Локальные и нелокальные динамические процессы в квадратной решётке

НАУЧНЫЙ РУКОВОДИТЕЛЬ:
Д.Ф.-М.Н., ПРОФ. ПОРУБОВ А.В.

СТУДЕНТ: ОСОКИНА А.Е.

Терминология

- *Локальное взаимодействие* – такое, при котором рассматриваемая частица взаимодействует только с ближайшими соседями по горизонтали, вертикали и диагонали.
- *Нелокальное взаимодействие* – такое, при котором рассматриваемая частица взаимодействует также с более удалёнными частицами. Порядок нелокального взаимодействия – число, определяющее, сколько соседей включать в рассмотрение по каждому из направлений. Например, если рассматриваются не только ближайшие частицы, но и «через одну», то имеет место 2 порядок нелокальности.
- *Ауксетик* – материал, демонстрирующий отрицательные значения коэффициента Пуассона по одному (в случае изотропного тела) или по нескольким (в случае неизотропного тела) направлениям.

Актуальность

- Нелокальный подход позволяет учитывать влияние введения дополнительных дальних взаимодействий на процессы, протекающие в решётке, в частности, на проявление ауксетичных свойств построенной модели.
- Интерес к ауксетикам обусловлен широким спектром возможных применений подобных материалов в различных сферах промышленности и высоких технологий, например, в создании полупроводников, в медицине, спорте, а также в ВПК и оборонной промышленности.

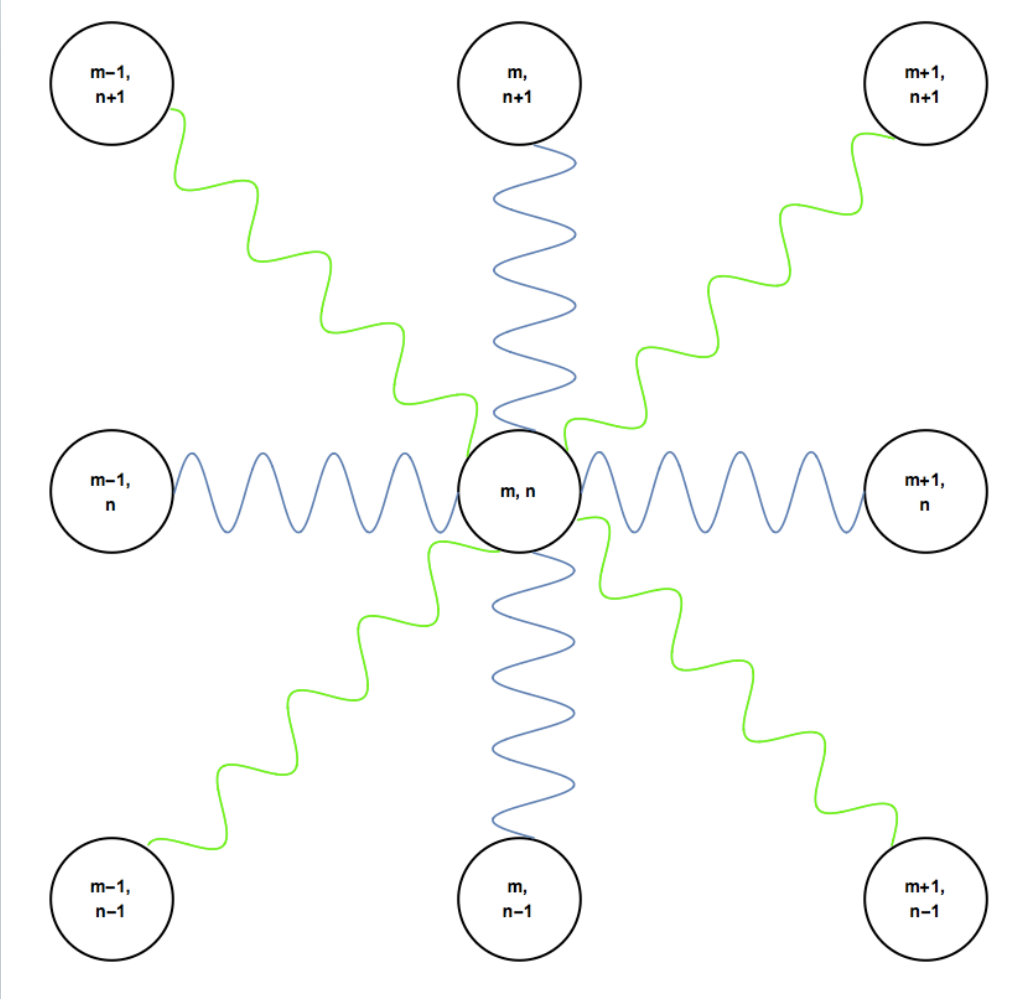
Цели

- Разработать алгоритм, позволяющий упростить вывод нелокальных уравнений и получать модели любого порядка нелокальности на основе локальной.
- Понять, влияет ли учёт дальних частиц в уравнениях на проявление ауксетичных свойств (отрицательность коэффициента Пуассона), и если да, то как именно; получить условия, при которых коэффициент точно будет отрицательным по одному или нескольким направлениям.

