

Уравнение Ми-Грюнайзена

Выполнила: Пятницкая Д., гр 30510
Научный руководитель: Кузькин В. А.

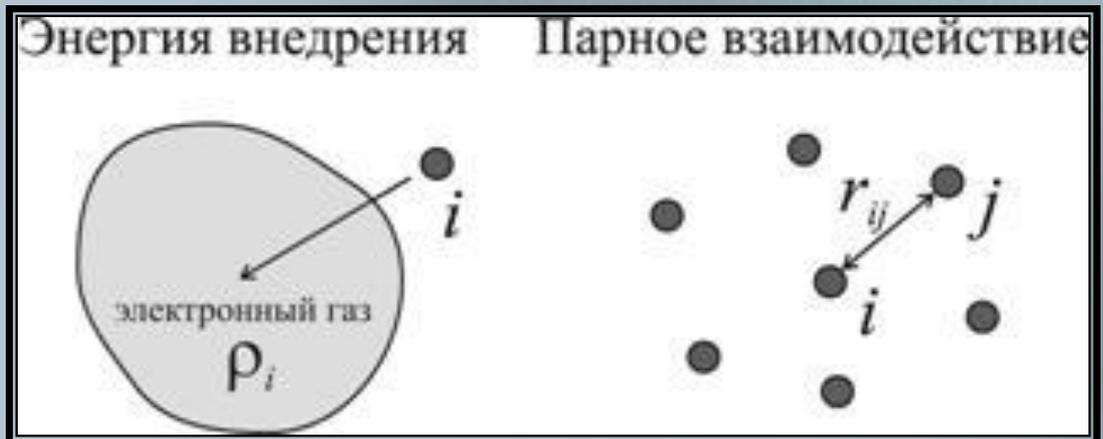
Постановка задачи

- Дан идеальный бесконечный монокристалл в пространстве размерности 1, 2, 3. Кристалл имеет простую структуру. Взаимодействие атомов описывается посредством потенциала погруженного атома EAM

Потенциал погруженного атома

$$U = U^{em} + U^{pair} = \sum_i F_i(\rho_i) + \sum_i \sum_{i < j} \phi_{i,j}(r_{i,j})$$

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \rho_j(r_{i,j})$$



Уравнение Ми-Грюнайзена

Определяет связь между давлением и объемом твердого тела при данной температуре.

$$p = p(V, E_T) = p_0(V) + \Gamma(V) E_T / V$$

p_0 - холодное давление

Γ - функция Грюнайзена

E_T - тепловая энергия

Сила межатомного взаимодействия

$$\begin{aligned} F_i &= -\frac{\partial}{\partial r_i} \sum_k U_k = -\sum_k \frac{\partial U_k}{\partial r_i} = -\sum_k \frac{\partial U_k (\sum_{j \neq k} \rho_{jk})}{\partial r_i} = \\ &= -\sum_{j \neq i} (U_i' \frac{\partial \rho_{ij}}{\partial r_i} + U_j' \frac{\partial \rho_{ji}}{\partial r_i}) \\ F_i &= -\sum_{j \neq i} (U_i' + U_j') \rho_{ij}' e_{ij} \end{aligned}$$

Тензор напряжений

$$\sigma = \frac{1}{2V} \sum_{\alpha} \langle \underline{A}_{\alpha} \rangle \langle (U_0' + U_{\alpha}') \rangle \rho' \langle \underline{A}_{\alpha} + \underline{\overset{\boxtimes}{A}}_{\alpha} \rangle$$

$$\underline{\underline{G}} = \underline{\underline{G}}_0 + \underline{\underline{G}}_1 \Lambda^2$$

$$U = U_0 + \underline{\underline{U}}_1 \Lambda^2$$