

**Моделирование свойств
металлов и сплавов. Метод
молекулярной динамики**

Дисциплина по выбору профиля

**“Физика конденсированного
состояния”**

По кафедре ФТН

Распределение занятий

- Лекции 16 ч.
 - Лабораторные занятия 48 ч.
 - Практические занятия 16 ч.
 - Отчетность экзамен
-
- Требования к студенту: освоение теоретического курса + выполнение 6 лабораторных работ

Литература

- Назаров А.А., Мулюков Р.Р. Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии. Уфа, БашГУ, 2010.
- Ремеев И.С. Математическое моделирование физических процессов. – Уфа: БашГУ, 2010.
- Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике (в 2-х томах). М.: Мир, 1990.
- Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н., Назаров Ю.Ф. Основы компьютерного моделирования наносистем: Учебное пособие. СПб: Лань, 2010. 384 с.
- Мансури Г.А. Принципы нанотехнологии. Исследование конденсированных веществ малых систем на молекулярном уровне. М.: Мир, 2008.

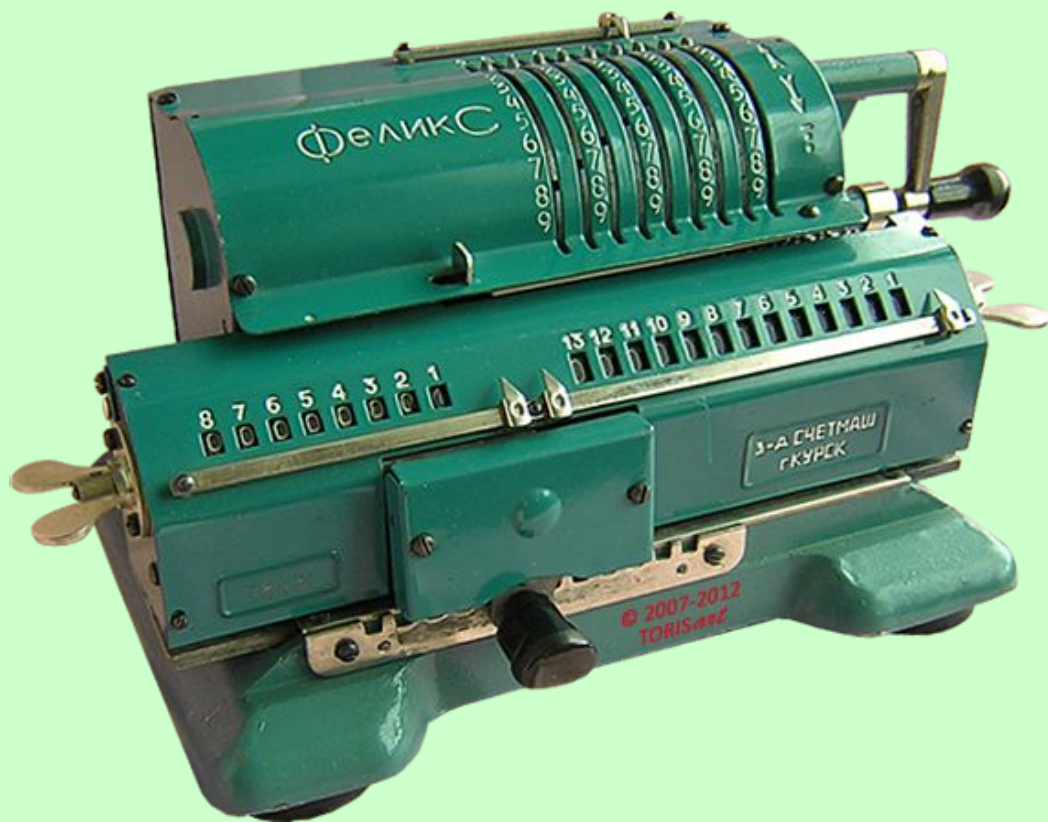
Необходимость компьютерного моделирования в физике

Число задач физики, имеющих точное аналитическое решение, крайне ограничено:

- *Уравнения движения 1, 2 тел.* Задача 3 тел уже не решается аналитически.
- *Уравнение Шредингера для атома водорода.* Задача не решается точно уже для атома гелия.
- ...

Во всех остальных случаях возможно только численное решение с помощью компьютеров. Точность, скорость и широта применения численных методов растет с ростом возможностей вычислительных средств.

Механические вычислительные устройства: счеты и арифмометр



Арифмометр «Феликс» выпускался в Москве, Пензе, а также заводом «Счетмаш» в Курске в 1929-1978 гг. С помощью этого устройства десятками счетчиц под руководством акад. А.А. Самарского проводились параллельные расчеты взрыва водородной бомбы. В музее РФЯЦ-ВНИИЭФ (г. Саров) выставлена экспозиция этих арифмометров.

Один из первых компьютеров: IBM-701



Процессор IBM-701 имел производительность менее 10 кфлопс. Накопитель IBM на магнитной ленте имел емкость 8 млн. байт. Год выпуска – 1952. Количество выпущенных компьютеров – 19701. Стоимость пользования – 16 тыс. долл. в месяц

Флопс – число операций с плавающей запятой в секунду
FLOPS=FLoating-point Operations Per Second

Приставки в системе СИ

Десятичный множитель	Приставка		Обозначение	
	русская	международная	русское	международное
10^1	дека	deca	да	da
10^2	гекто	hecto	г	h
10^3	кило	kilo	к	k
10^6	мега	mega	М	M
10^9	гига	giga	Г	G
10^{12}	тера	tera	Т	T
10^{15}	пета	peta	П	P
10^{18}	экса	exa	Э	E
10^{21}	зетта	zetta	З	Z
10^{24}	иотта	yotta	И	Y

Современные суперкомпьютеры



Суперкомпьютер МГУ «Ломоносов» имеет производительность в 1,3 петафлопс, состоит из сотен тысяч процессоров, потребляет мегаватты электроэнергии, занимают большой залы. Планируется создание суперкомпьютера производительностью 10 пфлопс. От производителя к потребителю суперкомпьютеры перевозят десятками фургонов. С их помощью выполняются крупномасштабные расчеты, имеющие большое фундаментальное и практическое значение.

1 пфлопс = 10^{15} флопс (операций с плавающей запятой в секунду)
FLOPS=FLoating-point Operations Per Second

Самые быстрые суперкомпьютеры мира



На сайте <http://top500.org> есть обновляющийся список наиболее производительных суперкомпьютеров мира. Первое место на ноябрь 2015 г. держала система Tianhe-2 (Млечный путь – 2) с пиковой производительностью более 50 пфлопс. Верхние строчки списка занимают также суперкомпьютеры в нац. лабораториях США (10-27 пфлопс). В 2018 г. в США намерены создать суперкомпьютер Aurora на 180 пфлопс.

Суперкомпьютеры жизненно важны для экономики, безопасности, научного развития стран, а также для демонстрации их технологического превосходства.