Постановка задачи

- Рассматривается квадратная решётка с одинаковым расстоянием между частицами h и с одинаковыми массами частиц m.
- Введём вектор перемещения:

$$U_{m,n} = u_{m,n}\, i + v_{m,n}\, j$$



Математический формализм

- Перемещение частицы будет задаваться произведением $U_{m,n} * n_i$, где n_i - т.н. «базовые» векторы, определяющие геометрию решётки соответствующие направлению от рассматриваемой частицы к частице, с которой она взаимодействует.
- Поскольку векторы определяют геометрию решётки, потенциально возможно расширить применение данного формализма на решётки другого типа без сильных изменений в самой модели, просто меняя выражения для векторов.

$$n_1 = \vec{i}$$
$$n_2 = -\vec{i}$$
$$n_3 = \vec{j}$$
$$n_4 = -\vec{j}$$
$$n_5 = \frac{1}{\sqrt{2})}(\vec{i} + \vec{j})$$
$$n_6 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\vec{i} + \vec{j})$$
$$n_7 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{i} - \vec{j})$$
$$n_8 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\vec{i} - \vec{j})$$

Операторы сдвига

- Для того, чтобы получить дискретные уравнения, необходимо определить вид внутренней энергии. Из закона Гука известно, что силы пропорциональны удлинениям с поправкой на некоторый коэффициент жёсткости, в роли которого здесь выступает жёсткость пружины. В таком случае, закон Гука можно переписать в более компактном и удобном виде заменив удлинения на следующие операторы:

$$
\begin{aligned}
&D_1 u_{m,n} = u_{m+1,n}, && D_1(x_m, y_n) = u(x_m + h, y_n) = u(x_{m+1}, y_n)\\
&D_1^\dagger u_{m,n} = u_{m-1,n}, && D_1^\dagger(x_m, y_n) = u(x_m - h, y_n) = u(x_{m-1}, y_n)\\
&D_2 u_{m,n} = u_{m,n+1}, && D_2(x_m, y_n) = u(x_m, y_n + h) = u(x_m, y_{n+1})\\
&D_2^\dagger u_{m,n} = u_{m,n-1}, && D_2^\dagger(x_m, y_n) = u(x_m, y_n - h) = u(x_m, y_{n-1})\\
&D_1 * D_2 u_{m,n} = u_{m+1,n+1}, && D_1 * D_2(x_m, y_n) = u(x_m + h, y_n + h) = u(x_{m+1}, y_{n+1})\\
&D_1 * D_2^\dagger u_{m,n} = u_{m+1,n-1}, && D_1 * D_2(x_m, y_n) = u(x_m + h, y_n - h) = u(x_{m+1}, y_{n-1})\\
&D_1^\dagger * D_2 u_{m,n} = u_{m-1,n+1}, && D_1 * D_2(x_m, y_n) = u(x_m - h, y_n + h) = u(x_{m-1}, y_{n+1})\\
&D_1^\dagger * D_2^\dagger u_{m,n} = u_{m-1,n-1}, && D_1 * D_2(x_m, y_n) = u(x_m - h, y_n - h) = u(x_{m-1}, y_{n-1})
\end{aligned}
$$

Введённый формализм используется далее при записи выражений для энергии.

Локальная линейная модель Потенциальная энергия

- Взаимодействие центральной частицы (m, n) с ближайшими соседями моделируется посредством линейных пружин. Можно выделить три типа взаимодействий:
  - По вертикали и горизонтали – с жёсткостью C_1.
  - По диагонали - с жёсткостью C_2.
- Сначала изучим самый простой вариант (см. Рис.1): частица взаимодействует только с ближайшими соседями. На основе формализма, введённого в предыдущем пункте, строим V для данного случая:

$$V_l = \frac{1}{2}(C_1((D_1-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_1})^2 + C_1((D_1^\dagger-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_2})^2 + C_1((D_2-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_3})^2 + C_1((D_2^\dagger-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_4})^2$$
$$+C_2(((D_1D_2-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_5})^2 + ((D_1^\dagger D_2^\dagger-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_6})^2 + ((D_1^\dagger D_2-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_7})^2 + ((D_1D_2^\dagger-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_8})^2)$$

Локальная линейная модель
Дискретные уравнения

- Для того, чтобы получить дискретные уравнения движения, необходимо составить лагранжиан и применить вариационный принцип Гамильтона (найти минимум функционала действия), причём лагранжиан равен:

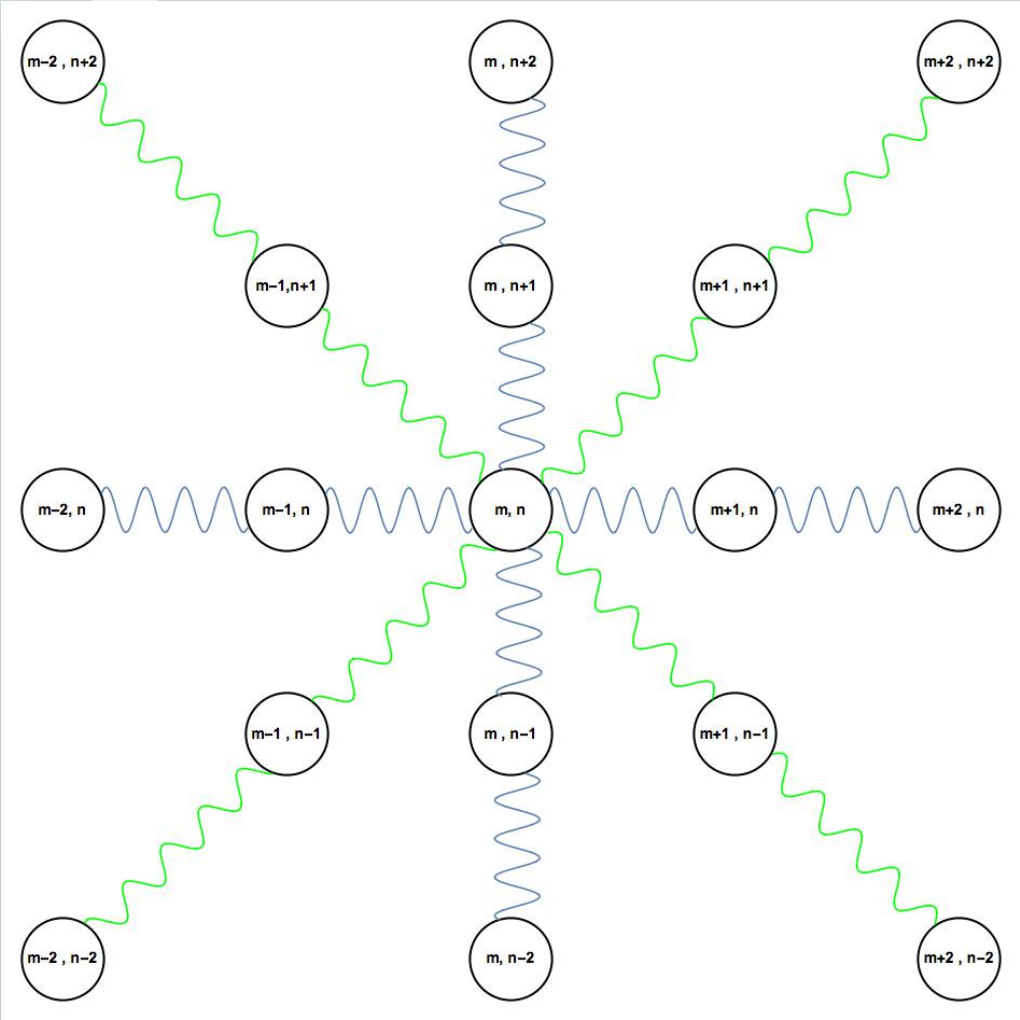
$$T_{m,n} - V_{m,n} = \frac{m}{2}(\dot{u}^2_{m,n} + \dot{v}^2_{m,n}) - V_{m,n}$$

$$m\ddot{u}_{m,n} = C_1(D_1 + D_1^\dagger - 2)u_{m,n} + \frac{C_2}{2}[(D_1 * D_2 + D_1 * D_2^\dagger + D_1^\dagger * D_2 + D_1^\dagger * D_2^\dagger - 4)u_{m,n} + (D_1 * D_2 - D_1 * D_2^\dagger + D_1^\dagger * D_2 - D_1^\dagger * D_2^\dagger)v_{m,n}]$$

$$m\ddot{v}_{m,n} = C_1(D_2 + D_2^\dagger - 2)v_{m,n} + \frac{C_2}{2}[(D_1 * D_2 + D_1 * D_2^\dagger + D_1^\dagger * D_2 + D_1^\dagger * D_2^\dagger - 4)v_{m,n} + (D_1 * D_2 - D_1 * D_2^\dagger + D_1^\dagger * D_2 - D_1^\dagger * D_2^\dagger)u_{m,n}]$$

