

Семинар

Моделирование в материаловедении

Дуб Алексей Владимирович, Наука и инновации



Homo ·
Science

РОСАТОМ

ГОД НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ В РОССИИ



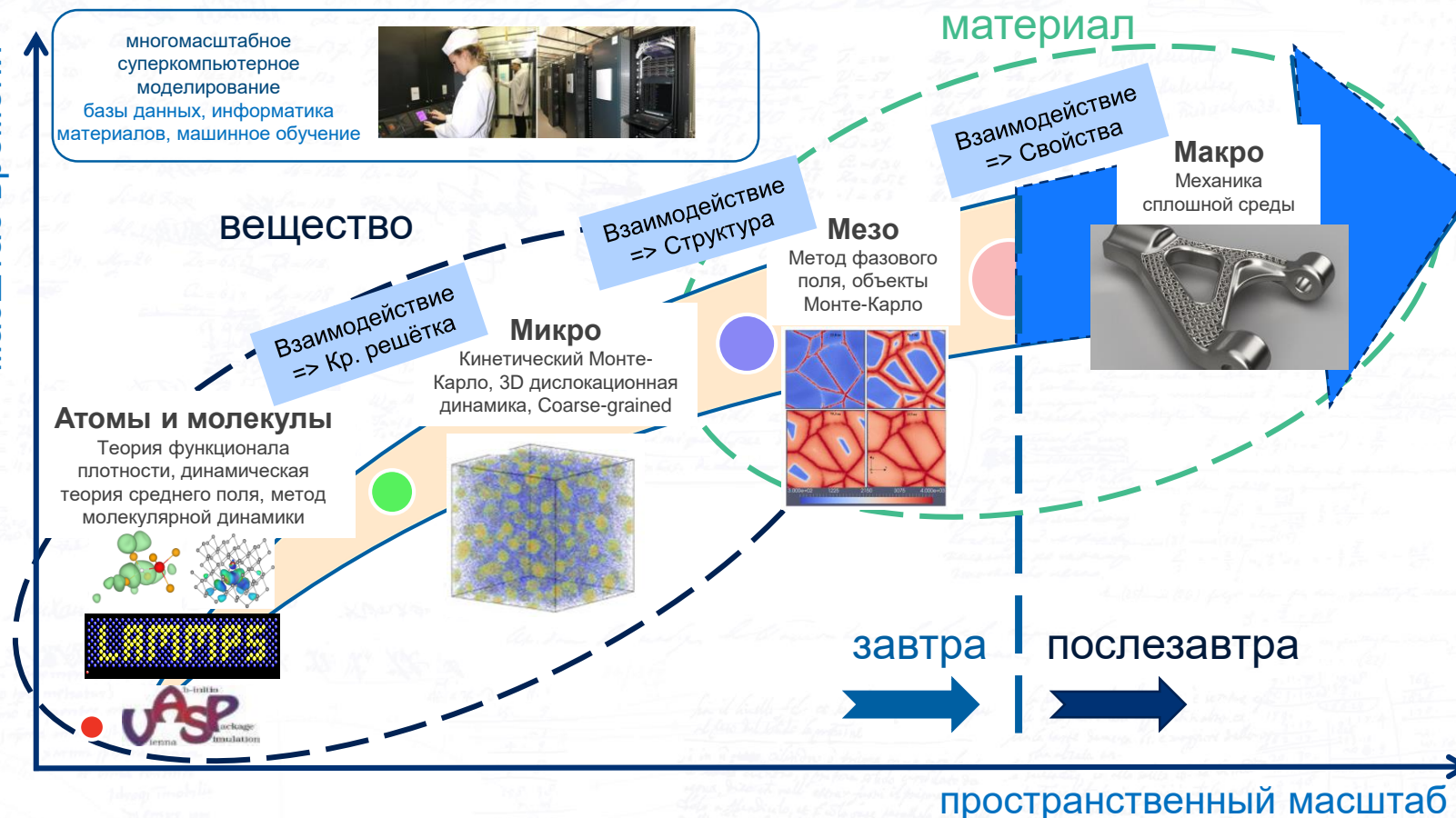
Homo
Science
POCATOM

Технологии моделирования новых материалов



НАУКА
И ИННОВАЦИИ
POCATOM

масштаб времени



1. Вещество

1.1 – Состав, структура (micro-)

- Свойства
- Идеальное/равновесное состояние
- Условия/критерии существования

1.2 Энергетическое состояние (состав + «поле» - P, T, ...)