Эксафлопс суперкомпьютеры



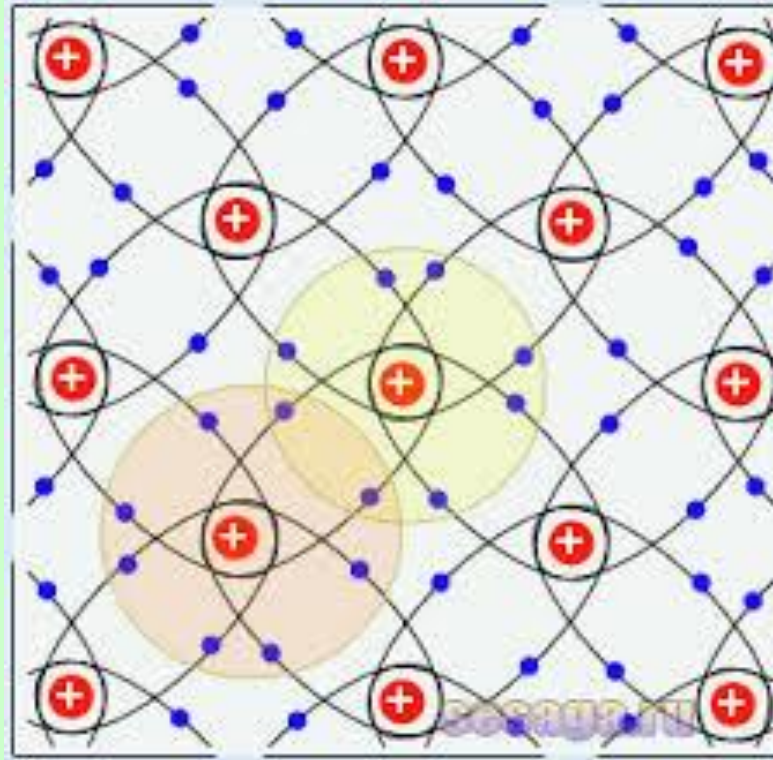
В Китае в 2017 г. планируют запустить первый прототип суперкомпьютера мощностью 1 экзафлопс. Для сравнения, в 2010 г. был запущен суперкомпьютер Tianhe мощностью в 1000 раз меньшей – 1 петафлопс.

Знания, умения, навыки, необходимые для компьютерного моделирования

- Знание физических законов и уравнений, описывающих моделируемое явление
- Знание численных методов решения математических задач
- Умение составлять алгоритм численного решения математических задач
- Умение программировать на языке высокого уровня (C, Fortran, Pascal, Basic etc.)

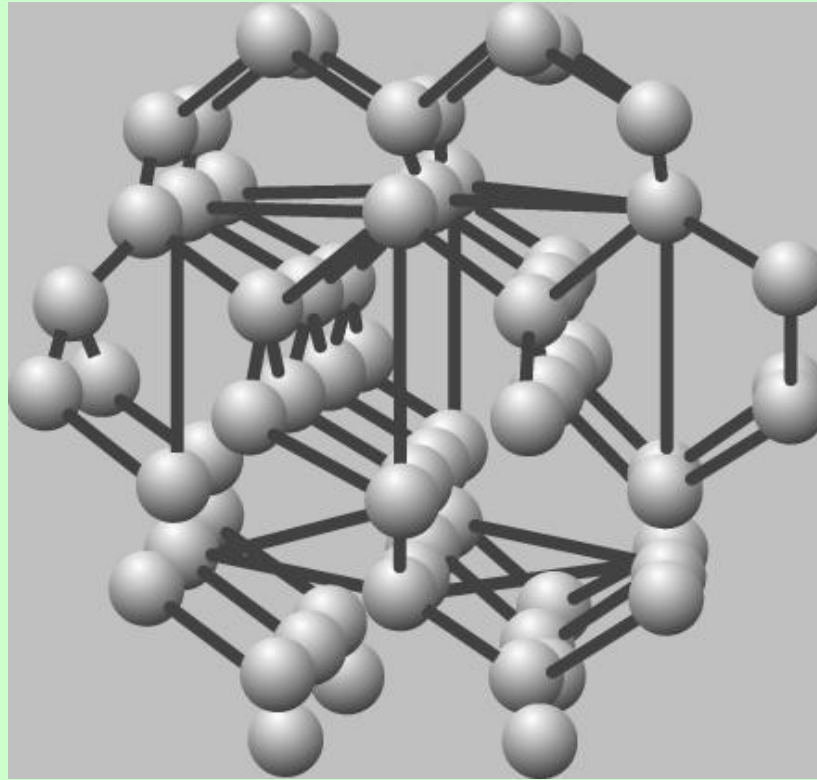
Многоуровневый характер структуры твёрдого тела

Электронная структура твердого тела: электроны и ядра



В наиболее точном описании твердое тело состоит из ядер и электронов, часть из которых определенным образом обобществлена (участвует в установлении связей между атомами). Энергетический спектр тела определяется взаимодействием и движением этих частиц

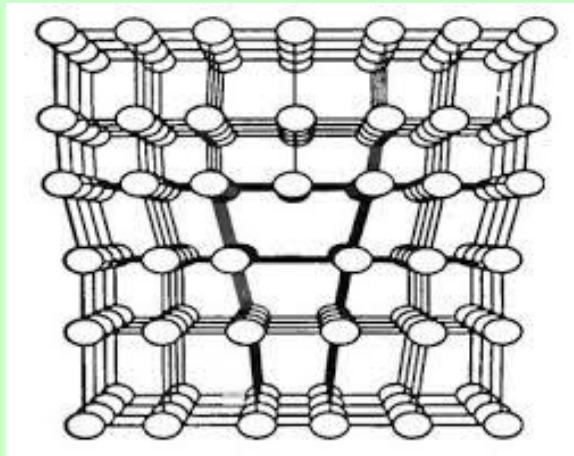
Атомная структура твердого тела



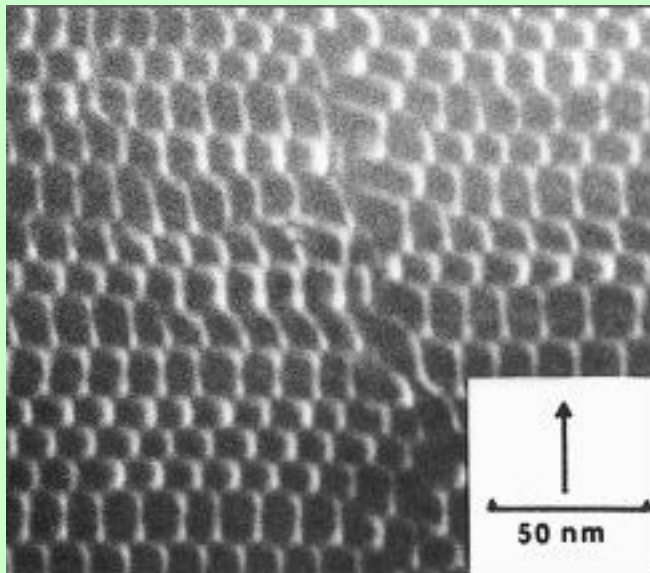
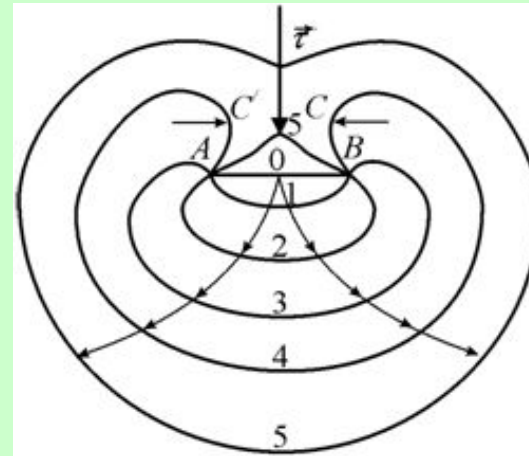
В приближенном описании твердое тело можно рассматривать как совокупность атомов, взаимодействие которых описывается потенциалом межатомного взаимодействия