Нелокальная линейная модель

- Теперь рассмотрим более сложную модель, а именно - нелокальную модель второго порядка, т.е. центральная частица взаимодействует не только с ближайшими соседями, но ещё и с частицами "через одну", как показано на рисунке.
- Предполагается, что жёсткость пружин между частицами (m,n) - (m+1, n) != (m,n) - (m+2, n), так что для удобства рассмотрения и описания нелокальности мы вводим 2 дополнительные жёсткости в нелокальной модели: C_3 и C_4



Нелокальная линейная модель
Потенциальная энергия

Для дальнейших исследований и получения уравнений необходимо выбрать функцию -"генератор", которая на основе формализма операторов сдвига и выражения для энергии в локальном случае описывала бы нелокальное поведение решётки, и порождала бы выражения энергии для любого указанного нами порядка нелокальности. Наиболее подходящей для наших задач является степенная функция, показатель степени которой задаёт порядок нелокальности.

$$V_n = \frac{C_3}{2}(((D_1^2-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_1})^2 + ((D_1^{\dagger 2}-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_2})^2 + ((D_2^2-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_3})^2 + ((D_2^{\dagger 2}-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_4})^2$$
$$+\frac{C_4}{2}(((D_1^2D_2^2-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_5})^2 + ((D_1^{\dagger 2}D_2^{\dagger 2}-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_6})^2 + ((D_1^{\dagger 2}D_2^2-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_7})^2 + ((D_1^2D_2^{\dagger 2}-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_8})^2)$$

Также нужно принимать во внимание то, что полная потенциальная энергия будет учитывать и локальные, и нелокальные взаимодействия между частицами:

$$V = V_l + V_n$$

Нелокальная линейная модель
Дискретные уравнения

Дискретные уравнения, необходимые для получения дисперсионных соотношений и линейного анализа, выглядят следующим образом:

$$m\ddot{u}_{m,n} = C_1(D_1 + D_1^\dagger - 2)u_{m,n} + C_3(D_1^2 + D_1^{\dagger 2} - 2)u_{m,n} +$$

$$\frac{C_2}{2}((D_1D_2 + D_1^\dagger D_2 + D_1D_2^\dagger + D_1^\dagger D_2^\dagger - 4)u_{m,n} + (D_1D_2 - D_1^\dagger D_2 - D_1D_2^\dagger + D_1^\dagger D_2^\dagger)v_{m,n})$$

$$\frac{C_4}{2}((D_1^2D_2^2 + D_1^{\dagger 2}D_2^2 + D_1^2D_2^{\dagger 2} + D_1^{\dagger 2}D_2^{\dagger 2} - 4)u_{m,n} + (D_1^2D_2^2 - D_1^{\dagger 2}D_2^2 - D_1^2D_2^{\dagger 2} + D_1^{\dagger 2}D_2^{\dagger 2})v_{m,n}$$

$$m\ddot{v}_{m,n} = C_1(D_2 + D_2^\dagger - 2)v_{m,n} + C_3(D_2^2 + D_2^{\dagger 2} - 2)v_{m,n} +$$

$$\frac{C_2}{2}((D_1D_2 + D_1^\dagger D_2 + D_1D_2^\dagger + D_1^\dagger D_2^\dagger - 4)v_{m,n} + (D_1D_2 - D_1^\dagger D_2 - D_1D_2^\dagger + D_1^\dagger D_2^\dagger)u_{m,n})$$

$$\frac{C_4}{2}((D_1^2D_2^2 + D_1^{\dagger 2}D_2^2 + D_1^2D_2^{\dagger 2} + D_1^{\dagger 2}D_2^{\dagger 2} - 4)v_{m,n} + (D_1^2D_2^2 - D_1^{\dagger 2}D_2^2 - D_1^2D_2^{\dagger 2} + D_1^{\dagger 2}D_2^{\dagger 2})u_{m,n}$$

Дисперсионный анализ

- Рассмотрим влияние взаимодействий дальнего порядка на дискретное дисперсионное отношение на примере плоских волн. Также сравним линеаризованный длинноволновой предел с уравнениями модели кубической кристаллической решетки, дабы понять, как нелокальность влияет на проявление ауксетичности.
- Рассмотрим распространение продольных плоских волн. Линейные уравнения движения, полученные из вариационного принципа, дополнительно упростятся, т.к. изменений по n не происходит. Тогда уравнения движения для локальной и нелокальной модели соответственно имеют вид:

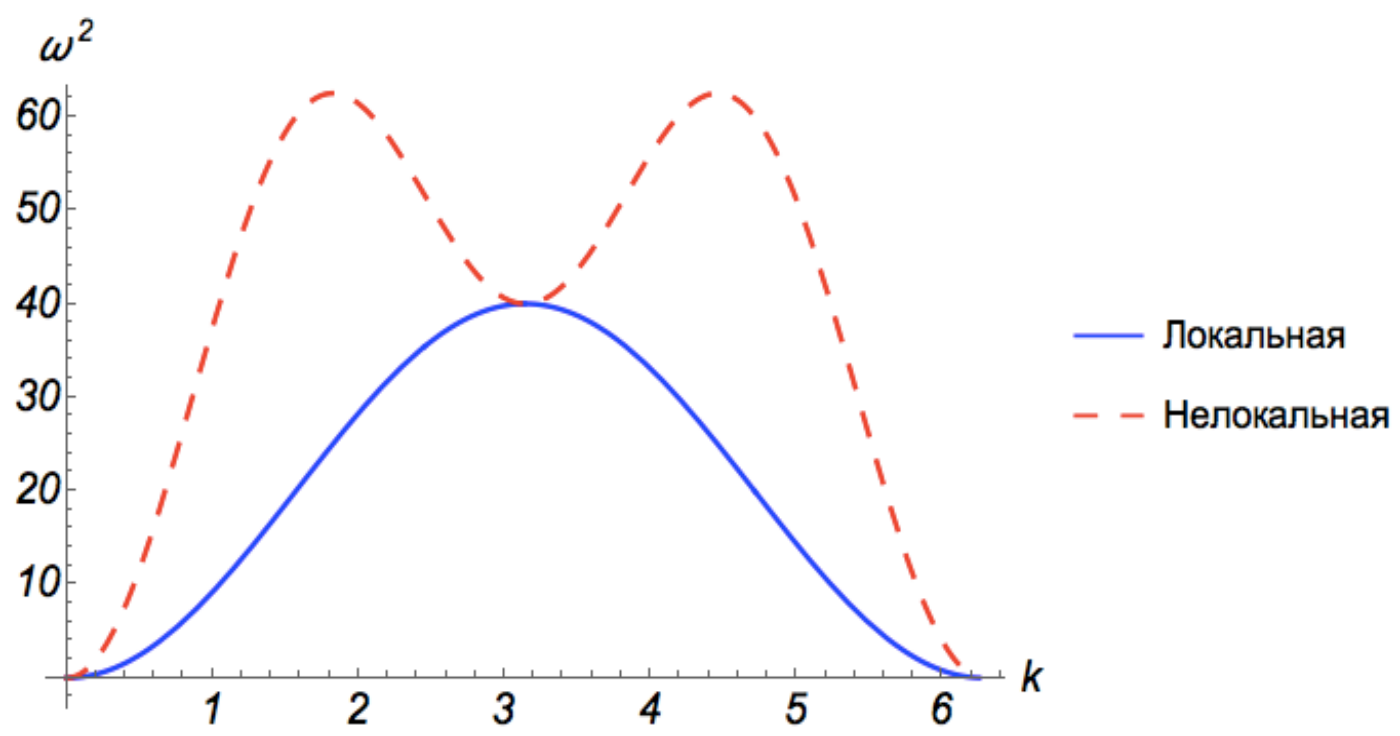
$$m\ddot{u}_m = (C_1 + C_2)(2(1 - D_1 + D_1^\dagger)u_m)$$

$$m\ddot{u}_m = (C_1 + C_2)(2(1 - D_1 + D_1^\dagger)u_m + (C_3 + C_4)(2(1 - D_1^2 + D_1^{\dagger 2})u_m)$$

