

ЛІТЕРАТУРА

1. Вигерс К. Разработка требований к программному обеспечению. — М.: Издательско-торговый дом «Русская Редакция». 2004. — 576 с.
2. Методологии моделирования предметной области / С. В. Соловьев, Р. И. Цой, Л. С. Гринкруг. — М.: Издательство Академии Естествознания. 2011. — 340 с.
3. Востров Г. Н. Проблемы моделирования предметных областей в информационных системах / Г. Востров, Е. Малахов, К. Корнилова. Режим доступа: <http://www.codenet.ru/progrother/modelingproblems>
4. Востров Г. Н. Проблемы построения информационных систем над предметными областями / Г. Н. Востров, В. И. Межуев // Штучний інтелект. — 2008. — № 4. — С.736—746.
5. Моделирование и анализ систем. IDEF-технологии: практикум / С. В. Черемных, И. О. Семенов, В. С. Ручкин. — М.: Финансы и статистика. 2006. — 192 с.
6. Антонов В. В. Построение формальной модели предметной области с применением нечеткой кластеризации / В. В. Антонов, Г. Г. Куликов, Д. В. Антонов // Системный анализ, управление и обработка информации. — Уфа: УГАТУ. — 2011. — Т.15. — №5 (45). — С. 3—11.
7. Садовой О. В. Створення єдиної автоматизованої інформаційної системи управління вищим навчальним закладом на прикладі ДДТУ / О. В. Садовой, В. В. Завгородній, К. М. Ялова, К. В. Яшина // Збірник наукових праць НГУ. — Дніпропетровськ: ДВНЗ „НГУ”. — 2013. — № 42. — С.138—144.

пост.19.02.15

Использование коэффициентов жесткости связей, гравитационного и электростатического полей при математическом моделировании межатомного взаимодействия в структурных единицах

А. А. МОЧАЛОВ, Н. А. ШАПОВАЛ, К. Д. ЕВФИМКО, Т. А. ТКАЧЕНКО, Е. П. БОЙКО

Национальный университет кораблестроения им. адмирала Макарова

Рассмотрены особенности математического моделирования взаимодействия атомов и молекул вещества. Описана модель взаимодействия структурных единиц с учетом коэффициента жесткости связей, гравитационного и электростатического полей.

Розглянуто особливості математичного моделювання взаємодії атомів та молекул речовини. Описана модель взаємодії структурних одиниць з урахуванням коефіцієнта жорсткості зв'язку, гравітаційного та електростатичного полів.

The peculiarities of the mathematical modeling of the substance's atoms and molecules interaction was considered. The model of the structural units interaction was described taking into account the coefficient of the stiffness of the connections, the gravitational and electrostatic fields.

При разработке математических моделей взаимодействия атомов и молекул вещества законы гравитационного и электростатического взаимодействия не учитываются. Вместо этих физических полей используются различные потенциалы взаимодействия (Лепарда-Джонсона, Морзе, Ли,Тейта и др.), которые не описывают физическую сущность процессов взаимодействия [1, 2]. Привлекательность таких потенциалов заключается в том, что некоторые из них, двух, трех и четырех параметрические. Возможность варьировать этими параметрами позволяет добиваться совпадения результатов математического моделирования с экспериментом. На самом деле это не имеет никакого отношения к физической сущности указанного взаимодействия и потому не может претендовать на закон природы. Вычисленные параметры будут являться новыми функциями, которые будут справедливы только для этой модели и не могут быть использованы для описания других веществ. Полученные результаты с использованием потенциалов взаимодействия, не несущих физического смысла, также не имеют физического смысла.

Рассмотрим гравитационное и электростатическое поля, описывающие разные физические свойства материи. Несмотря на это, математическая запись силы взаимодействия между массами вещества (1) и зарядами этих масс (2) одинаковые. Отличие заключается только в физической сущности величин, входящих в эти выражения (1) и (2).

Сила гравитационного взаимодействия

$$F_{гп} = \gamma \frac{m_1 m_2}{r^2} \quad (1)$$

где $\gamma=6,672 \cdot 10^{-11} \text{ Нм}^2/\text{кг}^2$ – гравитационная постоянная;
 m_1, m_2 – массы взаимодействующих тел (кг);
 r – расстояние между взаимодействующими массами (м).

