ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2017, том 473, № 2, с. 159–162

МЕХАНИКА

УДК 539.3

АНАЛИЗ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФУНКЦИИ ГРЮНАЙЗЕНА ДВУМЕРНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК

© 2017 г. А. Ю. Панченко[1,2,*], Е. А. Подольская[1,2], А. М. Кривцов[1,2]

Представлено академиком РАН Н.Ф. Морозовым 23.05.2016 г.
Поступило 10.06.2016 г.

Методом динамики частиц аналитически и численно исследуются тензорные свойства уравнения состояния Ми–Грюнайзена в двумерных телах с кристаллической структурой. Аналитически показано, что тензорная функция Грюнайзена существенно зависит от соотношения собственных чисел тензора деформационной температуры, который в данной работе определяется численно.

DOI: 10.7868/S0869565217080096

Развитие нанотехнологий приводит к необходимости предсказывать поведение твердых тел с микроструктурой в широком диапазоне температур и напряженно-деформированных состояний [1]. Для этого в случае высоких давлений и температур может быть использовано уравнение состояния Ми–Грюнайзена, в котором параметр материала – коэффициент Грюнайзена, связывающий давление, объем и внутреннюю энергию, – является скалярной величиной [2]. В общем случае скалярный коэффициент Грюнайзена не позволяет учесть тензорную природу термических напряжений в кристаллах. Последнее возможно при введении: а) тензорной функции Грюнайзена [3, 4] и б) тензорной температуры [5, 6]. Уравнение состояния кристаллических тел с учетом первого фактора рассматривалось в [3], с учетом второго – в [7]. Целью данной работы является получение асимптотически точного уравнения состояния с учетом обоих факторов.

ВЫВОД УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ

В работе [3] выведено обобщение классического уравнения Ми–Грюнайзена для идеальных кристаллов произвольной размерности:

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}} = -\frac{1}{V}\boldsymbol{\Gamma}\tilde{U}_T, \qquad (1)$$

где V – объем элементарной ячейки рассматриваемой решетки, $\tilde{\boldsymbol{\tau}}$ – тензор напряжений, вызванных тепловым движением, $\boldsymbol{\Gamma}$ – тензорная функция Грюнайзена, $\tilde{U}_T$ – внутренняя энергия системы, которая вычисляется как сумма кинетической $\tilde{K}$ и потенциальной $\tilde{U}$ энергий:

$$\tilde{U}_T = \tilde{K} + \tilde{U}, \quad \tilde{K} = \frac{m}{2}\sum_k \dot{u}_k^2,$$
$$\tilde{U} = \frac{1}{2}\sum_k \left(\langle \Pi(A_k)\rangle - \Pi(\hat{A}_k)\right). \qquad (2)$$

Здесь движение частиц разделено на быстрое (тепловое) и медленное (холодное) [8], соответствующие величины обозначены символами ~ и $\wedge$, m – масса частиц, $\dot{u}_k$ – модуль вектора скорости, вычисленной относительно центра масс системы, Π – потенциал взаимодействия, $\langle\cdot\rangle$ – обозначение осреднения, которое проводится по пространству, затем по времени, далее по ансамблю, $A_k = |\mathbf{A}_k|$, $\mathbf{A}_k = \hat{\mathbf{A}}_k + \tilde{\mathbf{A}}_k$ – вектор, соединяющий отсчетную частицу и частицу с номером k, причем $\hat{\mathbf{A}}_k = \langle \mathbf{A}_k \rangle$. Нуль потенциальной энергии соответствует неподвижной решетке, полный импульс системы остается равным нулю при увеличении температуры.

Вывод выражения для тензора напряжений Коши (3) в дискретной системе при наличии теплового движения представлен в работе [3]:

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{1}{2V}\sum_k \langle \mathbf{A}_k \rangle \langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r}) \rangle, \qquad (3)$$

где $\mathbf{F}_k$ – сила, действующая на отсчетную частицу. При парном силовом взаимодействии $\mathbf{F}_k = \frac{\Pi'_k}{A_k}\mathbf{A}_k$, где $\Pi'_k = \Pi'(A_k)$, суммирование по повторяющемуся индексу не ведется. Если до нагре-