Дисперсионные соотношения

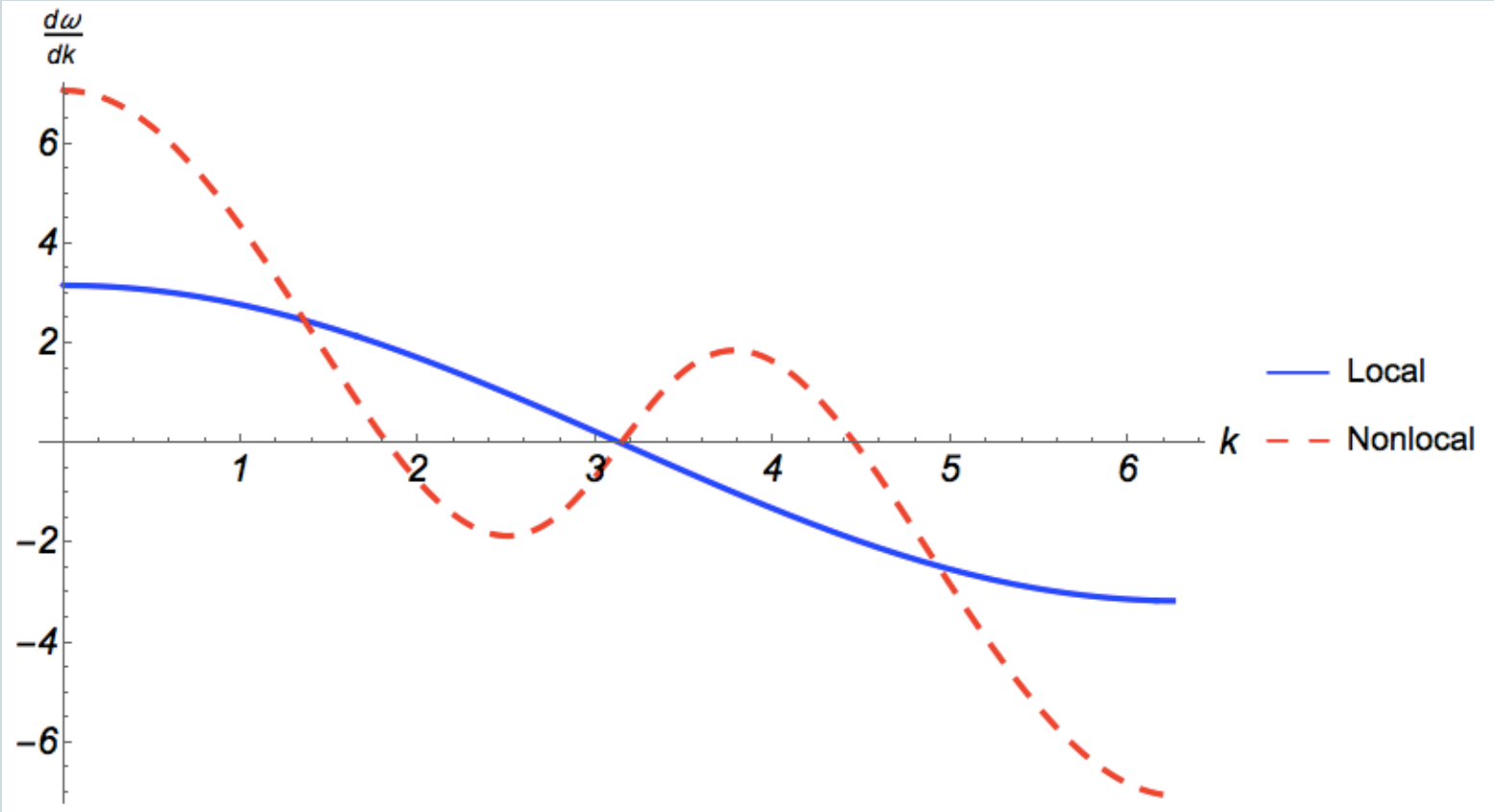
Подставляем: $u = Ae^{i(km-\omega t)}$

Получаем соотношения: $\omega^2 = \frac{2}{m}((C_1 + C_2)(1 - 2cosk)$ $\omega^2 = \frac{2}{m}((C_1 + C_2)(1 - 2cosk) + (C_3 + C_4)(1 - 2cos2k)$



Групповая скорость

- Наличие дополнительных максимумов отвечает за изменение знака групповой скорости.



Переход к континуальным уравнениям

- Для того, чтобы получить связь между упругими константами и параметрами решётки и сделать выводы о наличии ауксетичного поведения, необходимо вывести континуальные уравнения. Линейный анализ делает переход от дискретных уравнений к континуальным возможным при следующем алгоритме:

- Дискретным смещениям $u_{m,n}$, $v_{m,n}$ при малых значениях волнового числа ставятся в соответствие гладкие дифференцируемые функции $u(x, y, t)$ и $v(x, y, t)$, описывающие смещения в континуальной среде, которую предстоит получить. Для того, чтобы получить точные выражения для функций смещения, необходимо использовать разложение в ряд Тейлора с удерживанием нужного нам количества членов.

Континуальные операторы сдвига

- В случае введённого в данной работе формализма, разложение в ряд Тейлора эквивалентно замене:

$$D_1 = \sum_m \frac{h^m}{m!}\frac{d^m}{dx^m} = e^{h\frac{d}{dx}} \qquad D_1 * D_2 = \sum_{m,n}\left(\frac{h^m}{m!}\frac{d^m}{dx^m} + \frac{h^n}{n!}\frac{d^n}{dy^n}\right) = e^{h\frac{d}{dx}+h\frac{d}{dy}}$$

$$D_2 = \sum_n \frac{h^n}{n!}\frac{d^n}{dy^n} = e^{h\frac{d}{dy}} \qquad D_1 * D_2^\dagger = \sum_{n,m}\left(\frac{h^m}{m!}\frac{d^m}{dx^m} + \frac{-h^n}{n!}\frac{d^n}{dy^n}\right) = e^{h\frac{d}{dx}-h\frac{d}{dy}}$$

