

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Институт прикладной математики и механики
Высшая школа теоретической механики

Работа допущена к защите
Директор высшей школы
_____ А.М. Кривцов
«__» _____ 2021 г.

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА

МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ ОДНОАТОМНЫХ И ДВУХАТОМНЫХ ЦЕПОЧЕК С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДЕФОРМИРУЕМЫХ ЗЁРЕН

по направлению подготовки

01.03.03 – Механика и математическое моделирование
профиль

01.03.03_01 Механика и математическое моделирование сред с
микроструктурой

Выполнил:
Студент гр. 3630103/70101
Руководители:
доцент, к.ф.-м.н.

М.С. Воеводкина
Е.А. Подольская

Санкт-Петербург
2021 г.

РЕФЕРАТ

На 20 страниц, 13 рисунков, 15 источников.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: КРУПНОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, ДЕФОРМИРУЕМЫЕ ЗЕРНА, МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА.

Тема выпускной квалификационной работы: «Моделирование упругих свойств одноатомных и двухатомных цепочек с использованием деформируемых зерен».

Данная работа посвящена разработке и анализу моделей одноатомных и двухатомных цепочек с использованием метода деформируемых зерен. Основные результаты заключаются в нахождении наиболее подходящего метода для моделирования одноатомных и двухатомных цепочек атомов с целью сокращения вычислительных расчетов.

Работа состоит из введения, 4 глав, заключения и списка использованной литературы. Во введении описана актуальность применения метода крупных зерен и его особенности, сформулированы цель и задачи данной работы. В первой главе описано построение модели одноатомной цепочки для жестких и деформируемых зерен и их сравнение. Во второй главе приведено два способа моделирования цепочки атомов, состоящей из трехатомных зерен. В третьей главе объектом исследования является двухатомная цепочка атомов, моделирование которой сводится либо к одноатомной, либо к двухатомной цепочке, дан сравнительный анализ моделей. В четвертой главе подведены общие итоги, основанные на результатах проведенных исследований.

ABSTRACT

This work includes 20 pages, 13 figures and 15 references.

KEYWORDS: COARSE-GRAINED MODELING, MULTISCALE MODELING, MOLECULAR DYNAMICS, PHONON SPECTRUM, ELASTICITY.

Title: Modeling the elastic properties of monoatomic and diatomic chains using deformable grains.

In this work, results of development and analysis of models of monoatomic and diatomic chains using the method of deformable grains that was developed based on assumption of homogenous deformation are presented.

This report contains Introduction, four Chapters, Conclusions, and References. The introduction describes the relevance of the application of the method of large grains and its features, formulates the goal and objectives of this work. The first chapter describes the construction of a model of a monoatomic chain for rigid and deformable grains and their comparison. In the second chapter, two methods of modeling a chain of atoms consisting of triatomic grains are presented. In the third chapter, the object of research is a diatomic chain of atoms, the modeling of which is reduced to either a monoatomic or a diatomic chain; a comparative analysis of the models is given. The fourth chapter summarizes the general results based on the results of the research.

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО
Институт прикладной математики и механики

УТВЕРЖДАЮ

Директор

Высшей школы теоретической механики

А.М.Кривцов

« » _____ 2021 г.

ЗАДАНИЕ

по выполнению выпускной квалификационной работы

студенту _____ Воеводкиной Марии Сергеевне, 3630103/70101
_____ фамилия, имя, отчество (при наличии), номер группы

1. Тема работы: Моделирование упругих свойств одноатомных и двухатомных цепочек с использованием деформируемых зерен

2. Срок сдачи студентом законченной работы: 14.06.2021

3. Исходные данные по работе: Научные статьи по теме работы, учебные пособия по использованию пакета программирования Maple, учебники по физике твердого тела, законы баланса сил, уравнение Лагранжа, уравнения кинетической и потенциальной энергии, граничные условия Борна-Кармана, алгоритм построения дисперсионных кривых

4. Содержание работы (перечень подлежащих разработке вопросов): _____

1. Изучить метод деформируемых зерен.

2. Разработать алгоритм расчета дисперсионных кривых, применив два различных метода для их построения, на примере одноатомных и двухатомных цепочек.

3. Написать программу для расчета и построения дисперсионных кривых с помощью пакета Maple.

4. Провести анализ и сравнение результатов реализации различных моделей одноатомных и двухатомных цепочек, выбор наилучшего метода для их моделирования.

5. Перечень графического материала (с указанием обязательных чертежей): отсутствует.

