

УДК 53.092+519

DOI: 10.31319/2519-8106.1(38)2018.129530

**К.Д. Євфимко**, старший викладач кафедри фізики, evfimko.k@gmail.com**О.О. Мочалов**, д.т.н., професор, oleksandr.mochalov@nuos.edu.ua**Н.О. Шаповал**, к.т.н., доцент, shapoval.natalia2014@gmail.com**С.С. Коваль**, к.ф.-м.н., доцент, sergiy.koval@nuos.edu.ua

Національний університет кораблебудування імені адмірала Макарова

## РОЗРАХУНОК РОЗПОДІЛУ ГУСТИНИ МІЖАТОМНОГО ПОТЕНЦІАЛУ У СТРУКТУРНІЙ ОДИНИЦІ РЕЧОВИНИ

*Запропоновано методику обчислення об'ємної густини потенціалу міжатомної взаємодії в структурній одиниці кристалічного твердого тіла, яка дозволяє використовувати рівняння Шредінгера для обчислення густини частинок, потоку частинок і дослідження фізичних властивостей речовини.*

**Ключові слова:** математична модель, структурна одиниця, густина частинок, рівняння Шредінгера.

*The method of calculating the interatomic interaction potential volume density in the crystalline structural solid unit is proposed. It allows the Schrödinger equation to be used to calculate the particle density, the particle flux, and the physical properties of matter.*

**Keywords:** mathematical model, structural solid unit, particle density, Schrödinger equation.

### Постановка проблеми

Теоретичне дослідження фізичних властивостей речовини на нано і мікрорівні є актуальним завданням сучасної науки: в даний час можливості обчислювальної техніки дозволяють розробляти нові методи дослідження фізичних властивостей твердих тіл на мікрорівні, а також безпосередньо дослідити міжатомну взаємодію.

### Аналіз останніх досліджень і публікацій

Одним з таких методів є метод структурних одиниць, який можна використовувати для дослідження і прогнозування фізичних властивостей матеріалів [1—6]. При дослідженні теплофізичних властивостей матеріалів за допомогою методу структурних одиниць необхідно враховувати розподіл потенціалу міжатомної взаємодії в об'ємі структурної одиниці.

### Формулювання мети дослідження

Мета даної роботи — розробити методику розрахунку розподілу потенціалу в структурній одиниці та коефіцієнта жорсткості міжатомних зв'язків атомів, що входять в структурну одиницю будь-якої речовини.

### Виклад основного матеріалу

**Методика обчислення об'ємної густини потенціалу.** В якості найпростішої структури будемо розглядати кубічну структурну одиницю, атоми якої розташовані в вузлах кристалічної решітки з параметрами  $a \times b \times c$ . Сили міжатомної взаємодії і коефіцієнт жорсткості міжатомних зв'язків пов'язані з міжатомним потенціалом співвідношеннями: [7]

$$\begin{aligned} \frac{d\Pi(\Delta r)}{d\Delta r} &= -F(\Delta r) = k(\Delta r)\Delta r; \\ \frac{dF(\Delta r)}{d\Delta r} &= \frac{dk(\Delta r)}{d\Delta r} \Delta r + k(\Delta r), \end{aligned} \quad (1)$$

де  $\Pi(\Delta r) = D(e^{-2a\Delta r} - 2e^{-a\Delta r})$ ;  $k(\Delta r)$  — коефіцієнт жорсткості міжатомних зв'язків;  $\Delta r$  — зміна міжатомних відстаней;  $a, D$  — сталі, що характеризують фізичні властивості речовини.