Дефектная структура твердого тела

Атомное строение
краевой дислокации



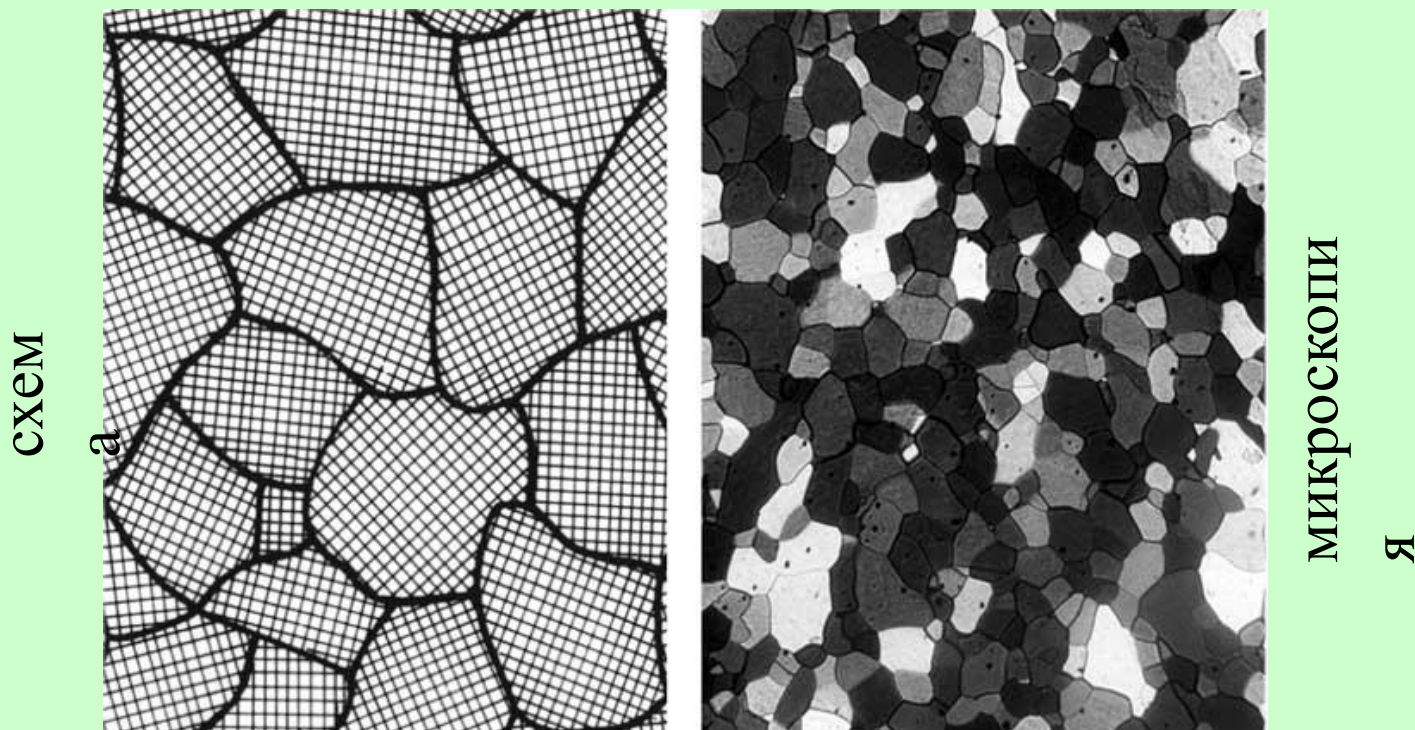
Дислокации как самостоятельный объект
Источник дислокаций



Дефекты кристаллического строения, например, дислокации могут быть рассмотрены как самостоятельные объекты.

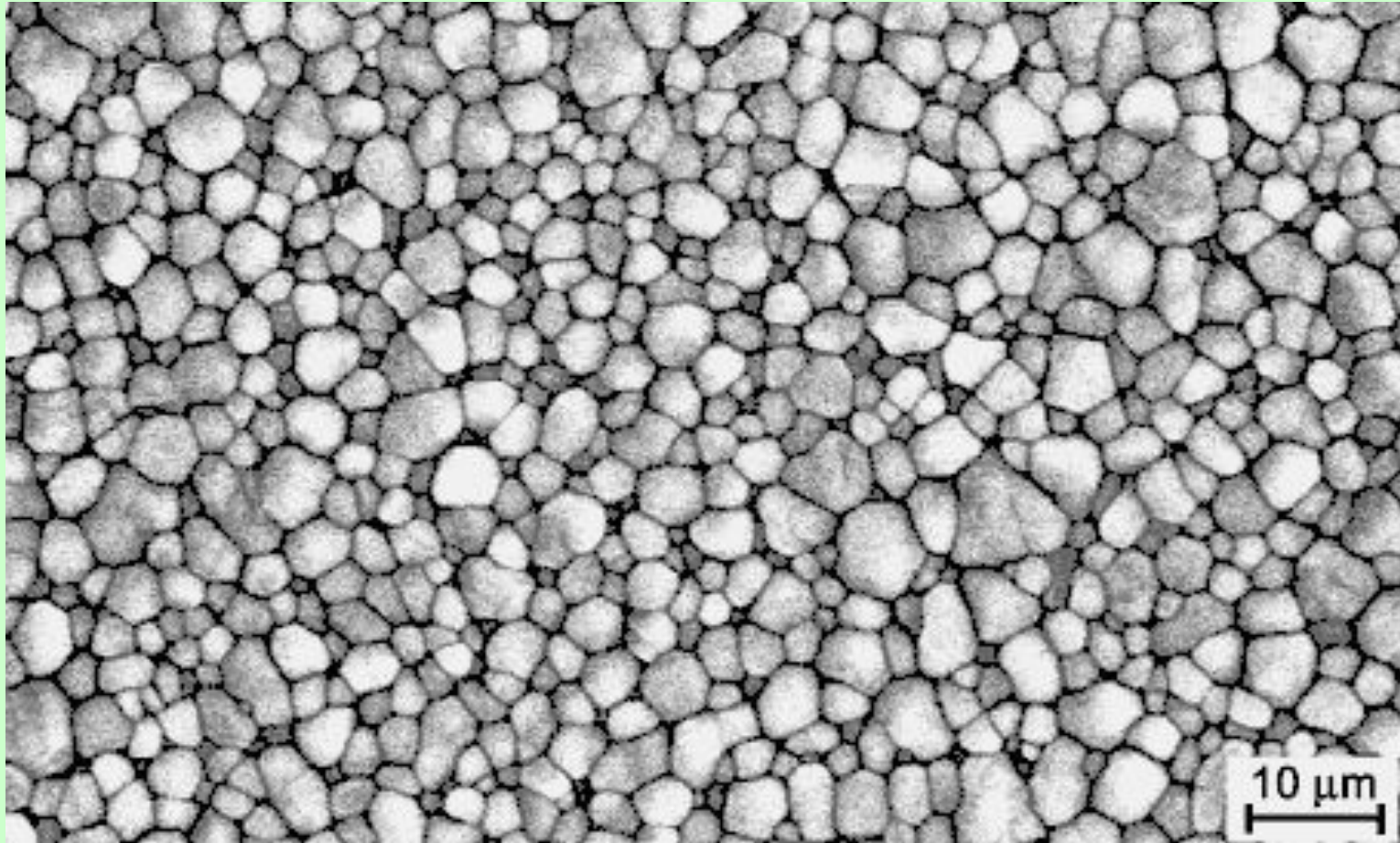
Дислокации образуются под действием внешнего напряжения, движутся, взаимодействуют между собой, пересекаются, группируются, образуя скопления, стенки, большеугловые границы зерен и формируя таким образом микроструктуру материалов

Микроструктура (зеренная структура) твердого тела



Большинство используемых материалов состоит из зерен (кристаллитов). Каждый кристаллит имеет свою пространственную ориентацию кристаллической решетки, так что соседние зерна имеют разную ориентацию и разделены границами зерен. Свойства поликристалла определяются свойствами самих кристаллитов и границ зерен. Под внешним воздействием, ввиду анизотропии кристаллов, зерна деформируются по-разному, на их границах возникают несовместности деформации.