6. Консультанты по работе: отсутствуют

7. Дата выдачи задания 01.02.2021

Руководитель ВКР _____ Е.А. Подольская _____
(подпись) инициалы, фамилия

Задание принял к исполнению 01.02.2021
(дата)

Студент _____ М.С. Воеводкина _____
(подпись) инициалы, фамилия

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
ГЛАВА 1. МОДЕЛИ ОДНОАТОМНОЙ ЦЕПОЧКИ ДЛЯ ЗЕРЕН, СОСТОЯЩИХ ИЗ ДВУХ АТОМОВ ИСХОДНОЙ ЦЕПОЧКИ.	6
1.1 Жесткие зерна	6
1.2 Деформируемые зерна.....	8
ГЛАВА 2. МОДЕЛИ ОДНОАТОМНОЙ ЦЕПОЧКИ ДЛЯ ЗЕРЕН, СОСТОЯЩИХ ИЗ ТРЕХ АТОМОВ ИСХОДНОЙ ЦЕПОЧКИ	11
2.1 Первый метод	11
2.2 Второй метод	12
ГЛАВА 3. МОДЕЛИ ДВУХАТОМНОЙ ЦЕПОЧКИ	14
3.1 Одноатомная результирующая цепочка	14
3.2 Двухатомная результирующая цепочка	15
ГЛАВА 4. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ	17
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	18
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ	19

ВВЕДЕНИЕ

Одной из основных задач вычислительной механики материалов остается преодоление разрыва в масштабе длины и времени между вычислительными и экспериментальными методами исследования микроструктуры материалов. Во многих случаях нас не интересует поведение одиночных атомов, а интересует поведение системы в более крупном масштабе. В этих случаях мы можем расширить возможности моделирования на более крупные системы и более длительные масштабы времен, используя более грубый подход. Осуществить это можно, сгруппировав несколько атомов и представив их как отдельные частицы – “зёрна” или “псевдоатомы” [6]. Отметим, что данное решение позволяет сократить количество степеней свободы и рассматриваемых взаимодействий, так как не учитывается внутренняя структура зерна, а это в свою очередь ускоряет процесс моделирования и экономит вычислительные ресурсы. Широкое использование данного метода получил при моделировании биомолекулярных систем [10] в том числе биомембраны [14] и белки [7, 9]; жидкие кристаллы [5, 15], углеродные нанотрубки [11] и т. д.

В данной работе используются два принципа. Во-первых, зерна выбраны как совокупность атомов в исходной цепочке, за счет ее периодичности можно варьировать размер зерен. Благодаря этому получившаяся система может содержать не только зерна, но и отдельные атомы в интересующих областях. Во-вторых, зерна можно рассматривать как жесткие, а можно как деформируемые. Однако несмотря на то, что жесткие зерна могут успешно использоваться для большого класса задач, в некоторых случаях они приводят к неправильному описанию свойств материала. Например, если решетка растягивается, то жесткое зерно не может удлиниться, поэтому вся деформация передается на связи между зёрнами, в результате материал разрушается преждевременно [2]. Метод деформируемых зерен позволяет задать упругость зерен так, чтобы общая деформация равномерно распределялась в цепочке, для избегания преждевременного разрушения материала [13]. Зерна взаимодействуют посредством сил, действующих на поверхностные атомы. В настоящей работе данный метод используется для изучения продольных колебаний одноатомных и двухатомных цепочек. Для каждой модели строятся дисперсионные кривые, после чего они сравниваются с кривыми для исходной цепочки, чтобы определить возможную область применения модели.

ГЛАВА 1. МОДЕЛИ ОДНОАТОМНОЙ ЦЕПОЧКИ ДЛЯ ЗЕРЕН, СОСТОЯЩИХ ИЗ ДВУХ АТОМОВ ИСХОДНОЙ ЦЕПОЧКИ

Применим предложенный метод к исследованию одномерного движения цепочки атомов с массой m , связанных упругими пружинами с жесткостью c . Предположим, что в этой цепочке находится N атомов, а ее период равен a .

Уравнения движения определяются только продольными смещениями атомов, т. к. рассматривается одномерная задача. Также условимся рассматривать взаимодействия только ближайших атомов.

Как упоминалось ранее, зерна можно рассматривать как жесткие, а можно как деформируемые. Построим модель для каждого случая и сравним их фононные спектры для проверки корректности описания цепочки атомов.

1.1 Жесткие зерна

Обозначим за смещение n -ого атома u_n , а u_{n+p} за смещение атома, отстоящего на p узлов от него. Смещения атомов вправо от положения равновесия примем как положительные, а влево – отрицательные.