Розіб'ємо об'єм структурної одиниці на елементарні об'єми  $\Delta V = \Delta a \cdot \Delta b \cdot \Delta c$ , де  $\Delta a = \frac{a}{n}$ ;  $\Delta b = \frac{b}{m}$ ;  $\Delta c = \frac{c}{l}$ , тоді координати вершин  $\Delta V$  запишуться так  $x = \Delta a \cdot i$ ,  $i = 0, 1, 2 \dots n$ ,  $y = \Delta b \cdot j$ ,  $j = 0, 1, 2 \dots m$ ,  $z = \Delta c \cdot k$ ,  $k = 0, 1, 2 \dots l$ . Будемо вважати, що результуючі значення міжатомного потенціалу в кожній точці об'єму структурної одиниці  $P(x, y, z)$  є суперпозиція всіх потенціалів атомів входять в структурну одиницю.

Помістимо систему координат  $(x,y,z)$   $(x, y, z)$  в місцезнаходження першого атома (див. рис. 1, рис. 2).

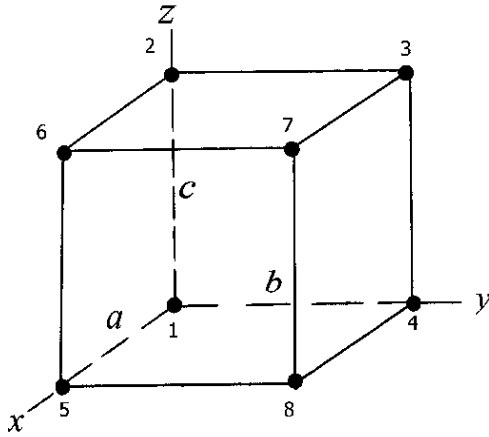


Рис 1. Схема розташування атомів в СО

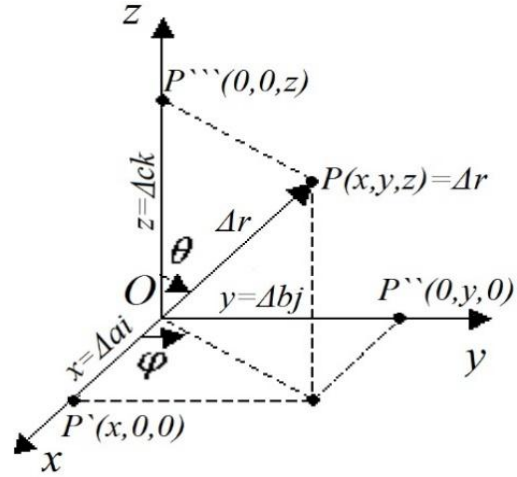


Рис 2. Декартова, сферична і циліндрична с.к.

Рівняння взаємозв'язку координат точок простору  $P(x,y,z)$  з урахуванням рис. 2 запишуться так:

$$\begin{aligned} & \dots \\ & \dots \\ & \dots \\ & \dots \\ & \dots \\ & \dots \end{aligned}$$

де  $\dots$  ;  
 Поточне значення координати точки  $\dots$ ;  
 Координати атомів в структурну одиниці:  $\dots$

Величина радіусу вектора для атома структурної одиниці, проведеного з його местонаходження в точку з координатами  $\dots$

$$(4)$$

де  $\dots$  ;  
 Задавши значення координат точки  $\dots$ , використовуючи вирази (2), (3), підставляємо їх в (4), знаходимо  $\dots$ . Підставивши значення  $\dots$  в потенціал міжатомної взаємодії знайдемо внесок  $\dots$  потенціалу в результуючий потенціал в точці  $\dots$

$$(5)$$

Локальна щільність потенціалу в елементарному об'ємі  $\dots$  знаходиться зі співвідношення:  $\dots$