Сила электростатического взаимодействия зарядов

$$F_э = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r^2} \quad (2)$$

где $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 8,99 \cdot 10^9 \text{ Нм}^2/\text{Кл}^2$ – постоянная электростатического взаимодействия;

q_1, q_2 – взаимодействующие заряды;
 ϵ – относительная диэлектрическая проницаемость;
 r – расстояние между взаимодействующими зарядами.

Выражение (1) и (2) описывают взаимодействие точечных масс и зарядов при статическом взаимодействии гравитационных и электромагнитных полей. Они же хорошо описывают взаимодействие больших масс и зарядов.

Выражения (1) и (2) несут определенный физический смысл, но для использования их при математическом моделировании, учитывая их векторное происхождение и сферическую симметрию, удобнее перейти к описанию силового взаимодействия, введя понятие коэффициента жесткости связи, соответствующего физического поля. Физический смысл данного коэффициента хорошо известен ($-K(r) = \frac{dF}{dr}$).

Понятие коэффициента жесткости удобно использовать при описании взаимодействия между атомами, при применении метода структурных единиц [3]. Атомы в структурных единицах находятся на расстоянии порядка 10^{-10} м, взаимодействуют при помощи гравитационного и электростатического полей, а возможно и электромагнитного. Его еще называют индукционно-дисперсионным взаимодействием.

На примере гравитационного поля введем коэффициент жесткости гравитационного взаимодействия, используя выражение (1). Будем считать, что величина гравитационного поля имеет смысл начиная с поверхности данного тела, создающего гравитационное поле. Внутри этого тела гравитационное взаимодействие атомов и молекул осуществляется по тому же закону. Однако его величина не оказывает влияние на внешнее гравитационное поле и его можно не учитывать.

Запишем известный закон гравитационного взаимодействия двух тел через их физические величины, которые мы непосредственно можем измерить: размер взаимодействующих тел R_{01}, R_{02} , их плотность ρ_1, ρ_2 , расстояние между ними Δr .

Тогда закон гравитационного взаимодействия запишется так:-

$$F(r) = \gamma \frac{\left(\frac{4}{3}\pi\right)^2 (R_{01}^3 \rho_1)^2 \left(\frac{R_{02}}{R_{01}}\right)^3 \left(\frac{\rho_2}{\rho_1}\right)}{R_{01}^2} \cdot \frac{1}{\left(1 + \frac{\Delta r}{R_{01}}\right)^2}, \quad (3)$$

где $\frac{\Delta r}{R_{01}} = \delta$ – относительное расстояние (в масштабе

R_{01}) отсчитываемое от поверхности первого тела.

Первый множитель в выражении (3) есть ничто иное как сила гравитационного взаимодействия вблизи поверхности тела, создающего гравитационное поле. Обозначим ее F_0 . Учитывая то, что величины описывающие ее величину постоянные и независимые от

$\delta = \frac{\Delta r}{R_{01}}$, будем считать ее постоянной величиной.

$$F(r) = F_0 \frac{1}{(1 + \delta)^2} \quad (4)$$

Коэффициент жесткости гравитационного взаимодействия $K(r)$, двух взаимодействующих тел, можно найти из известных соотношений:

$$\frac{dF(r)}{dr} = -K(r); \quad F = K(r)\Delta r \quad (5)$$

Будем считать, что приращение коэффициента жесткости $\Delta K(\delta)$ есть функция пространственной координаты. Перейдем к приращениям переменных величин, входящих в выражения (4) и (5), запишем их в безразмерном виде.

$$F^0(\delta) = \frac{1}{(1 + \delta)^2}; \quad F^0(\delta) = (1 + \Delta K^0(\delta))\delta \quad (6)$$

$$\frac{dF^0(\delta)}{d\delta} = -\frac{2}{(1 + \delta)^3};$$

$$\frac{F^0(\delta)}{d\delta} = \left[\frac{d\Delta K^0(\delta)}{d\delta} \delta + (1 + \Delta K^0(\delta)) \right] \quad (7)$$

Приравняв правые части выражений (7) и используя выражение (6), после преобразований, получим дифференциальное уравнение зависимости изменения коэффициента жесткости связей двух взаимодействующих тел от безразмерного расстояния δ .

$$\frac{d\Delta K^0(\delta)}{d\delta} + K^0(\delta) \left(\frac{1 + 3\delta}{1 + \delta} \right) = 0, \quad (8)$$

где 0 – означает, что величина безразмерная (относительная).