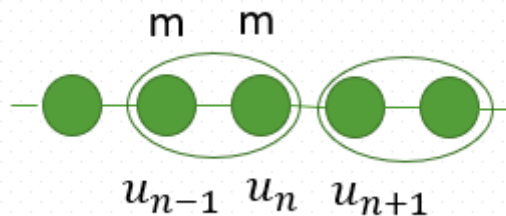


Рисунок 1 Схематичное изображение цепочки из двухатомных зерен

Кроме этого, используются периодические граничные условия Борна-Кармана. Для линейной цепочки смысл заключается в соединении ее противоположных концов с помощью еще одной пружинки, т. е. соблюдаются равенства [1]:

$$\begin{cases} u([N + 1]a) = u(a) \\ u(Na) = u(0) \end{cases}$$

Искать решения уравнений будем в виде:

$$u(na, t) = C_1 e^{i(nK - wt)}$$

где $K = ka$, а k – волновой вектор.

Тогда из этого вытекает требование:

$$k = \frac{2\pi n}{a N} \quad (1)$$

Тогда запишем уравнение движения n -ого атома в исходной цепочке. На него действуют силы со стороны двух атомов: $(n + 1)$ -ого и $(n - 1)$ -ого:

$$F_{n,n+1} = -c(u_n - u_{n+1})$$

$$F_{n,n-1} = -c(u_n - u_{n-1})$$

Таким образом уравнение движения n -ого атома:

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = c(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1})$$

Затем объединим два атома в зерно, таким образом, чтобы сохранялись упругие свойства исходной цепочки. Получим одномерную цепочку с массой зерна $M = 2m$ и новой жесткостью \tilde{c} . Перейдем к уравнению с новыми параметрами для цепочки, состоящей из двухатомных зерен:

$$M \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \tilde{c}(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1})$$

Рассмотрим жесткости исходной и получившейся цепочки. Учтем, что начальные жесткости пружин равны между собой, а соединение пружин последовательное.

$$\frac{1}{c_{\text{общ}}} = \underbrace{\frac{1}{c} + \frac{1}{c} + \dots}_{N}$$

N

При объединении атомов в двухатомные зерна количество частиц уменьшается в два раза, в соответствии с этим находим связь между c и \tilde{c} .

$$c_{\text{общ}} = \frac{c}{N} = \frac{2\tilde{c}}{N}$$

Также подставляем решение в виде экспоненты, приравниваем к нулю выражение перед коэффициентом C_1 и находим частоту ω .

$$\omega = - \frac{2c(\cos K - 1)}{m}$$

Строим дисперсионную кривую для жестких зерен.

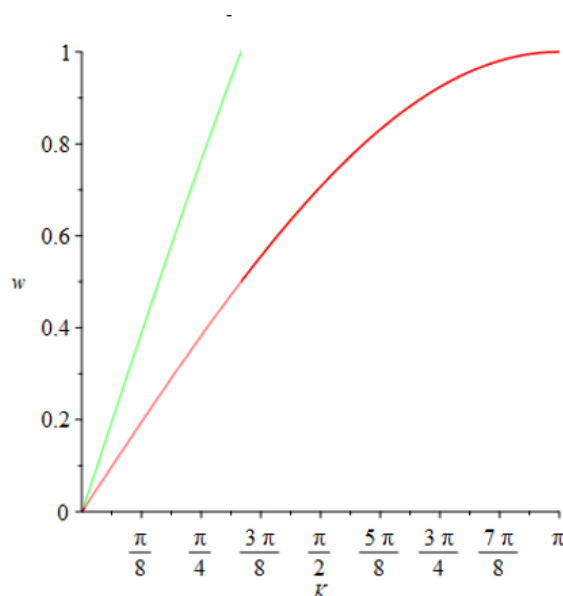


Рисунок 2. Дисперсионные кривые для жестких зерен (красная линия) и исходной цепочки (зеленая линия).

Из графика можно видеть, что дисперсионные кривые не совпадают даже для длинных волн, следовательно использовать данную модель для решения динамических задач не стоит, так как динамические свойства, исследуемые с помощью фононных спектров, могут существенно различаться, однако для решения статических задач данную модель можно использовать.

1.2 Деформируемые зерна

Попробуем вывести уравнения движения для одномерной цепочки, состоящей из деформируемых зерен. Мы заменяем многоатомное зерно на двухатомное с двумя псевдоатомами, расположенными по краям зерна [12], т. е. массы атомов перераспределяются. Для того, чтобы это осуществить есть два способа, мы используем способ с сохранением массы и размера зерна – модель эффективного размера. В результате мы получаем эффективную модель цепочки, уравнения движения определяются смещениями псевдоатомов u_n и v_n .

