

УДК 538.911, 536.424.1

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТОЧКИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В МАТЕРИАЛАХ С КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКОЙ С ПОМОЩЬЮ АТОМИСТИЧЕСКОГО ПОДХОДА

И. Ю. Зубко¹, В. И. Кочуров²

¹zoubko@list.ru, ²kvi@dom.raid.ru

ФГБОУ ВПО «Пермский национальный исследовательский политехнический университет» (ПНИПУ)

Поступила в редакцию 21.03.2013

Аннотация. Предложен вычислительно-статистический подход к исследованию теплофизических свойств монокристаллических тел конечных размеров, основанный на совмещении высокопроизводительных вычислительных технологий и статистического анализа для исследования образцов, малое число атомов которых не позволяет применять методы статистической физики. Для учета теплового движения частиц в рамках метода атомарной статики вводится независимая колебательная степень свободы атомов. Тепловые колебания атомов имитируются наложением на систему атомов кристалла случайных смещений с фиксированной амплитудой при равномерном распределении направлений смещений в пространстве. Каждая возмущенная конфигурация «заморожена» для расчета сил межатомного взаимодействия. Получены равновесные кривые зависимости удельной потенциальной энергии образцов с ОЦК и ГЦК кристаллическими решетками, точка пересечения которых соответствует точке фазового перехода.

Ключевые слова: кубическая кристаллическая решетка; метод атомарной статики; физико-механические свойства; высокопроизводительные вычисления.

1. ЗАДАНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ В ДИСКРЕТНОМ ПОДХОДЕ

Одним из способов теоретического исследования термомеханических свойств конденсированных сред является дискретный подход, основанный на прямом моделировании движения частиц, вызванного их взаимодействием и приложенными внешними воздействиями. Наиболее распространенным является метод молекулярной динамики (МД), при использовании которого для каждой частицы (атома или молекулы) численно решаются уравнения движения (уравнения баланса количества движения и момента количества движения), содержащие силы и моменты взаимодействия выбранной частицы со всеми остальными частицами тела или с частицами из некоторой ее окрестности [1, 2]. Силы взаимодействия частиц вводятся с помощью потенциалов межатомного взаимодействия, которые являются ядром дискретных подходов и представляют собой приближенный способ

описания взаимодействия частиц материала, качественно отражающий основные свойства атомов отталкиваться на малых и притягиваться на больших расстояниях. Получаемые количественные результаты зависят от числовых значений параметров потенциалов. Метод МД хорошо работает для тел малых размеров на малых интервалах физического времени. Моделирование поведения бесконечно протяженных тел проводится с использованием периодических граничных условий, при котором область моделирования некоторого конечного размера многократно повторяется за счет трансляции в пространстве. Ограничения на размеры моделируемых объемов накладываются возможностями вычислительной техники и применяемых алгоритмов для численного решения систем дифференциальных уравнений движения частиц. Высокопроизводительные методы «распараллеливания» расчетов на многопроцессорных вычислительных устройствах расширяют границы применимости метода МД при исследовании больших систем.

При определении механических свойств монокристаллов методом молекулярной динамики

для построения равновесных кривых, например, зависимости напряжений от деформаций при исследовании упругого закона материала, требуется подводить к системе атомов механическую энергию. Эта энергия может подводиться либо через задание перемещений граней образца, либо через приложение к граням некоторых сил. Подведенная механическая энергия перераспределяется по образцу одновременно и в энергию деформирования, и в энергию (колебательного) теплового движения атомов. Контролировать процесс распределения энергии невозможно и отделить чисто упругое поведение образца от термоупругого также не представляется возможным. Кроме того, динамические методы позволяют работать с небольшим числом частиц на сравнительно малых временах (наносекунды). Прикладываемые при этом внешние воздействия достигают конечных значений за еще меньшие времена, то есть, по сути, являются примерами высокоскоростных (ударных) нагрузок. Определяемые при таких воздействиях упругие модули являются адиабатическими, существенно превышающими известные в справочной литературе изотермические (статические) упругие модули. Таким образом, при динамическом моделировании после подвода к системе частиц механической энергии необходимо проводить расчеты по переходу системы в равновесное состояние, и затем определять значение требуемого свойства в равновесном состоянии. При этом желательно для каждой точки получаемой зависимости проводить осреднение по достаточной для статистической обработки выборке реализаций рассматриваемой системы частиц. Все это требует огромных затрат вычислительных ресурсов.