Решив уравнение (8) для случая $\delta = 0$,

$\Delta K^0(\delta) = 0$, получим:

$$K^0(\delta) = (1 + \delta)^2 e^{-2\delta} \quad (9)$$

или

$$\Delta K^0(\delta) = (1 + \delta)^2 e^{-2\delta} - 1 \quad (10)$$

Зависимость относительного коэффициента жесткости межгравитационных взаимодействий от относительного расстояния δ показано на рис. 1.

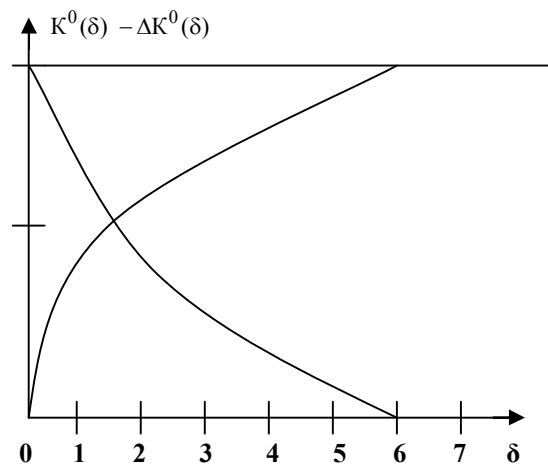


Рис. 1. Изменение относительного коэффициента жесткости гравитационного поля от относительного расстояния δ .

По аналогии с гравитационным полем, введем коэффициент жесткости электростатического взаимодействия зарядов (3). Согласно законов электростатики заряды сосредотачиваются на поверхности взаимодействующих тел, поэтому запишем силу электростатического взаимодействия зарядов через поверхностную плотность зарядов σ_1 , σ_2 и их размеры R_{01} , R_{02} . В результате получим силу взаимодействия зарядов в виде:

$$F_3(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{(4\pi)^2 (\sigma_1 R_{01}^2)^2 (\frac{\sigma_2}{\sigma_1}) (\frac{R_{02}}{R_{01}})^2}{\epsilon R_{01}^2} \cdot \frac{1}{(1+\delta)^2} \quad (11)$$

или в безразмерном виде:

$$F_3^0(\delta) = \frac{1}{(1+\delta)^2}; \quad F_3^0(\delta) = (1 + \Delta K_3^0(\delta))\delta \quad (12)$$

$$\frac{dF_3^0(\delta)}{d\delta} = -\frac{2}{(1+\delta)^3};$$

$$\frac{dF_3^0(\delta)}{d\delta} = \left[\frac{d\Delta K_3^0(\delta)}{d\delta} \delta + (1 + \Delta K_3^0(\delta)) \right] \quad (13)$$

Из соотношений (12) и (13) следует, что значение коэффициента жесткости электростатического взаимодействия зарядов будет описываться теми же выражениями (9) и (10), что и для гравитационного взаимодействия.

При разработке математической модели взаимодействия положительного заряда с отрицательными зарядами распределенными по определенным орбитам радиусы, которых вычисляются согласно соотношения [4]:

$$r_{nl} = \frac{a_0}{2Z} [3n^2 - l(l-1)], \quad (14)$$

где r_{nl} - радиус соответствующих орбит;

$$a_0 = \frac{\epsilon h^2}{4\pi m_e e^2} = 0,529 \text{ \AA} - \text{первая Боровская орбита};$$

Z - зарядовое число данного атома;

$n = 1, 2, 3, 4, \dots$ - главное квантовое число;

$l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$ - азимутальное квантовое число.

Значение радиуса ядра r_n согласно квантовой физики [4], зависит от массового числа соответствующего атома.

$$r_n = 1,2 \cdot 10^{-15} (A)^{\frac{1}{3}} \quad (15)$$

где A - массовое число данного атома.

Поэтому при расчете коэффициента жесткости положительного заряда необходимо отсчитывать его от $r_0 = r_n$. Для электронов находящихся на различных орбитах (14) необходимо учитывать экранировку положительного заряда ядра каждой из электронных оболочек. Отсчет коэффициента жесткости электростатического взаимодействия должен отсчитываться от соответствующего радиуса r_{nl} электронной оболочки, при этом σ_{nl} - поверхностная плотность заряда каждой из оболочек должен вычисляться следующим образом.

$$\sigma_{nl} = \frac{n_{nl}}{4\pi r_{nl}^2} \quad (16)$$

Значение σ_{nl} , n_{nl} , r_{nl} для железа ${}^A_Z\text{Fe}$, где $A = 56$, $Z = 26$, приведены в таблице 1.