Зеренная структура поликристалла: еще один экспериментальный пример



Микроструктура поликристаллического тетрагонального оксида циркония

Структура твердотельных конструкций: макроскопические элементы



Нога Эйфелевой башни



«Покосившийся мост» в Голландии (огибающая мост конструкция сделана намеренно покосившейся, сам мост идеально ровный)

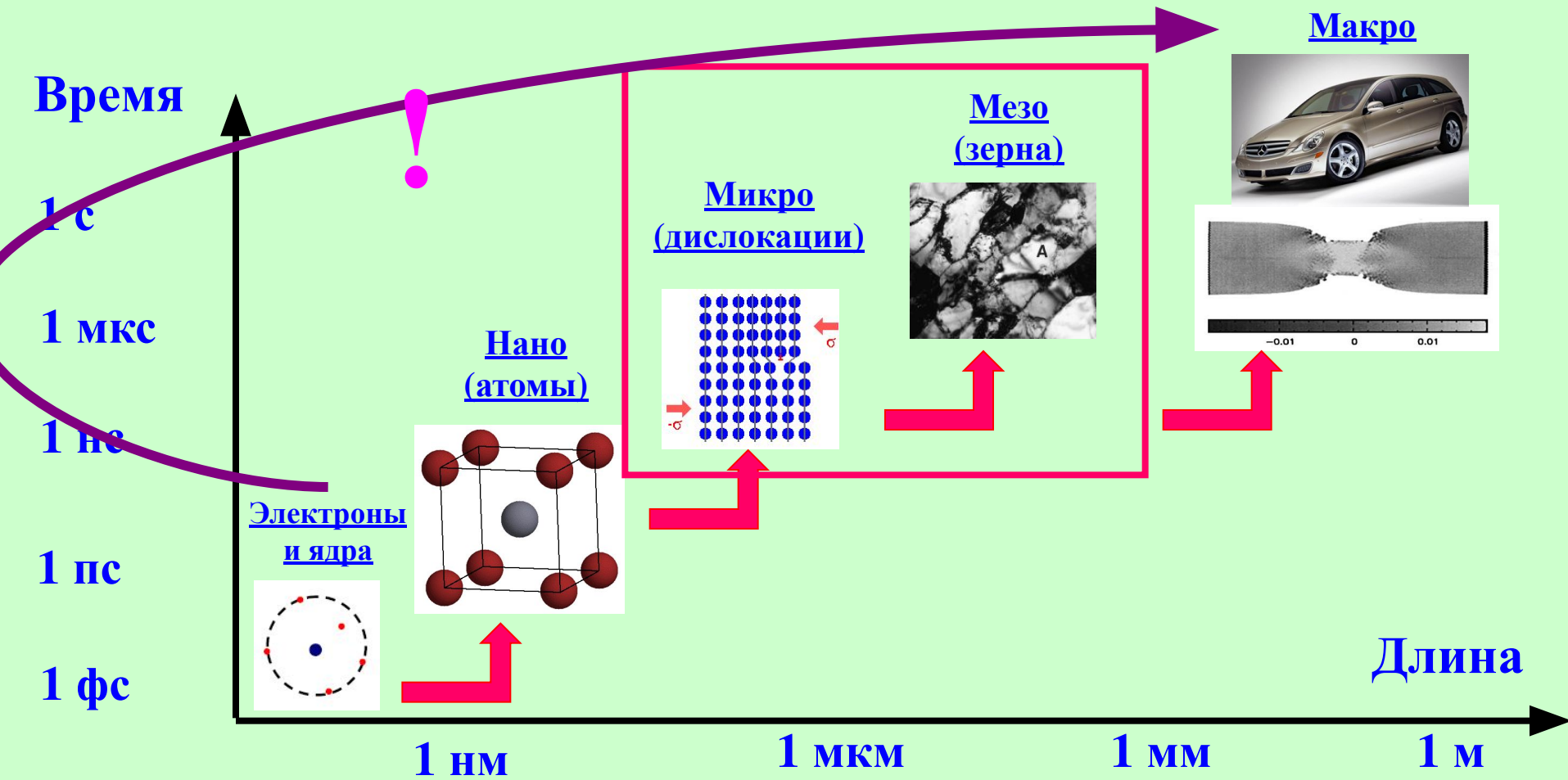
При расчетах машин, строительных конструкций твердое тело рассматривается как сплошная среда с данными характеристиками, в качестве элементарных составляющих конструкций рассматриваются макроскопические элементы, имеющие масштаб, меньший характерных масштабов неоднородности. Однако свойства материала определяются его внутренним строением.

Необходимость компьютерного моделирования в физике конденсированных сред

1. Сложность структуры реальных кристаллических материалов, наличие дефектов: вакансий, дислокаций, дисклинаций, границ зерен. Многообразие пространственных масштабов структуры, определяющих свойства материалов: электронный, атомный, дислокационный, зеренный, макромасштаб.
2. Протекание процессов с характерными временами в области от 1 пс до нескольких лет: от периода колебания решетки до характерных времен диффузии, накопления радиационных повреждений при облучении
3. В конечном итоге все свойства материалов определяются процессами, происходящими на атомном уровне, изучение которых невозможно аналитическими методами

**Общая характеристика методов
моделирования в физике
материалов**

Пространственно-временная иерархия структур и процессов в твердых телах

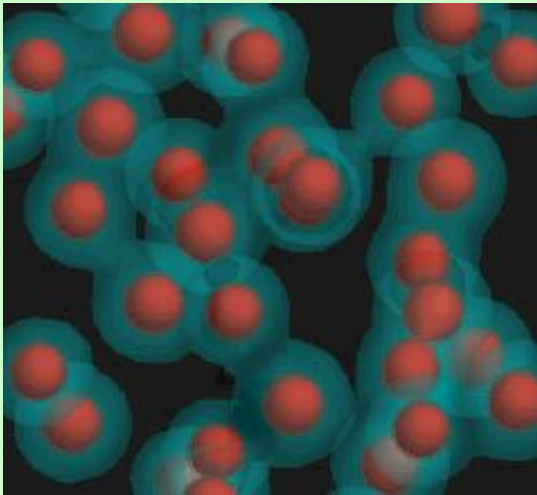


Иерархия методов моделирования



Фундаментальная основа моделирования из первых принципов

Уравнение Шредингера для системы атомов



$$H\Psi(\overset{\sqcup}{R}_i, \overset{\boxtimes}{r}_\alpha) = E\Psi(\overset{\sqcup}{R}_i, \overset{\boxtimes}{r}_\alpha),$$
$$i = 1, 2, \dots, N \sim 10^{23}; \quad \alpha = 1, 2, \dots, N, \dots$$

$$H = \sum_i \frac{P_i^2}{2M_i} + \sum_\alpha \frac{p_\alpha^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{Z_i Z_j e^2}{|\overset{\boxtimes}{R}_i - \overset{\boxtimes}{R}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \frac{e^2}{|\overset{\boxtimes}{r}_\alpha - \overset{\boxtimes}{r}_\beta|} - \sum_{i\alpha} \frac{Z_i e^2}{|\overset{\boxtimes}{R}_i - \overset{\boxtimes}{r}_\alpha|}$$