Химическое взаимодействие

2. Материал

2.1 – состав, структура

- размеры и форма
- **Технология/история** производства/получения (**многомасштабность**)
- **Генезис** свойств и критериев (многомасштабность)
- Условия эксплуатации и нагружения
- **Механизмы** поведения/изменения свойств при эксплуатации

2.2 Энергетическое состояние (стабильное/метастабильное)

Химическое взаимодействие



1. Классическое уравнение Гиббса

$$dW = -PdV$$

$$dG = -SdT + Vdp + \sum \mu_i dN_i$$

$\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial N_i}\right)_{p,T,n} = f(T, p; n)$ где G – свободная энергия системы, N_i – число частиц данного сорта

Химический потенциал равен энергии Гиббса на одну частицу $G = \mu N$

2. Активность

$$\mu_i = \mu_i^0 + RT \ln a_i$$

$$\begin{cases} a_i = \gamma_i * N_i \\ a_i' = f_i * C_i \end{cases} \text{Стандартное состояние}$$



3. Параметры взаимодействия. Разложение избыточной функции $\Delta G_i^{\text{изб}}$ в ряд Тейлора

$$\begin{aligned} \ln \gamma_i = \frac{\Delta G_i^{\text{изб}}}{RT} &= \ln \gamma_i^{\infty} \Big|_{T,P,N_i \rightarrow 1} + \sum_{j=2}^n \frac{\partial \ln \gamma_i}{\partial N_j} \Big|_{T,P,N_i \rightarrow 1} * N_j + \frac{1}{2} * \sum_{j=2}^n \frac{\partial^2 \ln \gamma_i}{\partial N_j^2} \Big|_{T,P,N_i \rightarrow 1} * N_j^2 \\ &+ \sum_j \sum_k \frac{\partial^2 \ln \gamma_i}{\partial N_j \partial N_k} \Big|_{T,P,N_i \rightarrow 1} * N_j N_k \\ \ln \gamma_i &= \ln \gamma_i^{\infty} + \sum_{j=2} \varepsilon_i^j N_i + \sum_{j=2} \rho_i^j N_j^2 + \sum_{j=2} \sum_{k=2} \rho_i^{jk} N_j N_k \end{aligned}$$



4.Обобщенное уравнение Гиббса

$$dW_l = \sum_i L_i dl_i, \quad L_i - \text{коэффициент работы (интенсив)}, l_i - \text{координата}$$

$$dG = -SdT + \sum_i L_i dl_i + \sum_i \mu_i dN_i$$

$$\left(\frac{\partial \mu_j}{\partial L_i} \right)_{T,L,N} = - \left(\frac{\partial l_i}{\partial N_k} \right)_{T,L,N}$$

Химический потенциал должен зависеть от напряженности внешнего поля 5





Homo
Science
РОСАТОМ

Вопросы семинара



НАУКА
И ИННОВАЦИИ
РОСАТОМ

1. Модели, методы и инструменты моделирования свойств веществ и материалов.

1.1. Какие многомасштабные модели для материаловедения на сегодняшний день разработаны/ разрабатываются в мире и России?

1.2. Какие методы многомасштабного моделирования материалов и соответствующее программное обеспечение разработаны, какие требуют разработки в мире и России?

2. Связь, соответствие и перенос моделируемых характеристик на различных уровнях моделирования систем.

2.1. Какие масштабные уровни моделирования в материаловедении наиболее разработаны/ требуют развития в мире и России?

2.2. Для каких классов и каких свойств материалов является наиболее актуальным разработка многомасштабных моделей?

3. Возможные пути консолидации работы научных групп в России в рамках развития масштабного многоуровневого моделирования в материаловедении.