При определении континуального понятия напряжения для дискретной системы атомов используется ряд подходов [3, 4-8]. При динамическом моделировании возникает неоднозначность введения напряжений [3-11].

В работе рассматривается подход, основанный на методе атомарной статики, позволяющий провести идентификацию двух параметров потенциала межатомного взаимодействия для монокристаллов с кубической решеткой (ГЦК- и ОЦК-типа) по их макроскопическим свойствам (равновесному межатомному расстоянию и упругому модулю сдвига) [12-14]. В основе подхода лежит рассмотрение статики взаимодействующих частиц при явном задании структуры кристаллической решетки. Возможности подхода были продемонстрированы на примере

использования потенциала Леннард-Джонса. Применение подхода и выбор потенциала взаимодействия обоснованы тем, что при расчете упругих модулей нет необходимости рассматривать такие динамические процессы, в которых важную роль во взаимодействии атомов могут играть квантовые эффекты, учитываемые в потенциалах специального вида. Использование статической постановки позволяет получить аналитическое решение задачи определения равновесного межатомного расстояния для различных кристаллических решеток и образцов различного размера. При этом точные значения межатомного расстояния получаются для объемов материала с небольшим числом атомов n на ребре образца (от 5 до 20). Далее для получения макроскопических значений параметров по этим точным решениям можно сделать предельный переход, устремив число атомов n к бесконечности. В частности, это позволяет идентифицировать параметры потенциала по известным макроскопическим физико-механическим свойствам материалов. Отметим, что упругие модули, получаемые при использовании описанного подхода атомарной статики, соответствуют изотермическим модулям, тогда как динамические расчеты методом молекулярной динамики дают адиабатические значения упругих модулей.

При использовании статического подхода, как правило, принимается, что получаемые значения упругих модулей соответствуют нулевой температуре. В [12-14] не обсуждался вопрос о возможности учета температуры при расчете упругих модулей монокристаллических твердых тел. В данной работе ставится вопрос о способе задания температуры в статическом подходе. При моделировании поведения механических свойств методом молекулярной динамики температура вводится через кинетическую энергию движения атомов относительно среднего движения тела. При стабилизации системы энергия крупномасштабного движения атомов переходит в мелкомасштабные колебания с меньшей амплитудой. Эти мелкомасштабные колебания относительно неменяющихся со временем центров отождествляются с тепловым движением и, при использовании гипотезы о равномерном распределении средней кинетической энергии по степеням свободы системы, температура тела T определяется из выражения $\bar{K} = 3kNT / 2$, где \bar{K} — осредненная кинетическая энергия, k — постоянная Больцмана, N — число частиц. При построении равновесных кривых зависимости фи-

зико-механических свойств исследуемых материалов (например, коэффициента теплового расширения, внутренней энергии, упругих модулей) от температуры при динамическом моделировании после подвода к системе частиц энергии, вызывающей повышение температуры, необходимо проводить расчеты по переходу системы в равновесное состояние, и затем определять значение требуемого свойства в равновесном состоянии. Для каждой точки получаемой зависимости требуется проводить осреднение по достаточной для статистической обработки выборке реализаций рассматриваемой системы частиц. В статическом подходе нет возможности ввести температуру как характеристику теплового движения атомов, поскольку само движение при этом исключается. Можно было бы считать, что статический подход дает возможность определять равновесные положения центров, относительно которых атомы совершают колебательное движение, независимое от перемещений этих центров, связанных с механическим движением как жесткого целого или деформированием тела. В статье предлагается имитировать тепловые колебания атомов с некоторой заданной амплитудой A наложением на систему атомов случайных возмущений с амплитудой A при равномерном распределении направлений смещений атомов в пространстве. Частоты смещений атомов как аналога колебаний в статическом подходе принимаются за независимые параметры, функция распределения которых по набору частиц требует идентификации для конкретного материала наравне с параметрами потенциала. В качестве начального приближения будем считать, что все атомы имеют одинаковую частоту, которая не изменяется при наложении внешних воздействий и может быть определена при сопоставлении расчетных и экспериментальных кривых для зависимостей некоторых макроскопических свойств от температуры.