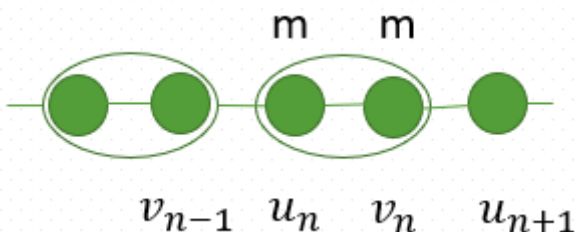


Рисунок 3. Схематичное изображение цепочки из двухатомных зерен

Перейдем к новым переменным (обобщенным координатам) и составим уравнений Лагранжа в виде:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T_i}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial T_i}{\partial q_i} = - \frac{\partial \Pi_i}{\partial q_i}$$

где q_i – обобщенная координата, T_i – кинетическая энергия зерна, Π_i – потенциальная энергия зерна.

В нашем случае уравнения для потенциальной и кинетической энергии зерна будут иметь вид:

$$\Pi = \frac{c}{2} ((u_n - v_{n-1})^2 + (v_n - u_n)^2 + (u_{n+1} - v_n)^2)$$

$$T = \frac{m}{2} (\dot{u}_n^2 + \dot{v}_n^2)$$

Замена переменных для n -ого зерна представляет собой переход от смещений u_n и v_n к перемещению центра масс r_n и удлинению зерна ε_n :

$$\begin{cases} r_n = \frac{1}{2}(u_n + v_n) \\ \varepsilon_n = u_n - v_n \end{cases}$$

После подстановки получим следующий вид уравнений Лагранжа:

$$\begin{cases} 2m\ddot{r}_n = \frac{1}{2}c[\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_{n-1}] + c[r_{n+1} - 2r_n + r_{n-1}] \\ m\ddot{\varepsilon}_n = c[r_{n-1} - r_{n+1}] - \frac{c}{2}[\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_{n-1} + 6\varepsilon_n] \end{cases}$$

Решения переписанных уравнений можно найти в виде экспоненты:

$$\begin{cases} r_n(t) = C_1 e^{i(nK - \omega t)} \\ \varepsilon_n(t) = C_2 e^{i(nK - \omega t)} \end{cases}$$

После подстановки r_n и ε_n система однородных уравнений будет иметь решение при обращении в нуль детерминанта матрицы, составленного из их коэффициентов. Уравнение выполняется при двух значениях ω . Каждому значению K соответствует два решения, как и должно быть при двух степенях свободы. Увидим это, построив дисперсионные кривые.

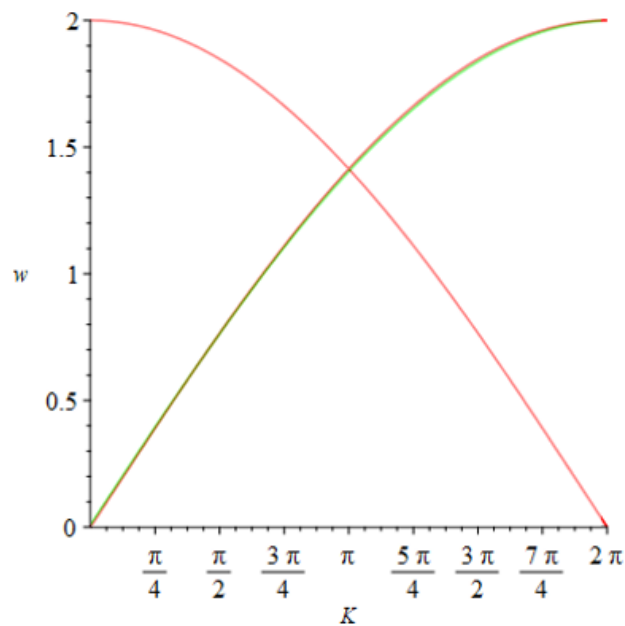


Рисунок 4. Дисперсионные кривые для деформируемых зерен (красная линия) и исходной цепочки (зеленая линия).

Проведя сравнения графиков, получившихся для жестких и деформируемых зерен, видим, что деформируемые зерна ложатся на кривую для исходной цепочки лучше, чем жесткие. Легко показать, что если двухатомное зерно содержит два атома исходной решетки, то модели совпадают, и можно получить точное решение, как и ожидалось, поскольку комбинация акустического и оптического спектров двухатомных упругих зерен дает полную акустический спектр исходной цепочки. Данный вывод позволяет продолжить изучение деформируемого зерна и расширить количество атомов в нем до трех.

ГЛАВА 2. МОДЕЛИ ОДНОАТОМНОЙ ЦЕПОЧКИ ДЛЯ ЗЕРЕН, СОСТОЯЩИХ ИЗ ТРЕХ АТОМОВ ИСХОДНОЙ ЦЕПОЧКИ

2.1 Первый метод

Рассмотрим теперь двухатомное зерно, которое содержит три атома исходной решетки.