Таблица 1.

Главное квантовое число $n=1,2,3,4$	Азимутальное квантовое число $l=0,1,2,\dots,n-1$	Радиус оболочки r_{nl}	Заряд оболочек n_{nl} , Кл	Поверхностная плотность σ_{nl} , Кл/м ²
1	0	0,0305Å	2e	2759,1
2	0	0,2307Å	4e	95,75
2	1	0,1923Å	4e	137,9
3	0	0,5192Å	4e	18,90
3	1	0,4807Å	4e	22,05
3	2	0,4038Å	6e	31,25
4	0	0,9230Å	2e	2,9

Радиус ядра железа имеет размер $r_n = 4,6 \cdot 10^{-15}$ м и по сравнению с первой Боровской орбитой меньше ее в 663 раза.

При разработке математической модели взаимодействия ядра и окружающих его электронов и взаимодействие электронных оболочек между собой необходимо выбирать масштаб отсчета от радиуса ядра r_n .

Построение математических моделей взаимодействия атомов и молекул в структурных единицах [3] удобнее пользоваться понятием жесткости связей различных взаимодействий (гравитационного, электростатического). При этом нужно учитывать, что результирующая жесткость связей будет являться векторной суммой каждого из взаимодействий. Такой подход даст возможность получить результирующий коэффициент жесткости связей при одновременном существовании в данном пространстве структурной единицы вещества нескольких физических полей. При этом необходимо учитывать знак коэффициента взаимодействия. Результирующий коэффициент жесткости как функцию координаты запишется так:

для сферической симметрии

$$K(r) = \sum_1^n K_{0ik} K_{ik}^0(\delta);$$

для декартовых координат

$$\begin{aligned} K_x(x) &= \sum_1^n K_{0ik} K_{ik}^0(\delta) \cos(\vec{r}_{ik} \vec{x}), \\ K_y(y) &= \sum_1^n K_{0ik} K_{ik}^0(\delta) \cos(\vec{r}_{ik} \vec{y}), \\ K_z(z) &= \sum_1^n K_{0ik} K_{ik}^0(\delta) \cos(\vec{r}_{ik} \vec{z}), \end{aligned} \quad (17)$$

где $\cos(\vec{r}_{ik} \vec{x})$, $\cos(\vec{r}_{ik} \vec{y})$, $\cos(\vec{r}_{ik} \vec{z})$ - направляющие косинусы системы координат x, y, z ;

K_{0ik} - значение коэффициента жесткости в точке начала отсчета относительной координаты δ_{ik} ;

$K_{ik}^0(\delta)$ - безразмерный коэффициент жесткости связей i -го k -го взаимодействия.

При записи уравнений динамики межатомного взаимодействия атомов и молекул необходимо знать коэффициент жесткости связей (17), который описывает влияние действующих полей в данном объеме. Коэффициент жесткости межатомных связей используется при расчете деформации твердых тел [5]. При математическом моделировании поляризации атомов и молекул под действием электростатических полей использование коэффициента жесткости электростатической

связи между соответствующими зарядами, что позволяет упростить решение.

ЛИТЕРАТУРА

1. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. — М : Мир. 1968. 366 с.
2. Голубев В. К., Селезнев А. А. Использование двух частных потенциалов взаимодействия для молекулярно-динамического расчета металлов. Химическая физика. 2002. Т. 21. 61 с..
3. Мочалов А. А., Гайша А. А., Евфимко К. Д. Динамика деформации структурной единицы твердого тела от внешнего воздействия. Журнал нано- и электронной физики. Т. 1. №1. 2009. СумГУ.
4. Берклевский. Курс физики. Т. IV. Квантовая физика. — М : Наука. 1977. 415 с.
5. Мочалов А. А., Евфимко К. Д., Гайша А. А. Моделирование процесса распространения продольных колебаний в твердом теле на основе задания межатомного потенциала взаимодействия. — Ж : Металлы и литье Украины. №11—12. 2009. 58 с.

пост.26.02.15