В предлагаемом подходе не моделируются процессы установления, в ходе которых происходит перераспределение энергии между кинетической и потенциальной составляющей. Полная энергия системы атомов при заданной температуре заранее не известна. Кинетическая энергия теплового движения фиксируется заданием амплитуды тепловых колебания атомов, а осредненная потенциальная энергия «подстраивается» (за счет изменения межатомных расстояний) под осредненную кинетическую энергию, обеспечивая выполнение условий равнове-

сия в виде минимума полной энергии при заданной температуре (амплитуде и частоте тепловых колебаний).

Для корректного задания тепловых возмущений атомов необходимо гарантировать равномерность распределения направлений случайных смещений в пространстве. Направление задается единичным вектором, поэтому задача о выборе направления случайного смещения атома для получения некоторой реализации его теплового движения сводится к нахождению равномерного распределения точек на сфере единичного радиуса [15].

2. АЛГОРИТМ ПОЛУЧЕНИЯ РАВНОВЕСНОГО СОСТОЯНИЯ МОНОКРИСТАЛЛА

Для определения равновесного состояния образца при каждом заданном значении амплитуды тепловых возмущений используется вариационный подход. Здесь вариации соответствуют не переходу от одного равновесного состояния к другому, а изменению параметров состояния образца при фиксированной температуре вблизи искомого равновесного состояния.

Рассмотрим вариационное уравнение статики сплошной среды в виде

$$\begin{aligned} \delta U &= \delta A + \delta Q, \\ \delta A &= \int_{S_1} \mathbf{t}_n \cdot \delta \mathbf{u} \, ds + \int_V \rho \mathbf{f} \cdot \delta \mathbf{u} \, dv, \\ S_B &= S_1 \cup S_2, \quad \delta \mathbf{u}|_{S_2} = \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (1)$$

где δU — вариация внутренней энергии образца, δA — вариация работы внешних поверхностных \mathbf{t}_n и объемных $\rho \mathbf{f}$ сил, δQ — изменение тепла в рассматриваемом состоянии равновесия, $\delta \mathbf{u}$ — кинематически допустимые вариации перемещений, S_1 — часть поверхности тела, на которой задаются статические граничные условия, S_2 — часть поверхности, на которой задаются кинематические граничные условия, S_B — полная (внешняя) поверхность тела. Приток тепла к телу определяется как $\delta Q = \int_V \rho T \delta S \, dv$, где

T — температура, S — энтропия системы. Объемные силы в рассматриваемом случае на образец не действуют. Поверхностные силы в зависимости от постановки задачи могут быть заданы любыми, например, соответствовать гидростатическому давлению при исследовании его влияния на кристалл. В данном случае поверх-

ностные силы равны нулю, поэтому справедливо $\delta A = 0$.

Применительно к дискретному набору атомов записанные выше интегралы равносильны суммированию соответствующих величин по атомам кристалла. В частности, интеграл по поверхности, на которой задаются статические граничные условия, эквивалентен суммированию по атомам граней образца. В качестве варьируемых параметров выбираются неизвестный параметр решетки a . Вариации определяются в каждом равновесном состоянии при фиксированной амплитуде A колебаний. Энтропия кристалла S не зависит от значения a (то есть объема образца), $\delta S = 0$, и приток тепла также не зависит от варьируемых параметров решетки в равновесном состоянии: $\delta Q = 0$.

Будем считать, что в состоянии равновесия энергия равномерно распределена по всем атомам кристалла. Тогда для определения значения равновесного параметра a кристаллической решетки при заданной температуре (амплитуде и частоте тепловых колебаний атомов) система должна удовлетворять условию $\delta U = 0$, $U = mN\bar{u}$, где \bar{u} — массовая плотность внутренней энергии образца, осредненная по значительному промежутку времени, N — количество атомов, m — масса атома. Массовая плотность внутренней энергии u складывается из плотности кинетической энергии теплового движения атомов и плотности потенциальной энергии их взаимодействия, то есть в каждый момент времени она равна выражению

$$u = \sum_i^N \mathbf{p}_i^2 / 2m^2 N + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \varphi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) / mN, \quad (2)$$

где \mathbf{p}_i — обобщенная скорость (импульс) i -го атома, \mathbf{r}_i — его радиус-вектор, φ — парный потенциал взаимодействия, в качестве которого, как и в [12, 13] выбирается двухпараметрический потенциал Леннарда-Джонса:

$$\varphi(r) = \beta \left((\alpha/r)^{12} - 2(\alpha/r)^6 \right), \quad (3)$$

где параметр α соответствует равновесному расстоянию для пары атомов (для большего числа атомов равновесное расстояние является функцией α), β — «глубина» потенциальной ямы, соответствующая расстоянию $r = \alpha$ при взаимодействии пары изолированных атомов.