[1] *Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого*
[2] *Институт проблем машиноведения Российской Академии наук, Санкт-Петербург*
**E-mail: artemqt@yandex.ru*

ва решетка была ненапряженной, то $\boldsymbol{\tau} = \tilde{\boldsymbol{\tau}}$. Вывод уравнения состояния [3] основан на разложении выражений (2) и (3) в ряд Тейлора по вектору $\tilde{\mathbf{A}}_k$ и их последующем осреднении. Ограничиваясь первым ненулевым членом в разложении после осреднения, запишем уравнения для тепловой составляющей тензора напряжений и внутренней энергии:

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}} = \frac{1}{4V}\sum_k [\alpha_k(\hat{\mathbf{A}}_k\hat{\mathbf{A}}_k\mathbf{E} + 2\hat{\mathbf{A}}_k\mathbf{E}\hat{\mathbf{A}}_k) + \\ + \beta_k\hat{\mathbf{A}}_k\hat{\mathbf{A}}_k\hat{\mathbf{A}}_k\hat{\mathbf{A}}_k]\cdot\cdot\left\langle\tilde{\mathbf{A}}_k\tilde{\mathbf{A}}_k\right\rangle, \quad (4)$$

$$\tilde{U}_T = \frac{1}{2}\sum_k [\alpha_k\hat{\mathbf{A}}_k\hat{\mathbf{A}}_k + \gamma_k\mathbf{E}]\cdot\cdot\left\langle\tilde{\mathbf{A}}_k\tilde{\mathbf{A}}_k\right\rangle, \quad (5)$$

где

$$\alpha_k = \frac{\hat{\Pi}''_k\hat{A}_k - \hat{\Pi}'_k}{\hat{A}_k^3}, \quad \beta_k = \frac{\hat{\Pi}'''_k\hat{A}_k^2 - 3\hat{\Pi}''_k\hat{A}_k + 3\hat{\Pi}'_k}{\hat{A}_k^5},$$

$$\gamma_k = \frac{\hat{\Pi}'_k}{\hat{A}_k}.$$

Видим, что для простой кристаллической решетки в состоянии термодинамического равновесия единственным неизвестным оказывается тензор $\left\langle\tilde{\mathbf{A}}_k\tilde{\mathbf{A}}_k\right\rangle$, который далее будем называть *тензором деформационной температуры*.

ДЕФОРМАЦИОННАЯ ТЕМПЕРАТУРА И ФУНКЦИЯ ГРЮНАЙЗЕНА

Выберем базисные векторы для каждой из связей: вдоль связи $\mathbf{e}_x$ и перпендикулярно ей $\mathbf{e}_y$; ограничимся учетом взаимодействий с ближайшими соседями. Тогда компоненты тензора деформационной температуры будут иметь простой физический смысл: квадраты деформаций связи вдоль ее начального направления $\left\langle\tilde{\mathbf{A}}_k\tilde{\mathbf{A}}_k\right\rangle_{xx}/a^2$ и перпендикулярно ему $\left\langle\tilde{\mathbf{A}}_k\tilde{\mathbf{A}}_k\right\rangle_{yy}/a^2$, вызванных тепловым движением. Очевидно, что в силу симметрии компоненты тензора $\left\langle\tilde{\mathbf{A}}_k\tilde{\mathbf{A}}_k\right\rangle$ в данных осях будут одинаковыми для всех связей. Обозначим

$$\Theta = \frac{\left\langle\tilde{\mathbf{A}}_k\tilde{\mathbf{A}}_k\right\rangle_{yy}}{\left\langle\tilde{\mathbf{A}}_k\tilde{\mathbf{A}}_k\right\rangle_{xx}}. \quad (6)$$

Для трехмерной задачи [2] можно записать обобщенное выражение скалярного коэффициента Грюнайзена, в которое входит величина $f = \Theta + 1$. При использовании тензорной функции [3], следу которой соответствует формула Зубарева–Ващенко [2, 9], значения внутренней энергии и компонент тензора напряжений оказываются на соответственно 20 и 24% больше, чем полученные в данной работе в результате вычислительного эксперимента, но поскольку изменения этих величин имеют один знак, ошибка в определении коэффициента Грюнайзена составляет всего 3%. В работе [7] с использованием метода молекулярной динамики был определен коэффициент f для нескольких значений температуры при объемном сжатии ГЦК решетки. В дальнейшем f рассматривался лишь как подгоночный параметр без учета его физического смысла [10]; исследование влияния деформации и температуры на f проводили в задачах о земном ядре и мантии (при высоких давлениях) [11].