Принципиально неразрешимая задача для макроскопических систем

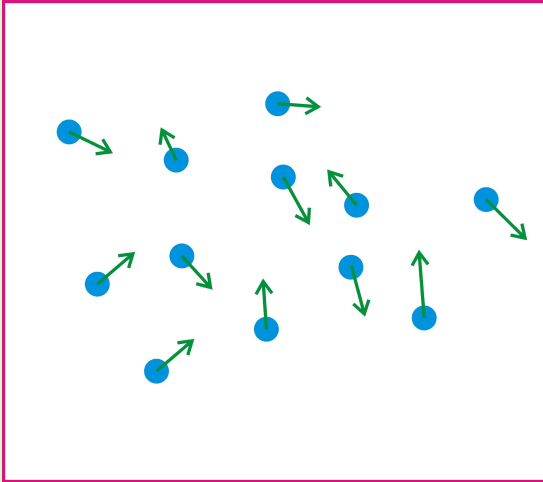
Фундаментальная основа классической молекулярной динамики

II закон Ньютона:

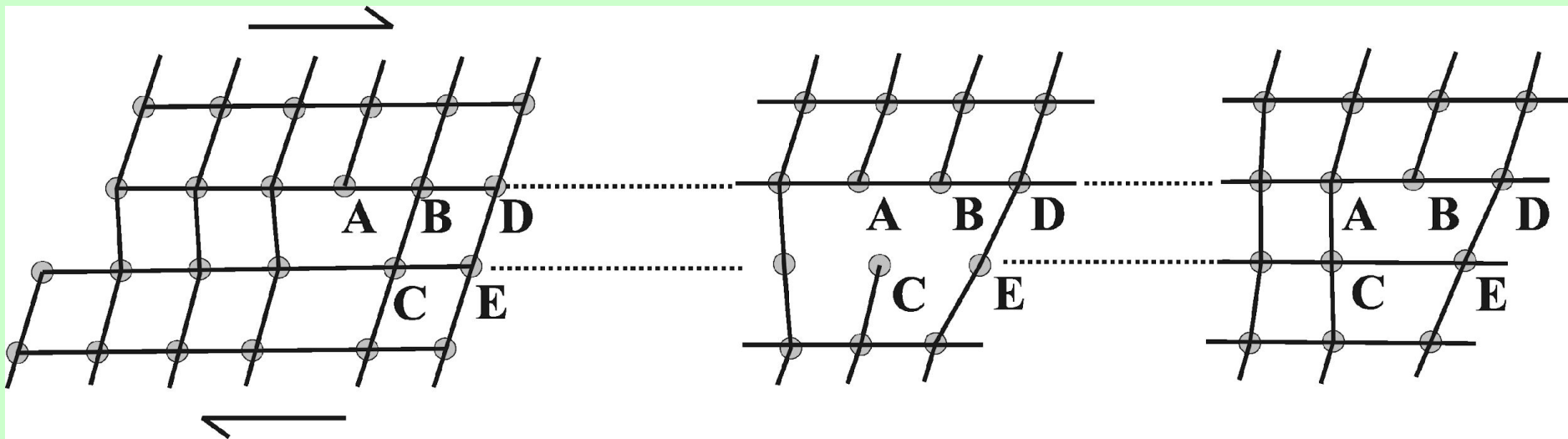
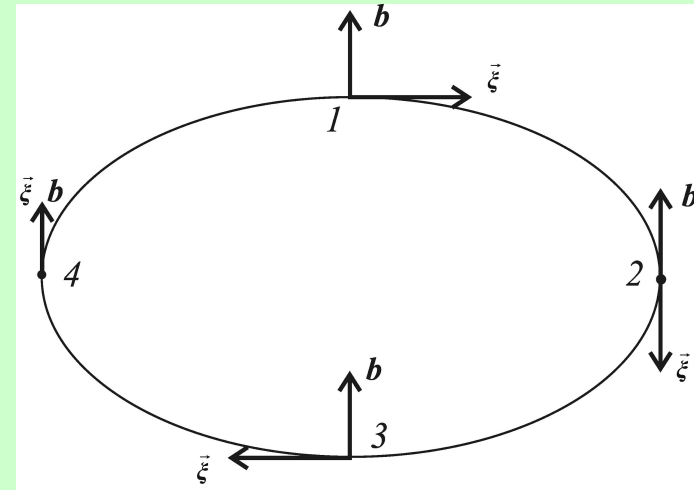
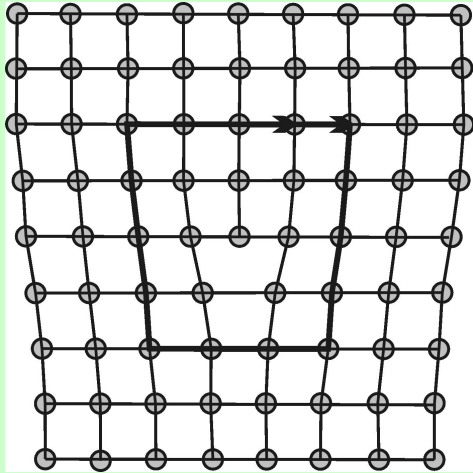
$$m_i \ddot{a}_i = F_i = - \frac{\partial U(\overset{\vee}{r}_1, \overset{\vee}{r}_2, \dots, \overset{\vee}{r}_N)}{\partial \overset{\vee}{r}_i} \quad (i = 1, 2, \dots, N)$$

Потенциальная энергия системы атомов:

$$U(\overset{\vee}{r}_1, \overset{\vee}{r}_2, \dots, \overset{\vee}{r}_N) = \sum_{i=1}^N E_i(\overset{\vee}{r}_1, \overset{\vee}{r}_2, \dots, \overset{\vee}{r}_N)$$

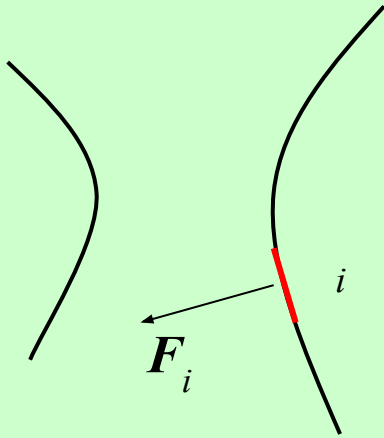


Дислокации как переносчики пластической деформации кристаллов



Фундаментальная основа дислокационного моделирования: дискретная дислокационная динамика (ДДД)

Трёхмерный случай (3D-ДДД)



Сила, действующая на сегмент:

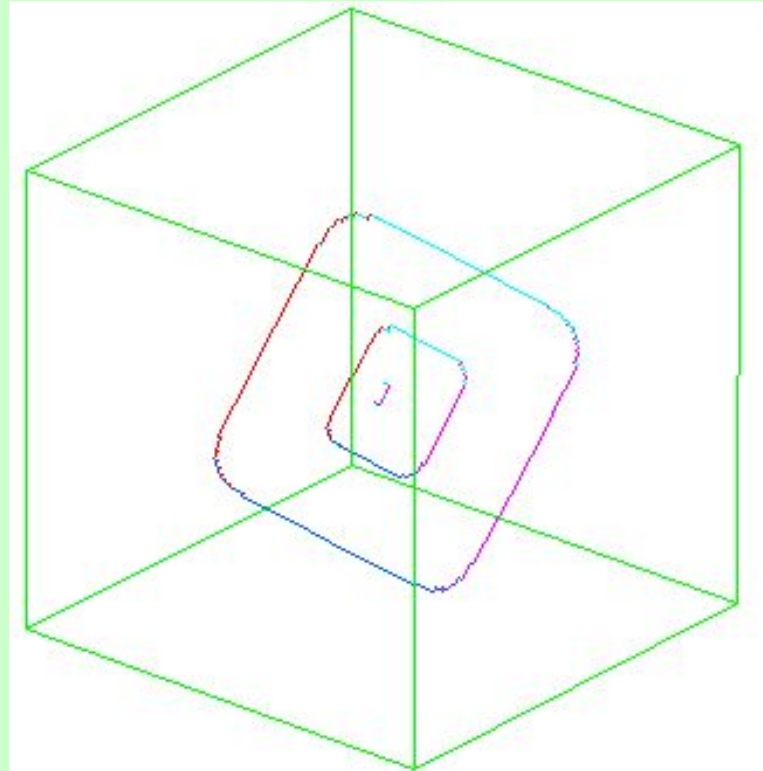
$$\mathbf{F}_i = \left(\left(\sum_{j=1, j \neq i}^N \sigma_j + \sigma_{\text{app}} \right) \cdot \mathbf{b}_i \right) \times \mathbf{t}_i$$