$$D_1^\dagger = \sum_m \frac{-h^m}{m!}\frac{d^m}{dx^m} = e^{-h\frac{d}{dx}} \qquad D_1^\dagger * D_2 = \sum_{n,m}\left(\frac{-h^m}{m!}\frac{d^m}{dx^m} + \frac{h^n}{n!}\frac{d^n}{dy^n}\right) = e^{-h\frac{d}{dx}+h\frac{d}{dy}}$$

$$D_2^\dagger = \sum_n \frac{-h^n}{n!}\frac{d^n}{dy^n} = e^{-h\frac{d}{dy}} \qquad D_1^\dagger * D_2^\dagger = \left(\sum_{n,m} \frac{-h^m}{m!}\frac{d^m}{dx^m} + \frac{-h^n}{n!}\frac{d^n}{dy^n}\right) = e^{-h\frac{d}{dx}-h\frac{d}{dy}}$$

Локальная линейная модель
Континуальные уравнения

$$m\ddot{u}_{tt} = a^2[C_2(u_{yy} + 2v_{xy}) + (C_1 + C_2)u_{xx}]$$

$$m\ddot{v}_{tt} = a^2[C_2(v_{xx} + 2u_{xy}) + (C_1 + C_2)v_{yy}]$$

- Теперь эти уравнения можно соотнести с уравнениями тела с кубической кристаллической решёткой, и получить связь между упругими константами и жесткостями решётки.
- Из них видно, что подобные соотношения имеют место только при условии выполнения условия Коши, а именно, когда между однородно деформированными областями решетки действуют центральные силы.

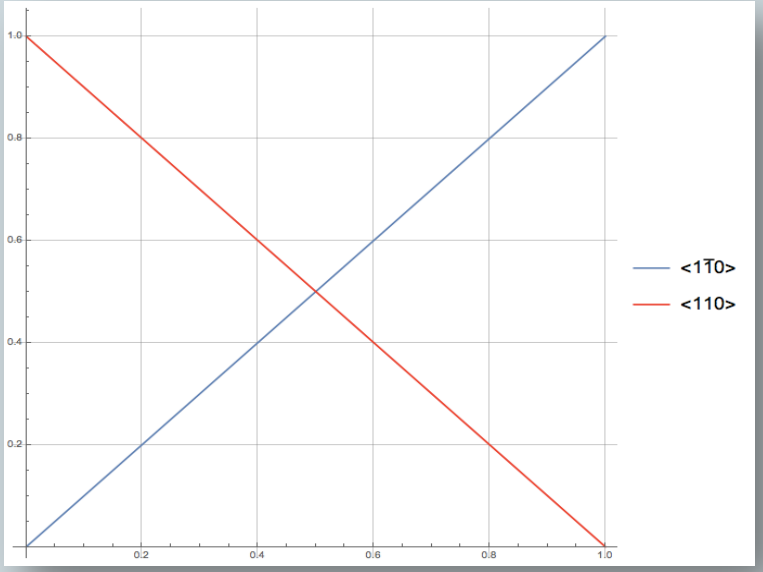
$$C_{11} = \frac{C_1 + C_2}{a}$$

$$C_{12} = \frac{C_2}{a}$$

$$C_{44} = \frac{C_2}{a}$$

Линейная локальная модель
Коэффициенты Пуассона

- Т.к. тело неизотропно, коэффициент Пуассона по разным направлениям будет принимать различные значения. Используя выражения для главных кристаллографических направлений кубической решётки с поправкой на z=0, получаем выражения для коэффициентов.
- Из них получается, что с точки зрения исследования ауксетичного поведения, интерес представляет коэффициент Пуассона в направлении $< 110, 1\bar{1}0 >$, т.к. только он может принимать отрицательные значения.



$$\nu_{<110,1\bar{1}0>} = \frac{C_1^2 + C_1C_2 - 2C_2^2}{C_1^2 + 5C_1C_2 + 2C_2^2}$$

Отсюда условие ауксетичности:

$$C_1 < C_3$$

Нелокальная линейная модель
Континуальные уравнения

- Проводя ту же самую процедуру линеаризации, что и в случае локальной модели, получаем нелокальные континуальные уравнения:

$$m\ddot{u}_{tt} = a^2[(C_2 + 4C_4)u_{yy} + 2(C_2 + 4C_4)v_{xy} + (C_1 + C_2 + 4(C_3 + C_4))u_{xx}]$$

$$m\ddot{v}_{tt} = a^2[(C_2 + 4C_4)v_{xx} + 2(C_2 + 4C_4)u_{xy} + ((C_1 + C_2 + 4(C_3 + C_4))v_{yy}]$$

Упругие константы:

$$C_{11} = \frac{C_1 + C_2 + 4(C_3 + C_4)}{a}$$

$$C_{12} = \frac{C_2 + 4C_4}{a}$$

$$C_{44} = \frac{C_2 + 4C_4}{a}$$

Линейная нелокальная модель Коэффициенты Пуассона

Так же, как и в случае локальной модели, остаётся один коэффициент Пуассона, способный принимать отрицательные значения, причём в направлении того же самого кристаллографического направления.