Для определения коэффициента Θ в настоящей работе используется метод динамики частиц [12]. Рассматривается квадратный образец с треугольной решёткой (11500 частиц), заданы периодические граничные условия[1]. Частицы взаимодействуют посредством парного центрального потенциала Морзе:

$$\Pi(A_k) = D[e^{2\alpha(1-A_k/a)} - 2e^{\alpha(1-A_k/a)}], \quad (7)$$

где D — глубина потенциальной ямы, a — равновесное расстояние потенциала, параметр α отвечает за ширину потенциальной ямы. В начальный момент времени частицы расположены в узлах решетки и случайные скорости заданы так, чтобы средняя кинетическая энергия, приходящаяся на частицу, составляла $2\cdot10^{-5}D$, а центр масс системы был неподвижен. Далее уравнения движения интегрируются методом Верле, шаг по времени определяется как $T_0/100$, где T_0 — период малых колебаний изолированной пары частиц. Радиус обрезания расположен между первой и второй координационными сферами и равен $1.36a$.

Результаты моделирования после осреднения по пространству и 250 реализациям с одинаковым начальным уровнем энергии показали, что компоненты тензора деформационной температуры быстро (в течение нескольких периодов T_0) приходят к равновесному значению, среднеквадратичное отклонение от которого составляет 1.1%. Внедиагональные компоненты оказались примерно на 3 порядка меньше диагональных, таким образом, $\mathbf{e}_x$ и $\mathbf{e}_y$ можно считать собственными векторами тензора деформационной температуры. Высокочастотный характер основной моды позволяет ограничить время осреднения несколькими десятками T_0. Подставив в (4) и (5) тензор $\left\langle\tilde{\mathbf{A}}_k\tilde{\mathbf{A}}_k\right\rangle$ в диагональном виде и ограничиваясь учетом взаимодействия только с первой координационной сферой (в этом случае $\hat{A}_k$ и $\hat{\Pi}_k$ не зависят от k), получим

[1] Объем и форма образца являются постоянными, что препятствует тепловому расширению и приводит к возникновению тепловых напряжений.

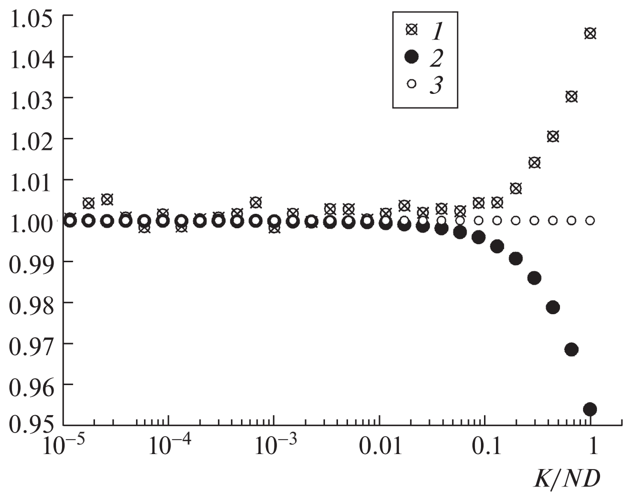

Рис. 1. Зависимость от средней кинетической энергии, приходящейся на частицу (в единицах D), в начальный момент времени отношений: диагональных компонент деформационной температуры Θ (в единицах Θ_0), шаровых частей функций Грюнайзена Γ_e (1)–(3) и Γ (8) и диагональных компонент функции Грюнайзена $\mathbf{\Gamma}_e$. Здесь и на рис. 2, 3: *1* – $\dfrac{\Theta}{\Theta_0}$, *2* – $\dfrac{\Gamma_e}{\Gamma}$, *3* – $\dfrac{\Gamma_{e,yy}}{\Gamma_{e,xx}}$.