Осредняя сумму (2) по большому периоду времени τ и принимая, что каждый атом в со-

стоянии термодинамического равновесия совершает колебания, близкие к гармоническим с заданной амплитудой A и частотой ω , получим

$$\bar{u} = 3A^2\omega^2 / 2 + \tau^{-1} \int_0^\tau \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{\varphi(\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_j(t))}{mN} dt. \quad (4)$$

Здесь учтено, что кинетическая энергия тепловых колебаний одинаково распределена по трем взаимно ортогональным направлениям в пространстве. Осреднение по времени в последнем слагаемом в предлагаемом подходе заменяется осреднением по некоторому большому числу реализаций теплового возмущенного состояния образца. Заметим, что среднее значение потенциальной энергии взаимодействия атомов не равно средней кинетической энергии, как доказано для случая классических или квантовых осцилляторов [16]. Минимальный уровень потенциальной энергии выражается через параметр β потенциала Леннарда-Джонса, который является независимой постоянной для каждого материала.

В отличие от объектов статистической физики рассматриваемая система не является достаточно большой для применения методов статистического анализа и может быть подвергнута непосредственной обработке. Реализации возмущенного состояния кристалла генерируются на компьютере, и в каждой из них с помощью потенциала Леннарда-Джонса вычисляется потенциальная энергия взаимодействия всех атомов кристалла. В силу выпуклости потенциальной энергии кристаллического образца требуется найти ее минимум по переменному параметру решетки a в каждой полученной реализации. В работе для решения задачи минимизации использовался метод Хука-Дживса.

Зависимость равновесного параметра кристаллической решетки и плотности \bar{u} потенциальной энергии от амплитуды тепловых колебаний A получается осреднением найденных параметров решетки и потенциальной энергии образца по всем реализациям при каждом заданном значении амплитуды тепловых колебаний. Для каждого значения амплитуды A было получено по 1000 реализаций случайных конфигураций кристаллической решетки, для каждой из которых определены равновесные межатомные расстояния, и по этим 1000 испытаниям определены медианы распределений значений параметров решетки. Также в каждой реализации определялась потенциальная энер-

гия $\phi = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \varphi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) / N$ всей системы атомов, отнесенная к числу атомов образца. Осреднением по всем реализациям определялось значение энергии $\bar{\phi} = \tau^{-1} \int_0^{\tau} \phi dt$.

Рассматривались кубические монокристаллические образцы с ОЦК- и ГЦК-решетками. Для различного числа атомов n на ребре образца, как и в [6], получены различные значения безразмерного равновесного межатомного расстояния a/α , а также найдены их зависимости от безразмерной амплитуды A/α наложенных тепловых возмущений (рис. 1). Вертикальная пунктирная прямая соответствует точке пересечения кривых энергии (рис. 2). Наименьший образец имел 4 атома на ребре. Кривые для параметров решетки монотонно возрастают с ростом амплитуды тепловых колебаний, то есть предложенный подход качественно верно описывает явление теплового расширения кристалла. Для получения предельной кривой, соответствующей макроскопическому телу ($n \rightarrow \infty$), для каждого фиксированного значения амплитуды возмущений A строилась гиперболическая аппроксимация зависимости значений параметров решетки от числа атомов на ребре образца.

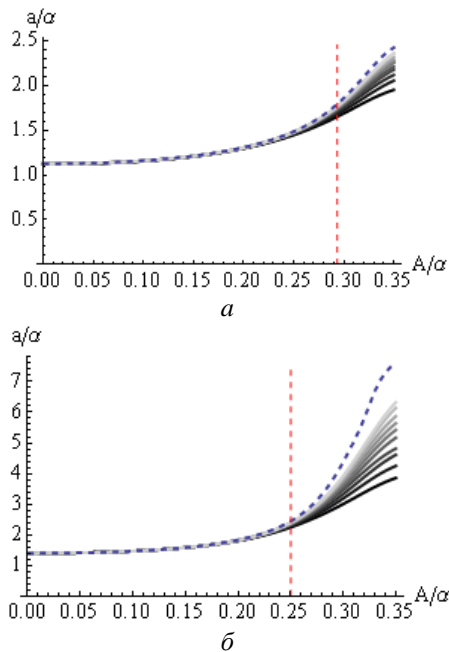


Рис. 1. Зависимости параметра решетки монокристалла от амплитуды тепловых возмущений при различных n : *a* – ОЦК-; *b* – ГЦК-решетка. Пунктирная кривая соответствует $n \rightarrow \infty$