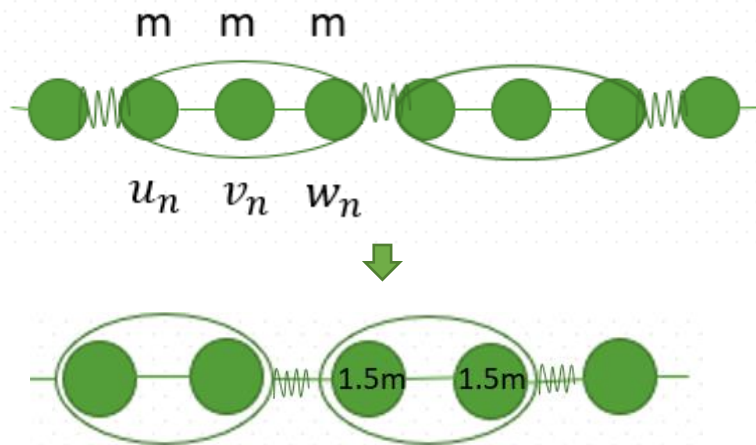


Рисунок 5. Схематичное изображение цепочки из трехатомных зерен

Строить график дисперсионных кривых мы будем аналогично тому, как они строятся для двухатомной линейной цепочки одинаковых атомов, которые связаны пружинками с чередующейся жесткостью. В отличие от двухатомного зерна, здесь добавляется новое смещение третьего атома. Для каждого атома рассчитывается потенциальная энергия (учтем, что для сохранения упругих свойств жесткость пружин между атомами в зерне в два раза меньше, чем с соседними зернами). Тогда распишем потенциальную энергию в виде [1]:

$$\Pi = \frac{c_1}{2} \sum_n ([u_n - v_n]^2 + [v_n - w_n]^2) + \frac{c_2}{2} \sum_n ([w_n - u_{n+1}]^2 + [u_n - w_{n-1}]^2)$$

Где через u_n обозначено смещение первого атома в зерне, v_n и w_n – смещение второго и третьего атома.

Запишем уравнения движения:

$$\begin{cases} m\ddot{u}_n = -\frac{\partial \Pi}{\partial u_n} = -c_1[u_n - v_n] - c_2[u_n - w_{n-1}] \\ m\ddot{v}_n = -\frac{\partial \Pi}{\partial v_n} = -c_1[v_n - u_n] - c_2[v_n - w_n] \\ m\ddot{w}_n = -\frac{\partial \Pi}{\partial w_n} = -c_1[w_n - v_n] - c_2[w_n - u_{n+1}] \end{cases}$$

Снова ищем решение в виде волны:

$$u_n(t) = C_1 e^{i(nK - \omega t)}$$

$$v_n(t) = C_2 e^{i(nK - \omega t)} \quad w_n(t) = C_3 e^{i(nK - \omega t)}$$

Здесь C_1, C_2, C_3 – требующие определения постоянные, отношение которых дает относительные амплитуды и фазу колебаний атомов в каждой элементарной ячейке. Периодическое граничное условие Борна-Кармана приводит к эквивалентным значениям, определяемым формулой (1).

Распределяя массу трех атомов, мы заменяем трехатомное зерно на двухатомное с псевдоатомами, расположенными по краям зерна, поэтому на графике фононных спектров будет две дисперсионные кривые, как и степеней свободы.

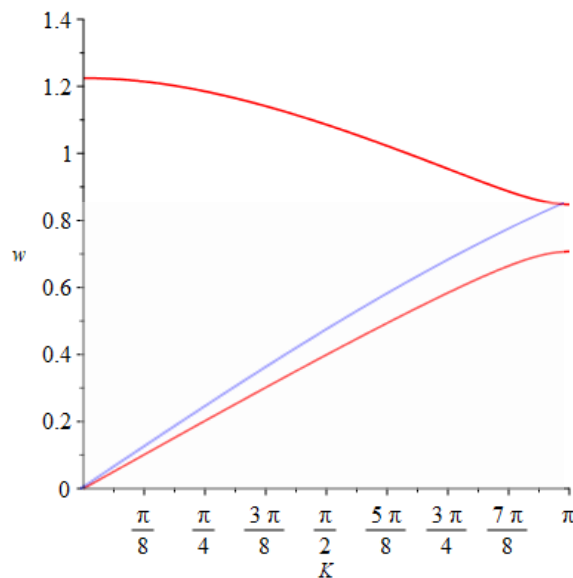


Рисунок 6. Дисперсионные кривые для трехатомных деформируемых зерен, построенные первым методом (красная линия), и для исходной цепочки (синяя линия).

