Расчет давления и атомных напряжений в МД

Давление в МД. Теорема вириала   1

$$G = \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i^{tot}$$

$\vec{F}_i^{tot}$ - полная сила на частицу i

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

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

0

Давление в МД. Теорема вириала 2

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

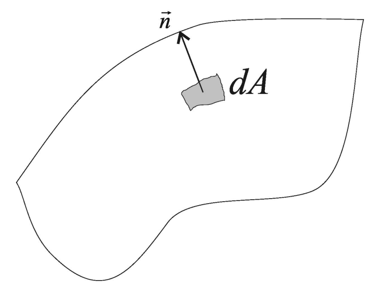
$$= \left| \quad \left\langle m\left|\frac{d\vec{r}_i(t)}{dt}\right|^2 \right\rangle = 3k_B T \quad \right| = -3Nk_B T$$

Давление в МД. Теорема вириала 3

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

$$< \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i^{tot} > = < \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i > + < \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i^{ext} >$$

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



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

$$-3PV + < \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i > = -3Nk_BT$$

Давление в МД. Теорема вириала 4

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

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

Упругие деформации и напряжения

$$\vec{u}(\vec{r}) = \vec{r}\,' - \vec{r}$$ - поле упругих смещений

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

$$\sigma^{\gamma\delta} = c_{\gamma\delta\alpha\beta}\,\varepsilon^{\alpha\beta}$$ - 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

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

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

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

Атомные напряжения для парных потенциалов

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

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

$$\sigma_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{2V_i}\sum_{i\neq j}\frac{\partial\varphi(r_{ij})}{\partial r_{ij}^{\beta}}\bigg|_{r_{ij}} r_{ij}^{\alpha} = \frac{1}{2V_i}\sum_{i\neq j}\frac{\partial\varphi(r_{ij})}{\partial r_{ij}}\frac{\partial r_{ij}}{\partial r_{ij}^{\beta}} r_{ij}^{\alpha} =$$

$$= \left| \frac{\partial r_{ij}}{\partial r_{ij}^{\beta}} = \frac{r_{ij}^{\beta}}{r_{ij}} \right| = \frac{1}{2V_i}\sum_{i\neq j}\frac{d\varphi(r_{ij})}{dr_{ij}}\frac{r_{ij}^{\alpha} r_{ij}^{\beta}}{r_{ij}}$$

Примеры расчета атомных напряжений. Напряжения в нанокристалле