Скорость движения сегмента:

$$\mathbf{v}_i = \frac{1}{B} \mathbf{F}_i$$

Проблемы: 1) Дальнодействующий характер взаимодействия; 2) Быстрое размножение дислокаций; 3) Линейный характер дефектов

Работа источника Франка-Рида в монокристалле в 3D-ДДД



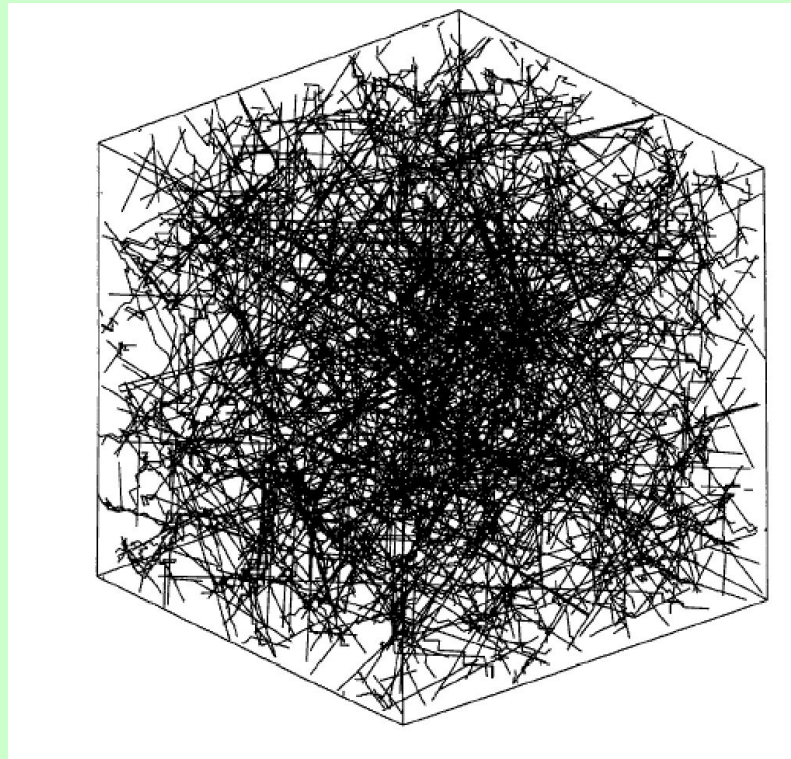
Пример результата моделирования в 3D-ДДД – работа источника дислокаций в расчетной ячейке в виде куба. Задан исходный отрезок дислокации в центре куба. Действует сдвиговое напряжение в плоскости скольжения дислокации

Результат 3D-ДДД моделирования

М.С. Fivel, Model. Simul. Mater. Sci. Eng. 1996

Степень деформации около 0,2 %; плотность дислокаций $2 \times 10^{12} \text{ м}^{-2}$

<http://www.gpm2.inpg.fr/axes/plast/microplast/ddd>



Плотность дислокаций и объем расчетов резко возрастает со степенью деформации (со временем). 3D дислокационная динамика пока не в состоянии дать полезную информацию о механизмах эволюции субструктуры при больших степенях деформации

Двумерное дислокационное моделирование

В.Н. Перевезенцев, Г.Ф.Сарафанов, Письма в ЖТФ, 2007, 33(9) 87

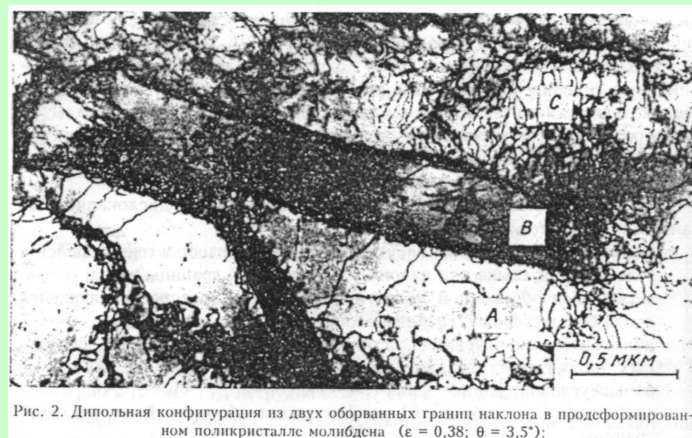
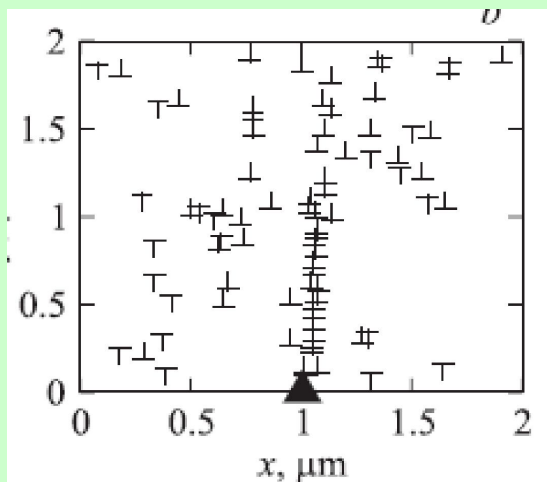
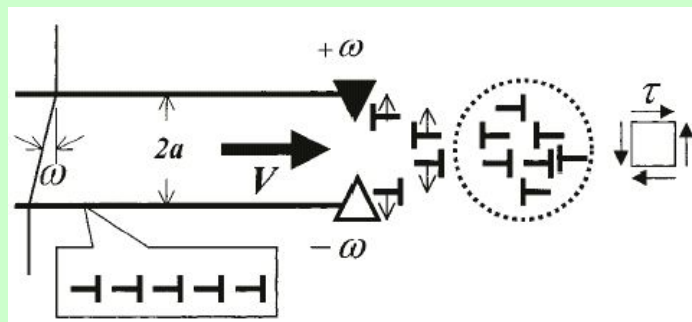
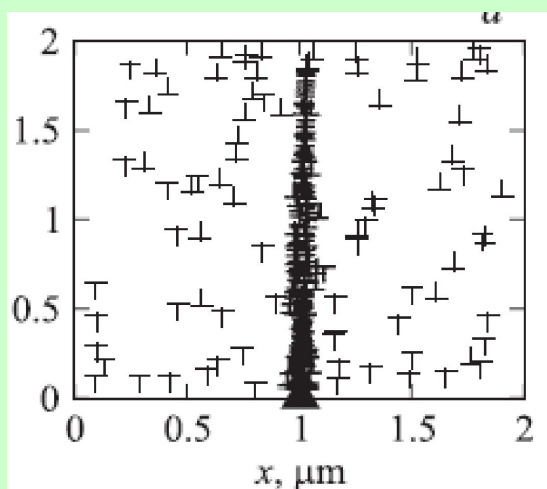


Рис. 2. Дипольная конфигурация из двух оборванных границ наклона в продеформированном поликристалле молибдена ($\epsilon = 0,38$; $\theta = 3,5^\circ$):

