Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Институт прикладной математики и механики

Кафедра теоретической механики

**ОТЧЁТ ПО НИР**

студент гр. 53604/1

Гладков И.О.

науч. рук.

Панченко А.Ю.

Санкт-Петербург 2013

**Постановка**

Была поставлена задача описания твердотельного фазового перехода в однокомпонентном металле на атомарном уровне.

Подобная задача на данный момент не имеет общего удовлетворительного решения, таким образом требуется разработать некоторый обобщающий подход.

Такая проблема, безусловно, является *актуальной*. Тем не менее, по мере продвижения к некоторому результату задача должна быть конкретизирована.

**Анализ**

Для описания геометрии преобразований кристаллической решётки в металле с физических позиций представления классической зонной теории не приспособлены. Вместо неё в качестве основы следует использовать более развитые теории, вовлекающие в рассмотрение детальную структуру валентных и подвалентных уровней [2]. Такие теории могут содержать некоторые элементы квантово-механических моделей, успешно описывающих геометрию молекул.

Соответственно, для решения поставленной задачи не подойдут эмпирические и полуэмпирические модели, опирающиеся на представления о металлической связи, осуществляемой электронным газом. Например, традиционные модели погруженного атома.

Можно выделить следующие причины твердотельных фазовых переходов в металле:

1. Температурная
2. Деформационная
3. Нагруженного состояния

Температурный и деформационный факторы связаны с изменением структуры электронных уровней как первопричиной перестройки решётки.

Предполагается, что решётка может стать неустойчивой при действии определённых внешних нагрузок. При исследовании переходов нагруженного состояния для определения границ устойчивости можно остановиться на использовании достаточно простых полуэмпирических потенциалов взаимодействия. Но следует решить непростую задачу определения области, в которой причины нагруженного состояния можно рассматривать отдельно от деформационных.

Непосредственно сам фазовый переход, какую причину бы он не имел, сопровождается сложной динамической эволюцией электронной структуры. Поэтому исследования, направленные на атомарное моделирование динамики фазовых переходов, должны опираться в том или ином виде на квантово-механические предсказания.

Взаимодействие частиц может описываться многочастичным потенциалом, который каким-либо образом меняется динамически. Больше физических оснований будет иметь подход, основанный на непосредственном моделировании эволюции электронной структуры.

На данном этапе работы было принято решение остановиться на последнем варианте, ввиду всего вышеописанного.

Естественно, в зависимости от будущих конкретных целей выбранная модель может быть уточнена и развита.

**Состояние и ближайшие цели**

На данный момент изучена литература, дающая представление о физике рассматриваемых явлений и общей структуре вычислительных моделей.

Необходимо и далее углублять теоретическое понимание проблемы.

Вместе с этим, научным руководителем была поставлена задача за 2 месяца реализовать простую квантово-механическую модель для малого кластера, основанную на известных проектах с открытым кодом. В связи с этим, я начал изучать материалы проекта cp2k.

Ниже представлен список основных монографий, которые я изучил в последнее время. В нём отсутствуют многие статьи, работы и прочие материалы, которые я просматривал для составления общей картины.

**Литература**

1. Бётгер Х. Принципы динамической теории решетки: Пер. с англ. – М.: Мир, 1986. – 392 с.

2. Григорович В.К. Металлическая связь и структура металлов. – М.: Наука, 1988. – 296 с.

3. Мазуренко В.В. Моделирование физических свойств наноматериалов на базе параллельных алгоритмов: учебное пособие / В.В. Мазуренко, А.Н. Руденко, В.Г. Мазуренко // – Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2009. – 77 с.

4. Долгоносов А.М. Модель электронного газа и теория обобщённых зарядов для описания межатомных сил и адсорбции. – М.: Книжный дом “ЛИБРОКОМ”, 2009. – 176 с.

5. Bartok-Partay A. The Gaussian Approximation Potential. An Interatomic Potential Derived from First Principles Quantum Mechanics. – Springer, 2010. – 96 pp.

6. Chol-Jun Yu. Atomistic Simulations for Material Processes Within Multiscale Method / Doktors der Naturwissenschaften genehmigte Dissertation vorgelegt von Master of Science (Physik) // 2009. – 170 pр.