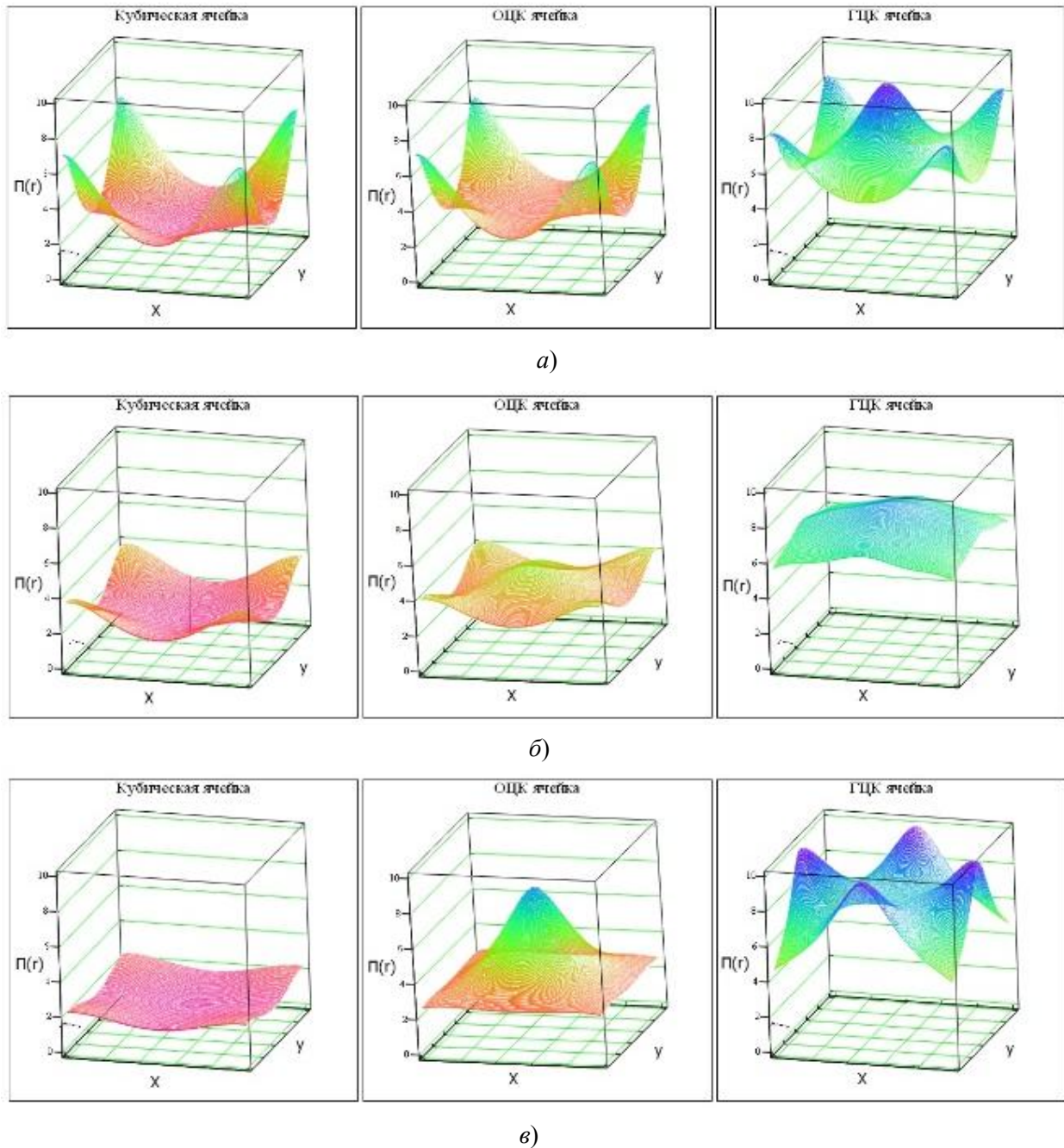


Рис. 3. Розподіл міжатомного потенціалу в площині  $(x, y)$ : а) на грані структурної одиниці, б) в перерізі структурної одиниці, в) в центрі структурної одиниці

Інтегральна щільність потенціалу в структурній одиниці об'ємом  $V_{cm.ед.} = a \cdot b \cdot c$

$$\Pi_{с.м.е.} = \Delta\Pi \cdot N = \Delta\Pi \frac{V_{cm}}{\Delta V}. \quad (7)$$

Більш складні варіанти структурної одиниці в разі гранецентрованої і об'ємно центрованої структури так само можливо розрахувати за допомогою запропонованої моделі, додавши відповідні атоми на межі або в центр структурної одиниці. На рис. 3 наведено розподіл міжатомного потенціалу у перерізах ОЦК, ГЦК та кубічної структурних одиниць, розрахований за допомогою пропонуваної моделі.