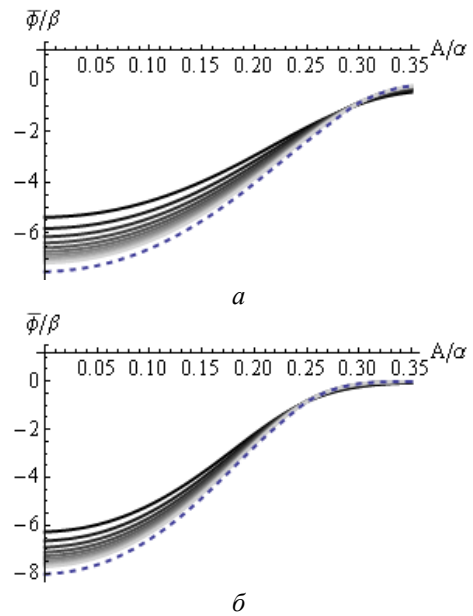


Рис. 2. Зависимости параметра решетки монокристалла от амплитуды тепловых возмущений при различных n : *a* – ОЦК-; *b* – ГЦК-решетка. Пунктирная линия соответствует $n \rightarrow \infty$

Потенциальная энергия образца, отнесенная к числу атомов, $\bar{\phi}$ возрастает при увеличении амплитуды колебаний атомов (рис. 2). Для решеток обоих типов для каждого значения амплитуды A отклонений атомов от их положений в узле кристаллической решетки получена предельная точка, соответствующая макроуровню. Полученные точки образуют предельную (макроскопическую) кривую для зависимости плотности потенциальной энергии кристалла от амплитуды теплового движения атомов. Показано, что кривые потенциальной энергии (рис. 2) для образцов различного размера пересекаются в одной точке (этой точке соответствует вертикальная пунктирная прямая на рис. 1).

Отметим, что запасенная в теле потенциальная энергия возрастает с ростом температуры, а соответствующая свободная энергия $\bar{\Psi}$ должна убывать. Сравнение полученных макроскопических равновесных кривых для зависимости свободной энергии $\bar{\Psi}$ от аналога температуры A демонстрирует наличие точки пересечения (рис. 3), которая соответствует моменту фазового перехода от решетки типа ОЦК к решетке типа ГЦК.

Таким образом, предложенный подход позволяет качественно описывать ряд теплофизических явлений в кристаллах, включая эффект

теплового расширения и полиморфный фазовый переход при нагревании образца.

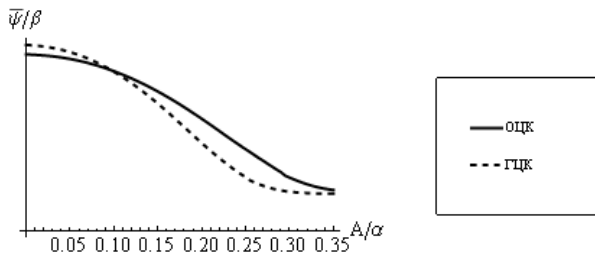


Рис. 3. Равновесные макроскопические кривые зависимости аналога плотности свободной энергии от амплитуды тепловых возмущений для ОЦК- и ГЦК-решеток: a – потенциальная энергия; b – аналог свободной энергии решеток

Для установления связи между температурой и амплитудой теплового движения атомов в простейшем случае можно принять, что частота колебаний при тепловом движении атомов не зависит от амплитуды. Принимая, как и выше, что атомы кристалла совершают близкие к гармоническим колебания с амплитудой A и частотой ω , получим осредненное по периоду колебаний выражение $3mA^2\omega^2/2$ для кинетической энергии отдельного атома. Приравнивая эту величину энергии $3kT/2$ теплового движения атома идеального газа (или используя «газовый термометр»), получим равенство $mA^2\omega^2 = kT$, то есть температура T рассматриваемой системы при фиксированном значении амплитуды A может быть оценена как $T = mA^2\omega^2/k$. Принимая, что амплитуда возмущений A_c соответствует некоторой критической температуре T_c , получим оценку частоты колебаний атомов $\omega = A_c^{-1}\sqrt{kT_c/m}$. Вопрос выбора значения T_c остается открытым. Возможно, ее можно связать с точкой фазового перехода, что требует проведения отдельного исследования.