В.В. Рыбин, 1987



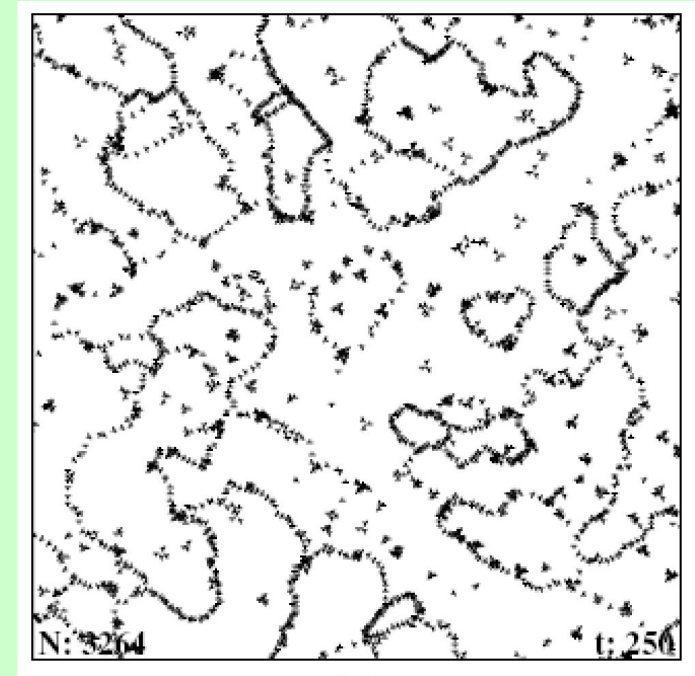
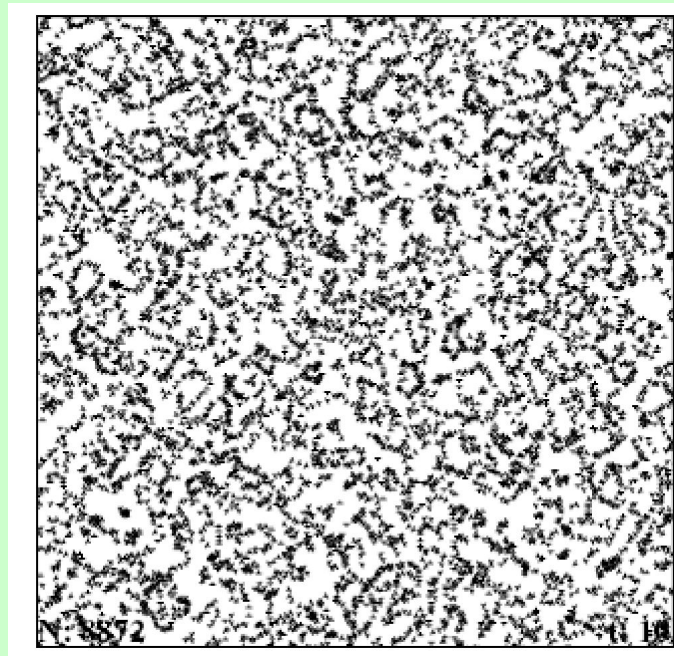
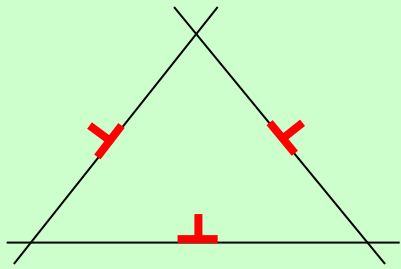
В.И. Владимиров, А.Е. Романов, 1987

В поле напряжений дисклинации дислокации выстраиваются в стенку, «достраивая» границу наклона, обрывающуюся на дисклинации. Хорошее согласие с экспериментом (В.В. Рыбин) и подтверждение качественной модели В.И. Владимирова и А.Е. Романова

Недостаток: рассматривается только одна система скольжения

2D-ДДД с тремя системами скольжения: моделирование отжига

В. Вакс, И. Грома и др., *Comp. Mat. Sci.* 2006



Исходное распределение дислокаций трех систем скольжения – хаотическое. Дислокациям разрешено скольжение и переползание. С течением времени в системе происходит самопроизвольная перестройка в упорядоченную ячеистую структуру под действием сил взаимодействия дислокаций (полигонизация)

Мезоскопическое (микромеханическое) моделирование crystal plasticity modeling)

1. Деформация кристалла происходит путем сдвига по определенным плоскостям скольжения и в определенных направлениях (для г.ц.к. — это $\{111\}\langle 110\rangle$. Дислокационная природа сдвига не рассматривается.
2. Кинетика деформации задается выражением:

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \gamma_0 \sum_s m_{ij}^s \left[\frac{m_{kl}^s \sigma_{kl}}{\tau^s} \right]^n$$

σ_{kl} Компоненты тензора напряжений

$\dot{\epsilon}_{ij}$ Компоненты тензора скоростей деформации

m_{ij}^s Компоненты тензора Шмидта

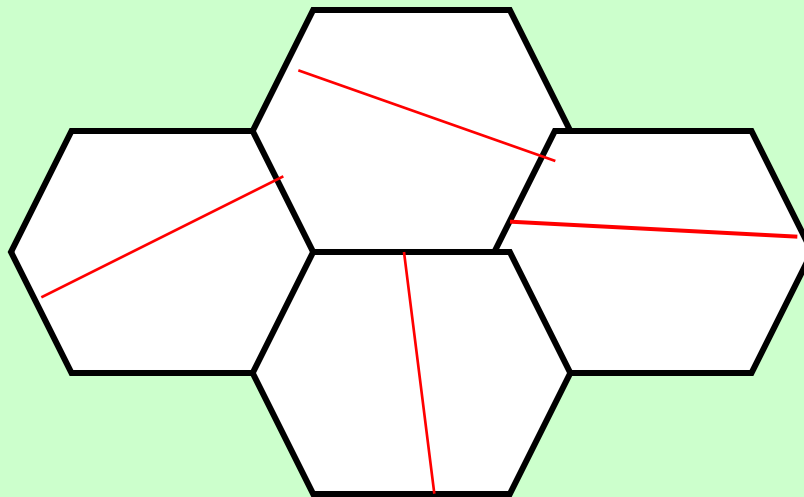
τ^s Пороговое напряжение сдвига по системе s

