

А. А. Мочалов, К. Д. Евфимко, А. А. Гайша

Национальный университет кораблестроения им. адмирала Макарова, Николаев

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПРОДОЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЙ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ НА ОСНОВЕ ЗАДАНИЯ МЕЖАТОМНОГО ПОТЕНЦИАЛА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Представлена математическая модель процесса распространения продольных колебаний в твердом теле на основе задания межатомного потенциала взаимодействия. Приведены качественные результаты моделирования.

Ключевые слова: твердое тело, межатомный потенциал, продольные колебания, математическая модель.

В последнее время с развитием информационных технологий и наукоемких производств, с одной стороны, и возрастающей потребностью человечества в новых перспективных материалах, с другой стороны, особенно актуальным направлением в науке стало получение и исследование новых материалов с заданными свойствами. Одно из приоритетных направлений сегодня – создание математических моделей различных процессов, протекающих в твердых телах. Данная работа посвящена теоретическому методу исследования процесса распространения продольных колебаний в твердом теле на основе задания межатомного потенциала взаимодействия.

В работах [1-2] обоснована возможность моделирования свойств вещества в конденсированном состоянии на основе задания вида и параметров парного потенциала взаимодействия его атомов. Одно из практически важных физических свойств, к тому же сравнительно легко поддающееся экспериментальному определению, – скорость распространения продольных возмущений (скорость звука).

В развитии данной темы была поставлена задача получения значения скорости звука на основе известных параметров потенциала взаимодействия. Для этого промоделировали динамику кристаллической решетки при приложении к образцу внешней макроскопической силы (в общем случае – произвольная функция времени). Рассматривалась простая осевая деформация. Для расчетов выбрали вещество, обладающее гранецентрированной кубической решеткой, рис. 1, а (конкретные параметры брались для алюминия, имеющего достаточно большое промышленное значение). Вся кристаллическая решетка была разбита на отдельные элементарные ячейки,

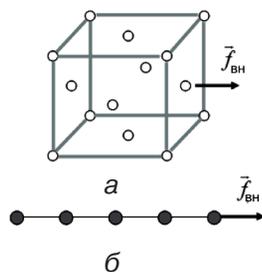


Рис. 1. ГЦК-ячейка (а); цепочка из сечений, эквивалентная двум ячейкам (б)

значение внешней растягивающей силы приведено на одну ячейку. Далее рассматривались отдельные сечения ячейки, нормальные к приложенной нагрузке (на рис. 1, б показано пять сечений, которыми можно представить две соседние ячейки). Эквивалентная масса каждого сечения равна $2m$, где m – масса атома.

Таким образом, перешли к одномерной задаче, где известны силы взаимодействия между отдельными сечениями (пересчитанные на основе известной силы взаимодействия между отдельными атомами) и внешняя нагрузка. Величины смещений r каждого сечения были получены на основании решения системы дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами вида

$$\frac{d^2 r}{dt^2} + 2\beta(r) \frac{dr}{dt} + \frac{f_{\text{вн}}(r)}{m} = \frac{f_{\text{вн}}(t)}{m}, \quad (1)$$

где β – коэффициент затухания, связанный с диссипативными свойствами среды, который в общем случае является функцией межатомного расстояния (следовательно, смещения данного атома r); $f_{\text{вн}}$ – сила взаимодействия между сечениями, рассчитываемая на основании потенциала взаимодействия (с учетом соответствующего пересчета от отдельного атома на сечение); в качестве первого приближения для создания рабочей модели (с возможностью дальнейшей замены вида парного потенциала) был принят потенциал Морзе; $f_{\text{вн}}$ – приведенная внешняя сила.

Количество уравнений в системе равно числу сечений в рассматриваемой цепочке. При расчетах использовались цепочки с количеством сечений до 10^3 . Решение уравнений выполнено численным методом путем перехода к приращениям и решения их на отдельных шагах по времени с постоянными коэффициентами (на каждом следующем шаге производился пересчет коэффициентов)

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \Delta r_{j,i}}{dt^2} + 2\beta(\Delta r_{j,i} - \Delta r_{j-1,i}) \frac{d \Delta r_{j,i}}{dt} = \\ = \frac{f_{\text{вн}}(t_i) - f_{\text{вн}}(\Delta r_{j,i} - \Delta r_{j-1,i})}{m}, \end{aligned} \quad (2)$$

где j – индекс по координате (фактически, номер сечения в цепочке); i – индекс по времени. При этом начальное значение приращения каждого шага равнялось нулю, а также соблюдалось условие согласования производных смещения на границах отдельных временных шагов

$$\Delta r_{j,i}(0) = 0, \quad \frac{d\Delta r_{j,i}(0)}{dt} = \frac{d\Delta r_{j,i-1}(\Delta t)}{dt}, \quad (3)$$

где Δt – шаг по времени.