$$\nu_{<110,1\bar{1}0>} = \frac{(C_1 - C_2 + 4C_3 - 4C_4)(C_1 + 2C_2 + 4C_3 + 8C_4)}{(2C_2 + 4C_4)(C_1 + C_2 + 4(C_3 + C_4)) + (C_1 + 4C_3)(C_1 + 3C_2 + 4(C_3 + 3C_4))}$$

Отсюда можно получить условие ауксетичного поведения: необходимо, чтобы выполнялось:

$$\nu_{<110,1\bar{1}0>} < 0 => C_1 + 4C_3 < C_2 + 4C_4$$

Принимая во внимание тот факт, что C_1 и C_3– константы, определяющие динамику решётки в продольном и поперечном направлениях для локальной и нелокальной моделей соответственно, а C_2 и C_4 определяют перекрёстное взаимодействие, то можно сделать вывод, что вероятность проявления подобных свойств тем выше, чем больший вклад вносят диагональные взаимодействия.

Нелинейное взаимодействие

- Обобщим результаты, полученные в пунктах 2 и 3, на слабую нелинейность. Мы рассматриваем нелинейные волны, распространяющиеся в горизонтальном направлении вдоль оси x и слабо возмущенные в поперечном направлении вдоль оси y. Слабое возмущение в поперечном направлении характеризуется малым параметром $\varepsilon << 1$, континуальные смещения предполагаются функциями медленно меняющейся в том же направлении переменной $Y = \varepsilon y$. Этот же параметр используется для учета слабонелинейных волн, однако его использование зависит от того, изучаются ли поперечные вариации продольных или поперечных волн.

Нелинейные энергия и уравнения

Энергия нелинейного локального взаимодействия:

$$V_{nloc} = \frac{1}{2}(C_1((D_1-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_1})^2 + C_1((D_1^\dagger-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_2})^2 + C_1((D_2-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_3})^2 + C_1((D_2^\dagger-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_4})^2$$

$$+C_2(((D_1D_2-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_5})^2 + ((D_1^\dagger D_2^\dagger-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_6})^2((D_1^\dagger D_2-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_7})^2 + ((D_1D_2^\dagger-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_8})^2)$$

$$\frac{Q_1}{3}(((D_1-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_1})^3 + ((D_1^\dagger-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_2})^3 + ((D_2-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_3})^3 + ((D_2^\dagger-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_4})^3)$$

$$+\frac{Q_2}{3}(((D_1D_2-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_5})^3 + ((D_1^\dagger D_2^\dagger-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_6})^3 + ((D_1^\dagger D_2-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_7})^3 + ((D_1D_2^\dagger-1)\vec{U}_{m,n}\cdot\vec{n_8})^3) \quad (42)$$

Нелинейные уравнения движения:

$$m\ddot{u} = a^3(2C_1u_xu_{xx} + \sqrt{2}C_2\epsilon(\epsilon u_xu_{yy} + \epsilon v_xv_{yy} + 2v_xu_{xy} + 2u_xv_{xy} + v_y(\epsilon^2u_{yy} + 2\epsilon v_{xy} + u_{xx}) + u_y(\epsilon^2v_{yy} + 2\epsilon u_{xy} + v_{xx}))) \quad (43)$$

$$m\ddot{v} = a^3(2C_1\epsilon^2v_yv_{yy} + \sqrt{2}C_2(\epsilon u_xv_{yy} + \epsilon v_xu_{yy} + 2u_xu_{xy} + 2v_xv_{xy} + u_y(\epsilon^2u_{yy} + 2\epsilon v_{xy} + u_{xx}) + v_y(\epsilon^2v_{yy} + 2\epsilon u_{xy} + v_{xx})))$$

Заключение

- Результатом данной работы является развитие алгоритма, позволяющего получать уравнения динамики, линейные и нелинейные, для разных порядков нелокальности. Благодаря введённому математическому формализму уравнения могут быть получены более простым способом из-за того, что нелокальная модель получается из локальной путем возведения в степень слагаемых, входящих в выражение для внутренней энергии.
- Кроме того, было показано, что коэффициенты Пуассона для квадратной решетки в нелокальной модели могут принимать отрицательные значения и, соответственно, решётка проявляет по одному из направлений ауксетичное поведение, и выведено соотношение для жесткостей решётки, при котором ауксетичность точно будет проявляться.
- Представленный подход к описанию нелокальных взаимодействий в кристаллах может также быть обобщен на любой тип кристаллической решетки путем изменения «базовых» векторов, определяющих геометрию решетки.

Спасибо за внимание !