γ_0 Нормирующий множитель

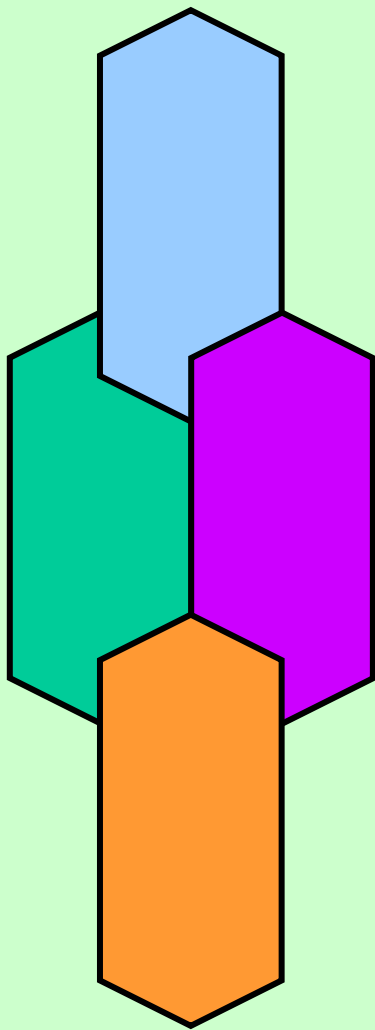
$n \gg 1$

Примеры микромеханических моделей деформации поликристаллов

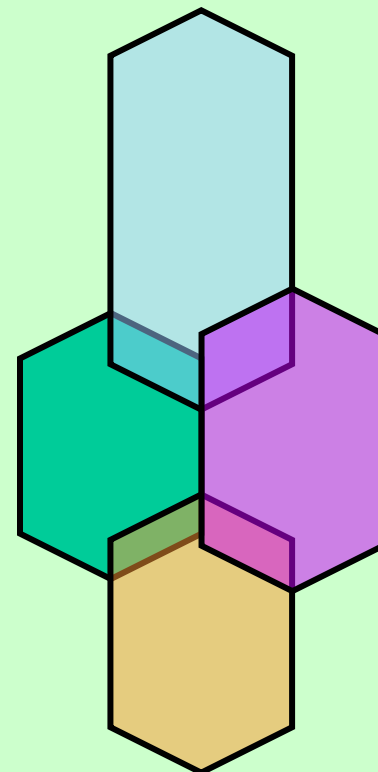
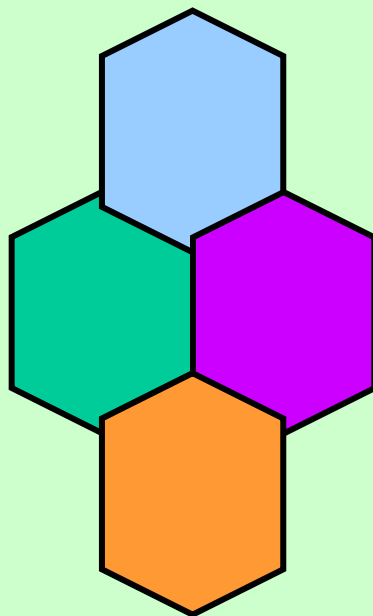
- Модель Закса
- Модель Тейлора
- Модель самосогласованной вязкопластичности ССВП (viscoplastic self-consistent, VPSC, model)



Модель Тейлора

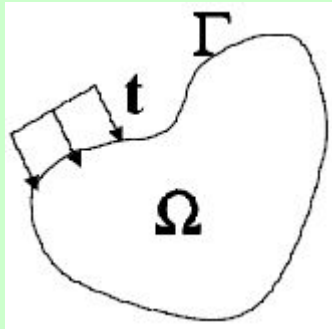


Модель Закса



Макромеханическое моделирование

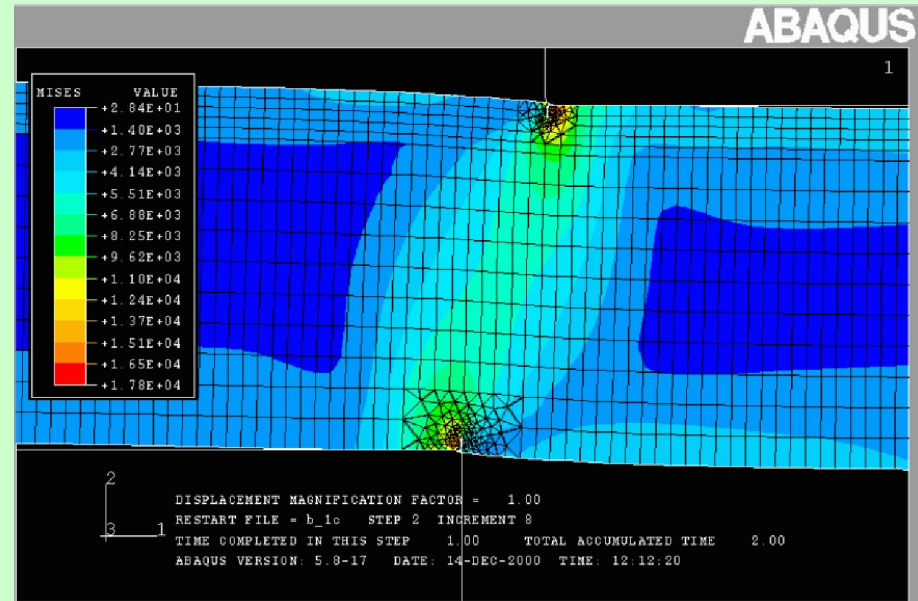
Уравнения равновесия
упругодеформированного тела



$$\sigma_{ij,j} = 0 \text{ на } \Omega$$

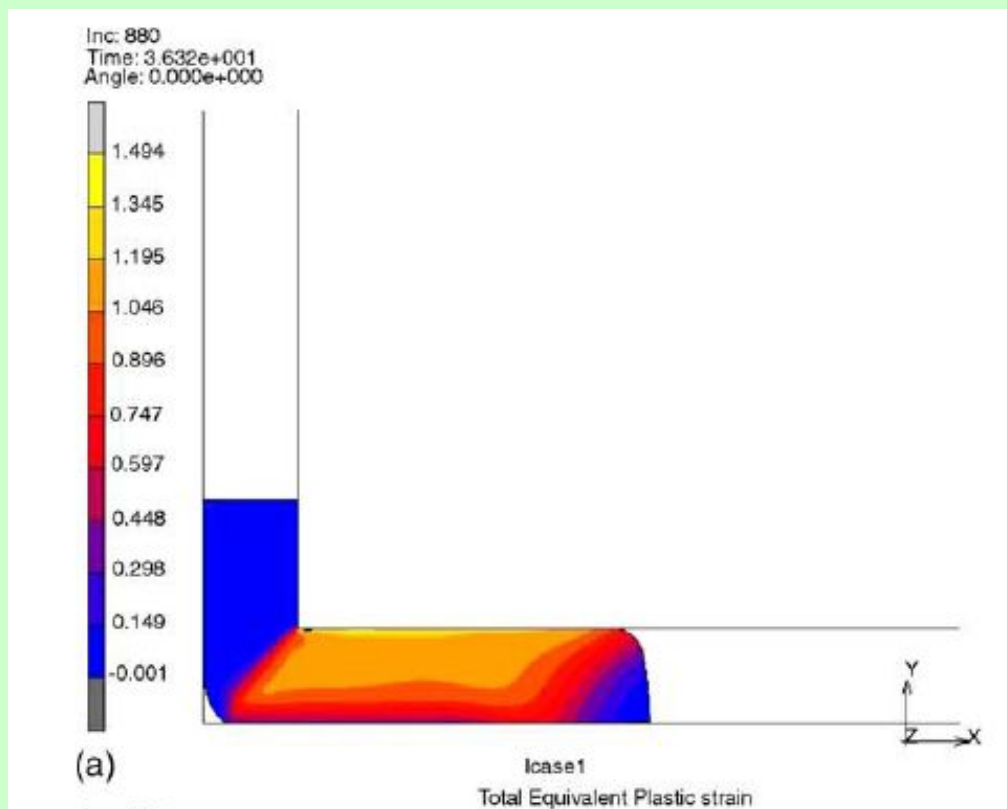
$$\sigma_{ij}n_j = t_i \text{ на } \Gamma$$

Метод конечных элементов



Макромеханическое моделирование РКУП

W.J. Zhao, H. Ding, Y.P. Ren, S.M. Hao, J. Wang, J.T. Wang,
Materials Science and Engineering A 410–411 (2005) 348–352



Макромеханическое моделирование (например, методом конечных элементов) позволяет определить напряженно-деформированное состояние при той или иной схеме ИПД

Основной предмет нашего курса

Среди методов моделирования одно из важнейших мест занимает и интенсивно развивается метод молекулярной динамики. Метод широко используется в моделировании структуры и поведения дислокаций, границ зерен, нанокристаллов, процессов нанотехнологии.

Поэтому задачей настоящего курса является изучение метода молекулярной динамики применительно к моделированию реальных кристаллических материалов, в том числе наноматериалов.