2.2 Второй метод

Во втором методе используем аналогичную процедуру, которую использовали для деформируемых зерен в первой главе. Однако в данном случае с появлением третьего перемещения, мы допускаем, что центральный атом в зерне движется как центр масс зерна. Следовательно замена будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{cases} r_n = \frac{1}{3}(u_n + v_n + w_n) \\ \varepsilon_n = w_n - u_n \end{cases}$$

где $v_n = r_n$. После этого составляем систему уравнений Лагранжа и проделываем те же самые операции, после чего получаем графики дисперсионных кривых.

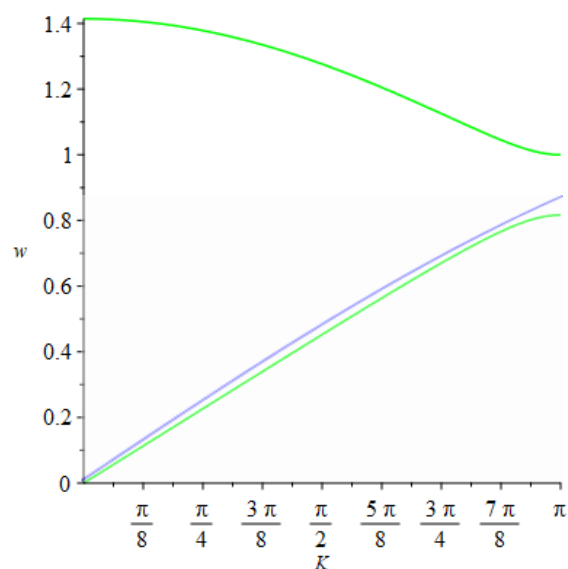


Рисунок 7. Дисперсионные кривые для трехатомных деформируемых зерен, построенные вторым методом (зеленая линия), и для исходной цепочки (синяя линия)

Данный случай демонстрирует метод деформируемых зерен более наглядно, т. к. когда мы рассматривали зерно, состоящее из двух атомов исходной цепочки, количество степеней свободы оставалось прежним, а основная цель метода – его понижение. Существует также аналог первого метода – модель эффективной инерции, описание которого есть в статье [12]. Данному случаю характерно сохранение всех инерционных характеристик зерна. Обратим внимание, что результаты моделирования вторым методом лежат точно между эффективными моделями. Результаты, полученные вторым методом, оказались наиболее близкими к результатам исходной цепи.

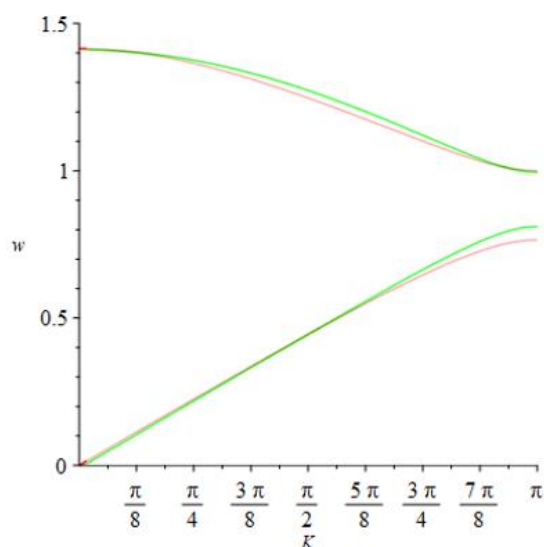


Рисунок 8. Дисперсионные кривые для трехатомных деформируемых зерен, построенные первым (красная линия) и вторым (зеленая линия) методом

ГЛАВА 3. МОДЕЛИ ДВУХАТОМНОЙ ЦЕПОЧКИ

В заключение данной работы применим предложенный метод моделирования к сложным цепочкам. Объектом исследования первоначально будет являться двухатомная цепочка, состоящая из чередующихся атомов, показанная на рис. 9.



Рисунок 9. Схематичное представление двухатомной цепочки

Существует два способа объединения атомов в зерна: объединение либо четного, либо нечетного количества атомов. В первом случае результирующая цепочка будет одноатомной, тогда как во втором случае она также будет двухатомной, как и исходная.

Далее мы рассматриваем двухатомную цепочку, в которой мы удваиваем массы четных атомов по сравнению с исходной одноатомной цепочкой, а нечетные атомы остаются прежней массы, то есть для нечетных атомов $m_i = m$, а для четных атомов $m_i = 2m$. Следуя аналогичной процедуре, мы получаем фононные спектры для обоих типов зерен.