3. ПРИМЕНЕНИЕ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ

Для решения задачи использовалась рабочая станция с процессором AMD Phenom X6 1055T и графическим ускорителем Nvidia GeForce GTS460. В качестве языков программирования были выбраны Intel Fortran Composer XE и PGI

Accelerator Fortran v.12. Все расчеты проводились в операционной системе OpenSUSE 12.1 x64. В качестве технологий высокопроизводительного программирования были выбраны OpenMP для реализации на многоядерном CPU и PGI Accelerator для реализации на CUDA-совместимом GPU.

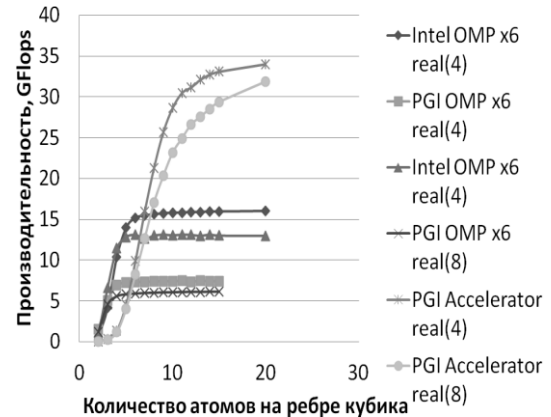


Рис. 4. Сравнение производительности расчетов

При использовании технологии OpenMP распараллеливание расчетов проводилось по статистическим реализациям. Несвязанность вычислений для различных реализаций позволила получить высокий уровень эффективности применения многоядерных процессоров. Однако такой подход к распараллеливанию оказался малоэффективен для расчетов на графическом ускорителе. Наибольшую производительность при применении технологии PGI Accelerator удалось получить при последовательном распараллеливании циклов внутри каждой реализации. Расчеты показали (рис. 4) более чем двукратное преимущество вычислений на графическом ускорителе (с использованием технологии PGI Accelerator) по сравнению с наиболее эффективными реализациями в рамках OpenMP-распараллеливания как для переменных одинарной, так и для переменных двойной точности. В то же время трудоемкость подготовки и отладки кода для графического ускорителя существенно превышает трудоемкость создания OpenMP-реализаций.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложен вычислительно-статистический подход к учету температуры при моделировании свойств материалов с кристаллическим строением методом атомарной статистики,