В качестве внешней нагрузки рассмотрена постоянная сила. При таком внешнем нагружении решения в начале имеют переходной процесс, а потом выходят на стационарное решение, при котором сила, действующая вдоль всех сечений постоянна, а атомы располагаются на одинаковых расстояниях друг от друга. Качественный характер решений можно оценить по рис. 2.

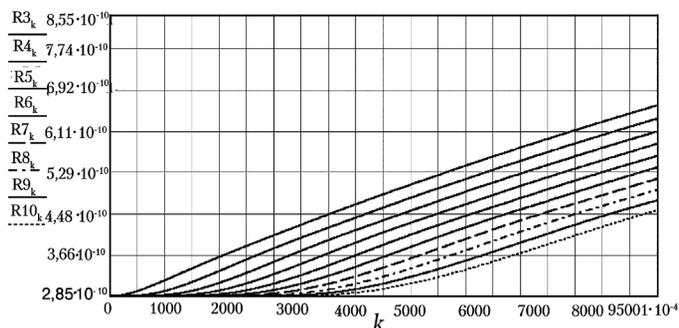


Рис. 2. Характер распространения продольных возмущений в твердом теле

При численных расчетах была получена скорость распространения возмущений вдоль цепочки сечений, равная 3300 м/с (возмущение считалось достаточным, если смещение атома от положения равновесия достигало 0,5 % от равновесного значения). Данное значение по порядку

величины хорошо соответствует скорости распространения продольных волн в алюминии, что говорит о подтверждении возможности использования параметров межатомного потенциала для моделирования скорости звука в твердом теле. Однако, полученная величина скорости отличается от точного значения 5200 м/с в 1,5 раза, что свидетельствует о необходимости уточнения данной модели.

Для улучшения показателей полученной модели необходимо:

- уточнить вид и параметры потенциала взаимодействия атомов вещества;

- исследовать поведение коэффициента затухания β , который существенным образом влияет на характер переходных процессов и получаемые числовые результаты (в рассмотренных расчетах значение β принималось постоянным, хотя фактически оно является функцией расстояния между атомами).

В дальнейшей работе планируется исследование скорости распространения поперечных колебаний, а также выполнение моделирования для широкого спектра твердых тел (в том числе с другими видами решеток). Полученные результаты практически можно применять и при моделировании процессов деформации [6].

В качестве вывода можно отметить, что возможность моделирования скорости распространения продольных колебаний в твердом теле на основе задания межатомного потенциала взаимодействия является обоснованной и приводит к результатам, согласующимся с известными опытными данными.



ЛИТЕРАТУРА

1. Голубев В. К., Селезнев А. А. Использование двухчастичных потенциалов взаимодействия для молекулярно-динамического расчета изотермического, адиабатического и ударно-волнового сжатия металлов // Химическая физика. – 2002. – Т. 21, № 10. – С. 61.
2. Мочалов А. А., Евфимко К. Д. Исследование влияния высокого давления на макроскопические параметры вещества // Вісник СумДУ – 2008. – № 1. – С. 156-160
3. Кривцов А. М., Кривцова Н. В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // Дальневосточный математический журнал ДВО РАН – 2002. – Т. 3, № 2. – С. 254-276.
4. Пью Х. Л. Механические свойства материалов под высоким давлением. – М.: Мир, 1973. – 374 с.
5. Афанасьев Г. Д., Беликов Б. П., Волярович М. П. Справочник физических констант горных пород. – М.: Мир, 1969. – 544 с.
6. Мочалов А. А., Гайша А. А., Евфимко К. Д. Динамика деформации структурной единицы твердого тела от внешнего воздействия // Журнал нано- та електронної фізики. – 2009. – Т. 1, №1. – С. 70-79

МОЧАЛОВ О. О., Евфимко К. Д., Гайша А. А. Моделювання процесу розповсюдження подовжніх коливань в твердому тілі на основі завдання міжатомного потенціалу взаємодії.

Представлена математична модель процесу розповсюдження подовжених коливань в твердому тілі на основі завдання міжатомного потенціалу взаємодії. Наведено якісні результати моделювання.

Ключові слова: коефіцієнт жорсткості зв'язку, деформація, математична модель.

Mochalov A., Evfimko K., Gaisha A. The solid longitudinal vibrations distribution process modeling on the basis of diatomic potential.

The mathematical model of process of distribution of longitudinal vibrations in a solid on the basis of task of diatomic potential is represented. The results of modeling are presented.

Keywords: solid, diatomic potential, longitudinal vibrations, mathematical model.