При зовнішніх впливах на структурну одиницю: підведення тепла, деформація під дією зовнішньої сили, об'єм  $V_{cm}$  буде змінюватись зі зміною міжатомних відстаней по осях

координат:  $a + \delta_x, b + \delta_y, c + \delta_z$ , где  $\delta_x, \delta_y, \delta_z$  — зміна міжатомних відстаней — це необхідно враховувати при дослідженні впливу зовнішніх впливів на структурну одиницю.

Знаючи локальний розподіл потенціалу (6) і використовуючи вирази (1), вирішивши диференціальне рівняння

$$2aD(e^{-2a\Delta r} - e^{-a\Delta r}) = \frac{dk(\Delta r)}{d\Delta r} \Delta r + K(\Delta r) \quad (8)$$

отримаємо функціональну залежність  $K(\Delta r)$ . Це дає можливість обчислити локальні коефіцієнти жорсткості в елементах структурної одиниці.

Знаючи локальні значення потенціалу і коефіцієнта жорсткості зв'язку можна вирішити задачу з розподілом вільних електронів в міжатомному просторі. Свійка рівновага вільних електронів буде в тих точках  $P(x, y, z)$ , де потенціал приймає максимальне значення по модулю (враховуючи, що він негативний).

Значення коефіцієнта жорсткості за напрямками координат можна представити у вигляді матриць

$$k_{ij} = \begin{vmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{1m} \\ k_{i21} & k_{i22} & k_{2m} \\ k_{31} & k_{32} & k_{3m} \\ \hline k_{n1} & k_{n2} & k_{nm} \end{vmatrix}; \quad k_{ik} = \begin{vmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{1l} \\ k_{i21} & k_{i22} & k_{2l} \\ k_{31} & k_{32} & k_{3l} \\ \hline k_{n1} & k_{n2} & k_{nl} \end{vmatrix}; \quad k_{jk} = \begin{vmatrix} k_{11} & k_{12} & k_{1l} \\ k_{i21} & k_{i22} & k_{2l} \\ k_{31} & k_{32} & k_{3l} \\ \hline k_{m1} & k_{m2} & k_{ml} \end{vmatrix}. \quad (9)$$

Аналогічним чином записується локальний потенціал  $\Delta\Pi_{ij}, \Delta\Pi_{ik}, \Delta\Pi_{jk}$ .

Вирази (9) дають можливість розрахувати сили, що виникають при деформації структурної одиниці за напрямками  $x, y, z$ ,  $x, y, z$ , їх взаємозв'язок і потік електронів через  $\Delta V$ , при впливі на структурну одиницю за допомогою електричного поля. Для цього необхідно скористатися рівнянням Шредінгера:

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{d^2\psi}{dz^2} \right) + \Delta\Pi(x, y, z)\psi, \quad (10)$$

де  $i$  — уявна одиниця;  $m$  — маса електрона;  $\psi(x, y, z, t)$  — хвильова функція;  $\Delta\Pi(x, y, z)$  — потенціал міжатомної взаємодії в області  $(x, y, z)$  простору структурної одиниці;  $\hbar$  — стала Планка.

