline{F}}_i^{ext} = -P \int \underline{\underline{r}} \cdot \underline{\underline{n}} dA = P \int \nabla \cdot \underline{\underline{r}} dV = 3PV$$

$$-3PV + \langle \underline{\underline{r}}_i \cdot \underline{\underline{F}}_i \rangle = -3Nk_B T$$

Давление в МД. Теорема вириала 4

$$PV = Nk_B T + \frac{1}{3} \left\langle \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i \right\rangle$$

$$PV = Nk_B T - \frac{1}{3} \left\langle \sum_i \sum_{j>i} r_{ij} \frac{d\phi}{dr} \Big|_{r_{ij}} \right\rangle$$

Упругие деформации и напряжения

$$u(r) = r - r_0 \quad - \text{ поле упругих смещений}$$

$$\varepsilon^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u^\alpha}{\partial r^\beta} + \frac{\partial u^\beta}{\partial r^\alpha} \right) \quad - \text{ тензор деформации}$$

$$\sigma^{\gamma\delta} = c_{\gamma\delta\alpha\beta} \varepsilon^{\alpha\beta} \quad - \text{ закон Гука}$$

$$w = \frac{1}{2} \sigma^{\alpha\beta} \varepsilon^{\alpha\beta} \qquad \sigma^{\alpha\beta} = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon^{\alpha\beta}}$$

Атомные напряжения - определение

$$U = \sum_{i=1}^N U_i(\mathbf{r}_i) \quad - \text{потенциальная энергия}$$

$$\sigma^{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \frac{\partial U}{\partial \varepsilon^{\alpha\beta}} \quad - \text{средние напряжения}$$

$$\sigma_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{V_i} \frac{\partial U_i}{\partial \varepsilon^{\alpha\beta}} \quad - \text{напряжения в узле } i$$

Атомные напряжения для парных потенциалов

$$U_i = \frac{1}{2} \sum_{j=1 (j \neq i)}^N \varphi(r_{ij}) \quad \underline{u}_{ij} = \underline{r}_{ij} - \underline{r}_i \quad u_{ij}^\beta = r_{ij}^\alpha \varepsilon^{\alpha\beta}$$

$$U_i = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \left\{ \varphi(r_{ij}) \Big|_{r_{ij}} + \frac{\partial \varphi(r_{ij})}{\partial r_{ij}^\beta} \Big|_{r_{ij}} u_{ij}^\beta + \dots \right\} = U_i(0) + \frac{1}{2} \sum_{j=1 (j \neq i)}^N \frac{\partial \varphi(r_{ij})}{\partial r_{ij}^\beta} \Big|_{r_{ij}} r_{ij}^\alpha \varepsilon^{\alpha\beta}$$

$$\begin{aligned} \sigma_i^{\alpha\beta} &= \frac{1}{2V_i} \sum_{i \neq j} \frac{\partial \varphi(r_{ij})}{\partial r_{ij}^\beta} \Big|_{r_{ij}} r_{ij}^\alpha = \frac{1}{2V_i} \sum_{i \neq j} \frac{\partial \varphi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \frac{\partial r_{ij}}{\partial r_{ij}^\beta} r_{ij}^\alpha = \\ &= \left| \frac{\partial r_{ij}}{\partial r_{ij}^\beta} = \frac{r_{ij}^\beta}{r_{ij}} \right| = \frac{1}{2V_i} \sum_{i \neq j} \frac{d\varphi(r_{ij})}{dr_{ij}} \frac{r_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta}{r_{ij}} \end{aligned}$$

Примеры расчета атомных напряжений.

Напряжения в нанокристалле