3.1 Одноатомная результирующая цепочка



Рисунок 10. Дисперсионные кривые для трехатомных деформируемых

На рисунке 11 показаны результаты для одноатомной результирующей цепи. Используются два способа моделирования, описанных ранее.

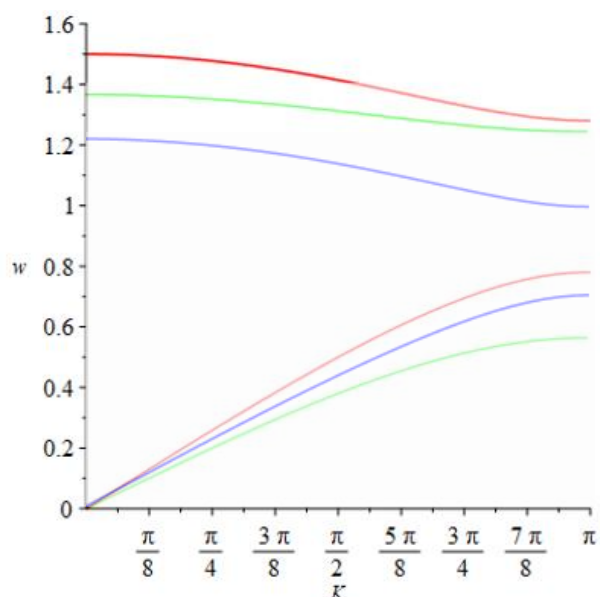


Рисунок 11. Дисперсионные кривые для одноатомной результирующей цепочки. Первый (красная линия) и второй метод (зеленая линия), исходная цепочка (синяя линия).

Как и в случае исходной одноатомной цепи, цепочка с двумя атомами на зерно обеспечивает наилучшее соответствие. Видим, что ветви кривых для второго метода лежат чуть ниже ветвей, получившихся первым методом. Сравнив с исходной цепочкой, видим, что результаты второго метода расположены к результатам исходной цепочки ближе.

3.2 Двухатомная результирующая цепочка



Рисунок 12. Дисперсионные кривые для трехатомных деформируемых

На рисунке 13 показаны результаты двух методов для «двухатомной» цепи СГ. Эта цепочка имеет схожие черты в части акустических ветвей, однако для оптических ветвей есть различия.

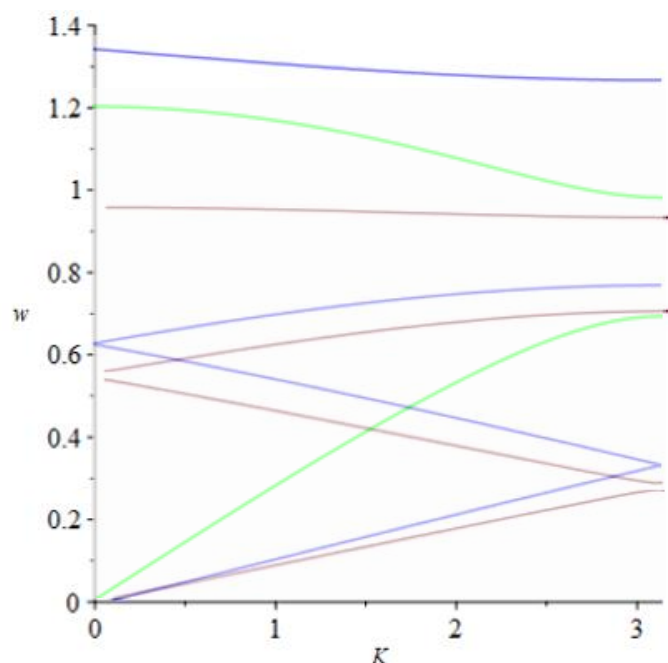


Рисунок 13. Дисперсионные кривые для двухатомной результирующей цепочки. Первый метод (синяя линия), второй метод (красная линия) и исходная кривая (зеленая линия)

Оптические ветви лежат ближе к аналитическому решению, чем ветви одноатомной цепочки. Дисперсионные кривые сравниваются с аналитическим решением для двухатомной цепочки, определенным на основе соответствующего числа атомов, так что параметры цепочки равны. Тем самым можно сделать вывод о том, что двухатомная результирующая цепочка в случае сложной цепочки больше подходит для ее моделирования, так как дисперсионные кривые ложатся на графики исходной цепочки лучше, чем графики, получившиеся в результате моделирования одноатомной результирующей цепочки. Так же дисперсионные кривые показывают, что чем больше размер зерна, тем длиннее волны, которые можно точно описать. Кроме того, акустические ветви мы можем более точно описать, чем оптические, с которыми возникают сложности.