использующий возможности высокопроизводительных вычислений. На примере материала с кубическими решетками исследован вопрос о влиянии температуры на значения удельной потенциальной энергии и значения равновесных параметров решетки. Зависимости параметров рассмотренных решеток и удельной потенциальной энергии от амплитуды тепловых колебаний являются монотонно возрастающими. Показано, что кривые, отражающие зависимости удельной потенциальной энергии образцов от температуры, построенные для ОЦК- и ГЦК-монокристаллов макроскопических размеров, имеют точки пересечения, соответствующие полиморфным фазовым превращениям. Полученные зависимости качественно верно отражают известные физические закономерности, что позволяет применять предложенный вычислительно-статистический подход к заданию температуры в методе атомарной статистики при исследовании теплофизических свойств монокристаллов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Кривцов А. М.** Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: Физматлит, 2007. 304 с.
2. Метод молекулярной динамики в физической химии / Под ред. **Ю. К. Товбина**. М.: Наука, 1996. 334 с.
3. **Chen Y., Lee J.** Atomistic formulation of a multiscale field theory for nano/micro solids // *Phil. Mag.* 2005. Vol. 85. P. 4095–4126.
4. **Nielsen O. H., Martin R. M.** First-principles calculation of stress // *Phys. Rev. Lett.* 1983. Vol. 50. P. 697–700.
5. **Nielsen O. H., Martin R. M.** Quantum-mechanical theory of stress and force // *Phys. Rev. B.* 1985. Vol. 32. P. 3780–3791.
6. **Tsai D. H.** The virial theorem and stress calculation in molecular dynamics // *J. Chem. Phys.* 1979. Vol. 70. P. 1375–1382.
7. **Zhou M. A.** new look at the atomic level virial stress: on continuum-molecular system equivalence // *Proc. of the Royal Society A.* 2003. Vol. 459. P. 2347–2392.
8. **Zhou M.** Thermomechanical continuum representation of atomistic deformation at arbitrary size scales // *Proc. of the Royal Society A.* 2005. Vol. 461. P. 3437–3472.
9. **Cheung K. S., Yip Y.** Atomic-level stress in an inhomogeneous system // *J. Appl. Phys.* 1991. Vol. 70. P. 5688–5690.
10. **Lutsko J. F.** Stress and elastic constants in anisotropic solids: molecular dynamics techniques // *J. Appl. Phys.* 1988. Vol. 64. P. 1152–1154.
11. **Zimmerman J. A., Webb III E. B., Hoyt J. J., Jones R. E., Klein P. A., Bammann D. J.** Calculation of stress in atomistic simulation // *Modeling and Simulation in Material Science and Engineering.* 2004. Vol. 12. P. S319–S332.
12. **Зубко И. Ю., Трусов П. В.** Определение упругих постоянных ГЦК-монокристаллов с помощью потенциала межатомного взаимодействия // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика.* 2011. № 1. С. 147–169.
13. **Зубко И. Ю., Мелентьева О. В., Морозова В. П., Кочуров В. И.** Вывод упругого закона монокристаллов металлов из потенциала межатомного взаимодействия // *Вестник Нижегородского университета им. Н. И. Лобачевского.* 2011. № 4, ч. 5. С. 2181–2183.
14. **Симонов М. В., Зубко И. Ю.** Определение равновесных параметров решетки различных ГПУ-монокристаллов с помощью потенциала межатомного взаимодействия Ми // *Вестник ПГТУ. Механика.* 2012. № 3. С. 205–218.
15. **Зубко И. Ю., Кочуров В. И., Симонов М. В.** Атомистический подход к определению зависимости от температуры потенциальной энергии и равновесных межатомных расстояний для монокристаллических образцов с ГПУ-решеткой // *Известия Самарского научного центра РАН.* 2012. № 4. С. 1403–1409.
16. **Леонтович М. А.** Введение в термодинамику. Статистическая физика. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1983. 416 с.

ОБ АВТОРАХ

Зубко Иван Юрьевич, доц. каф. мат. моделир. систем и процессов. Дипл. прикл. математик (ПГТУ, 1999). Канд. физ.-мат. наук (ПГТУ, 2002). Иссл. в обл. механики неупруго деформ. тв. тел, градиентных теорий, континуальной теории дислокаций, обобщ. континуумов в пластичности, диффузии в тв. телах, аналит. иссл. физ.-мех. свойств кристаллич. решеток.

Кочуров Владимир Игоревич, ст. преп. той же каф. Дипл. магистр прикл. мат. и информат. (ПГТУ, 2000). Иссл. в обл. числ. реш. физ. задач, параллелн. выч. алгоритмов.

METADATA

Title: The phase transition point determination for materials with cubic lattice by using atomistic approach.

Authors: I. Yu. Zubko, V. I. Kochurov.

Affiliation: Perm National Research Polytechnic University (PNRPU), Russia.

Email: zoubko@list.ru.

Language: Russian.

Source: Vestnik UGATU (scientific journal of Ufa State Aviation Technical University), vol. 17, no. 5 (58), pp. 211–218, 2013. ISSN 2225-2789 (Online), ISSN 1992-6502 (Print).

Abstract: The computational-statistical approach to studying physical-mechanical properties for finite sized monocrystals is developed. The approach is based on combination of the high-performance computational techniques and statistical analysis of the crystal response on external thermo-mechanical actions for specimens with statistically small amount of atoms (i.e. for micro- and nanoparticles). Computation of pure mechanical properties was performed using the atomistic statics method. The heat motion of atoms is modelled in the statics approach by including independent degrees of freedom for atoms connected with their oscillations. The amplitude A of the oscillations is considered as a variable of the state, but the

frequency distribution among the atoms is supposed to be constant and considered as a material function to be identified. These oscillations are simulated by applying the random displacements with amplitude A under uniform distribution of directions for such perturbations in space. Each obtained perturbed configuration of crystal is frozen for calculating its potential energy density. Equilibrium thermo-mechanical parameters have been computed by averaging of huge amount of different realizations of the perturbed crystal configurations. The dependences of potential energy densities for FCC- and BCC- crystal lattices on heat perturbations amplitude were calculated for wide interval of A . These curves have points of intersection which may correspond to the points of phase transition and hence may be used for the frequency function identification.