З огляду на те що хвильові функції комплексно зв'язані, рівняння (10) можна переписати так:

$$\frac{d\psi^*}{dt} = -\frac{i\hbar}{2m} \left( \frac{d^2\psi^*}{dx^2} + \frac{d^2\psi^*}{dy^2} + \frac{d^2\psi^*}{dz^2} \right) + \frac{1}{\hbar} \Delta\Pi(x, y, z)\psi^*. \quad (11)$$

Введемо позначення для потоку ймовірності проходження електронів через поперечний переріз об'єму  $\Delta V$ :

$$q = \frac{i\hbar}{2m} \left[ \psi^* \left( \frac{d\psi}{dx} + \frac{d\psi}{dy} + \frac{d\psi}{dz} \right) - \psi \left( \frac{d\psi^*}{dx} + \frac{d\psi^*}{dy} + \frac{d\psi^*}{dz} \right) \right]. \quad (12)$$

Скористаємося законом збереження ймовірності, який можна трактувати як закон збереження числа частинок, що знаходяться в даному квантовому стані, тоді густину частинок (електронів) в кожній точці структурної одиниці можна виразити через хвильову функцію  $\psi$ .

$$W_{\Delta V} = N_{\Delta V} |\psi|^2. \quad (13)$$

Інтегруючи вираз (13) визначимо число часток в об'ємі  $\Delta V$

$$N_{\Sigma} = N_{\Delta V} \int_0^{\Delta V} |\psi|^2 dV. \quad (14)$$

Потік числа частинок через поверхню, обмежену цим об'ємом, дорівнюватиме убутку ймовірності перебування частинок в цьому об'ємі.

$$\frac{dW_{\Delta V}}{dt} = -N_{\Delta V} \oint_S q ds. \quad (15)$$

### Висновки

Використання запропонованої методики обчислення об'ємної густини потенціалу міжатомної взаємодії в структурній одиниці дозволяє використовувати рівняння Шредінгера для обчислення густини частинок, потоку частинок в часі в даній точці структурної одиниці.

Знаючи величину потенціалу  $\Delta P(x, y, z)$  в даній точці і використовуючи наведені вирази можливо дослідити фізичні властивості речовини, що складається з даних структурних одиниць, з огляду на те, що під частками (в широкому сенсі) можна мати на увазі: електрони, фонони, фотони. Відповідно, електрони характеризують електропровідність, фонони — поширення тепла в структурній одиниці (тобто теплопровідність), фотони — поширення світла. Зміна інтегрального значення потенціалу міжатомної взаємодії  $\Delta P(x, y, z)$  характеризує деформацію структурної одиниці. Локальний розподіл потенціалу і локальний коефіцієнт жорсткості  $k_{ij}, k_{ik}, k_{jk}$ , дозволяє пояснити протікання височастотних струмів в поверхневому шарі металу, явище дифузії в металах і так далі.

### Список використаної літератури

1. Мочалов А.А., Гайша А.А., Евфимко К.Д. Исследования температурных характеристик твердого тела на микроуровне с помощью метода структурных единиц // Журнал нано- та електронної фізики Том 6 № 4, 04040(4с) (2014)
2. Мочалов А.А., Евфимко К.Д., Шаповал Н.А. Исследование особенностей теплопроводности структурной единицы твердого тела // Математичне моделювання – № 2. – 2013. – С. 29–32.
3. Мочалов А.А., Гайша А.А. Методика расчета коэффициента жесткости межатомных связей на основе экспериментальной кривой напряжения // Журнал нано- та електронної фізики Том 1 № 1, 0101(1) (2012)
4. Мочалов А.А., Гайша А.А., Евфимко К.Д. Динамика деформации структурной единицы твердого тела от внешнего воздействия // Журнал нано- та електронної фізики Том 1 № 1, 2009 С. 70–79
5. Мочалов А.А., Евфимко К.Д., Гайша А.А. Исследование зависимости параметров потенциала Морзе от температуры и давления для металлов // Металл и литье Украины. – 2009. – № 11/12. – С. 64–66. Киев. ФТИМС
6. Мочалов А.А., Евфимко К.Д., Гайша А.А. Теоретико-экспериментальный подход в исследовании параметров вещества // Металл и литье Украины. – 2010. – № 4. – С. 45–47. – Киев. ФТИМС.
7. Мочалов А.А. Курс физики т. 1 – Николаев: НУК, 2008. – 566 с.