ГЛАВА 4. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ

Таким образом, в ходе работы были рассмотрены одноатомная цепочка и двухатомная цепочка, а также была разработана модель с использованием деформируемых зерен, позволяющая перейти от сложной цепочки к более простой, за счет уменьшения количества степеней свободы [12]. Рассмотрено два вида зерен и два способа описания взаимодействия между ними.

В качестве первого шага метод был применен для изучения динамики одноатомных цепочек в одномерном пространстве. Выведены общие уравнения динамики цепочки, состоящей из жестких и деформируемых зерен. Было показано, что эффективные упругие свойства, полученные с использованием модели деформируемых зерен, полностью соответствуют свойствам атомистической модели. В случае крупных зерен эти спектры были получены по оригинальной методике. Динамику одноатомных и двухатомных цепочек исследовали на зернах, содержащих от 2 до 3 атомов. Для 3-атомных зерен модель полностью ограничена двумя эффективными моделями инерции и размера, что доказывает применимость разработанного метода для моделирования цепочек атомов. Второй метод с использованием уравнений Лагранжа оказался наилучшим, так как результаты, полученные с помощью него, оказались наиболее приближенными к исходной цепочке.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках выполнения работ по моделированию и анализу одноатомных и двухатомных цепочек с использованием метода деформируемых зерен были решены следующие задачи:

1. Обзор литературы и изучение метода деформируемых зерен.
2. Разработка алгоритма расчета дисперсионных кривых для выбранного метода.
3. Написание программы для расчета и построения дисперсионных кривых с помощью пакета Maple [2, 4].
4. Сравнение и анализ полученных результатов, выбор наилучшего метода для моделирования одноатомных и двухатомных цепочек

Было установлено, что использование данного метода при построении зеренной модели позволяет достаточно точно описать динамические процессы, происходящие в цепочке атомов. Необходимо отметить, что используются допущения, позволяющие упростить модель цепочки, такие как однородность деформации, одномерность движения и рассмотрение взаимодействия ближайших соседей.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела: учебное пособие. - М.: Мир, 1979. - 399 с.
2. Кирсанов М. Н., Математика и программирование в Maple: учебное пособие – Москва: Ай Пи Ар Медиа, 2020. – 160 с.
3. Лурье А.И. Теория упругости. М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1970. — 940 с.
4. Матросов А.В. Основы работы в Maple V Reí. 4.СПб.: СПбГУВК, 1999.100с.
5. Care C., Cleaver D., Computer simulation of liquid crystals, Reports on progress in physics 68 (11) (2005) 2665.
6. Chen Y., Zimmerman J., Krivtsov A., McDowell D. L., Assessment of atomistic coarse-graining methods, International Journal of Engineering Science 49 (12) (2011) 1337–1349.
7. Gautieri A., Russo A., Vesentini S., Redaelli A., Buehler M. J., Coarse grained model of collagen molecules using an extended MARTINI force field, Journal of Chemical Theory and Computation 6 (4) (2010) 1210–1218.
8. Gerberich W., Tadmor E. B., Kysar J., Zimmerman J. A., Minor A. M., Szlufarska I., Amodeo J., Devincre B., Hintsala E., Ballarini R., Case studies in future trends of computational and experimental nanomechanics, Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films 35 (6) (2017) 060801
9. Kmiecik S., Gront D., Kolinski M., Wieteska L., Dawid A. E., Kolinski A., Coarse-grained protein models and their applications, Chemical reviews 116 (14) (2016) 7898–7936.
10. Noid W. G., Perspective: Coarse-grained models for biomolecular systems, The Journal of chemical physics 139 (9) (2013) 09B201
11. Ostanin I., Dumitric̃a T., Eibl S., Rũde U., Size-independent mechanical response of ultrathin carbon nanotube films in mesoscopic distinct element method simulations, Journal of Applied Mechanics 86 (12).
12. Panchenko A.Yu., Podolskaya E.A., Berinskii I.E., Coarse-Grained Modeling with Hierarchical Deformable and Rigid Assemblages (HiDRA). International Journal of Engineering Science 166 (2021) 103514
13. Panchenko A. Y., Podolskaya E., Berinskii I., Coarse–grained model based on rigid grains interaction for single layer molybdenum disulfide, Mechanics Research Communications 105 (2020) 103515
14. Shi X., Kong Y., Gao H., Coarse grained molecular dynamics, theoretical studies of carbon nanotubes entering cell membrane, Acta Mechanica

Sinica 24 (2) (2008) 161–169.

15. Wilson M. R., Progress in computer simulations of liquid crystals, *International Reviews in Physical Chemistry* 24 (3-4) (2005) 421–455.