Key words: cubic crystal lattice; temperature in atomic statics method; dependence of physical-mechanical properties on specimen size; high-performance computation.

References (English transliteration):

1. A. M. Krivcov, *Deformation and fracture of solids with microstructure*, (in Russian). Moscow: Fizmatlit, 2007.
2. *The molecular dynamics method in physical chemistry*, (in Russian), Yu. K. Tovbin, Ed. Moscow: Nauka, 1996.
3. Y. Chen and J. Lee, "Atomistic formulation of a multiscale field theory for nano / micro solids," *Phil. Mag.*, vol. 85, pp. 4095-4126, 2005.
4. O. H. Nielsen and R. M. Martin, "First-principles calculation of stress," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 50, pp. 697-700, 1983.
5. O. H. Nielsen and R. M. Martin, "Quantum-mechanical theory of stress and force," *Phys. Rev. B.*, vol. 32, pp. 3780-3791, 1985.
6. D. H. Tsai, "The virial theorem and stress calculation in molecular dynamics," *J. Chem. Phys.*, vol. 70, pp. 1375-1382, 1979.
7. M. Zhou, "A new look at the atomic level virial stress: on continuum-molecular system equivalence," in *Proc. Royal Society A*, vol. 459, pp. 2347-2392, 2003.
8. M. Zhou, "Thermomechanical continuum representation of atomistic deformation at arbitrary size scales," in *Proc. Royal Society A*, vol. 461, pp. 3437-3472, 2005.
9. K. S. Cheung and Y. Yip, "Atomic-level stress in an inhomogeneous system," *J. Appl. Phys.*, vol. 70, pp. 5688-5690, 1991.
10. J. F. Lutsko, "Stress and elastic constants in anisotropic solids: molecular dynamics techniques," *J. Appl. Phys.*, vol. 64, pp. 1152-1154, 1988.
11. J. A. Zimmerman, E. B. Webb III, J. J. Hoyt, R. E. Jones, P. A. Klein, and D. J. Bammann, "Calculation of stress in atomistic simulation," *Modeling and Simulation in Material Science and Engineering*, vol. 12, pp. S319-S332, 2004.
12. I. Yu. Zubko and P. V. Trusov, "Finding elastic moduli for FCC-monocrystals using interatomic interaction potential," (in Russian), *Vestnik of the Perm National Research Polytechnic University. Mechanics*, no. 1, pp. 147-169, 2011.
13. I. Yu. Zubko, O. V. Melent'eva, V. P. Morozova, and V. I. Kochurov, "Derivation of elastic law for metal monocrystals from interatomic interaction potential," (in Russian), *Vestnik of the Lobachevsky National Research University of Nizhni Novgorod*, no. 4, part 5, pp. 2181-2183, 2011.
14. M. V. Simonov and I. Yu. Zubko, "Equilibrium lattice parameters determination by using Mie potential of interatomic interaction for different HCP-monocrystals," (in Russian), *Vestnik of the Perm National Research Polytechnic University. Mechanics*, no. 3, pp. 205-218, 2012.
15. I. Yu. Zubko, V. I. Kochurov, M. V. Simonov, "Atomistic approach to finding the dependences of potential energy and equilibrium interatomic distances on temperature for monocrystal specimens with HCP-lattice," (in Russian), *Izvestiya Samarskogo nauchnogo centra RAS*, no. 4, pp. 1403-1409, 2012.
16. M. A. Leontovich, *Introduction in thermodynamics. Statistical physics*, (in Russian). Moscow: Nauka. The main edition of physical-mathematical literature, 1983.

About authors:

Zubko, Ivan Yurievich, Associate Professor, Dept. of Mathematical Modelling of Systems and Processes. Cand. of Phys. and Math. Sci. (PNRPU, 2003).

Kochurov, Vladimir Igorevich, Senior Lecturer, Dept. of Mathematical Modelling of Systems and Processes.