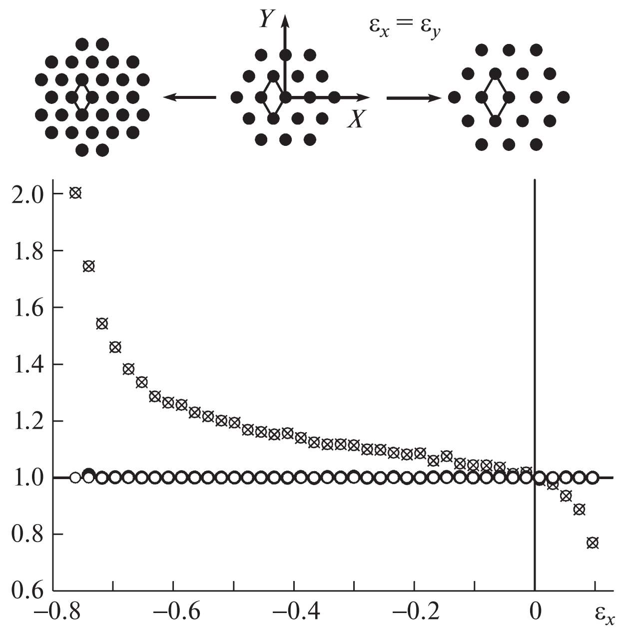

Рис. 2. Зависимость от объемной деформации отношений: диагональных компонент деформационной температуры Θ (в единицах Θ_0), шаровых частей функций Грюнайзена Γ_e (1)–(3) и Γ (8) и диагональных компонент функции Грюнайзена $\mathbf{\Gamma}_e$. Над графиком показаны направления главных осей тензора деформации, структура решетки относительно недеформированной конфигурации (в центре), элементарная ячейка и связь между компонентами тензора деформации.

$$\mathbf{\Gamma} = -\frac{1}{2N\hat{A}^2}\frac{\hat{A}^2\hat{\Pi}''' + \Theta\hat{A}\hat{\Pi}'' - \Theta\hat{\Pi}'}{\hat{A}\hat{\Pi}'' + \Theta\hat{\Pi}'}\sum_k \hat{\mathbf{A}}_k\hat{\mathbf{A}}_k, \quad (8)$$

где N – количество частиц на первой координационной сфере. Далее введем обозначение: $\mathbf{\Gamma}_e$ – функция Грюнайзена, рассчитанная по формуле (1) с использованием значений внутренней энергии (2) и тензора напряжений (3), полученных в ходе вычислительного эксперимента.

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОСТИ ТЕПЛОВОГО ДВИЖЕНИЯ И ДЕФОРМАЦИИ НА ФУНКЦИЮ ГРЮНАЙЗЕНА

В результате моделирования для треугольной решетки в ненапряженном состоянии получено отношение диагональных компонент тензора деформационной температуры $\Theta = \Theta_0 = 1.435 \pm 0.016$. Также обнаружено, что на значение Θ не оказывают влияния ни размер системы, ни тип парных центральных потенциалов (рассматривались потенциал Морзе, гармонический потенциал и потенциал Леннард-Джонса), ни учет взаимодействия со следующими координационными сферами. Увеличение интенсивности теплового движения в 10 раз приводит, как показано на рис. 1, к незначительному росту Θ на 4.5%. Показано, что отклонение шаровой части Γ тензорной функции Грюнайзена (8) от Γ_e, полученной в ходе численного эксперимента, также не превышает 4.5%; для уменьшения погрешности требуется учет следующих членов в разложении по деформационной температуре.

Установлено, что только при наличии конечной однородной деформации возникает ярко выраженное изменение соотношения диагональных компонент и деформационной температуры и функции Грюнайзена. На рис. 2 и 3 приведены графики зависимости этих величин от ε_x для объемной деформации и деформации формоизменения; ε_x и ε_y – линейные части тензора деформаций Коши–Грина, оси x и y соответствуют направлениям вдоль связи с ближайшим соседом отсчетной частицы и перпендикулярно ей. Растяжение решетки вдоль гидростатической линии (рис. 2) приводит к уменьшению коэффициента Θ, а потеря устойчивости равновесия происходит из-за продольной деформации связей, т.е. их разрыва. При объемном сжатии наблюдается рост Θ в два раза при деформации на 80%. Это означает, что деформации в направлении, перпендикулярном связям, существенно превышают продольные деформации, т.е. имеет место сдвиговая форма потери устойчивости. Вместе с тем в силу сим-

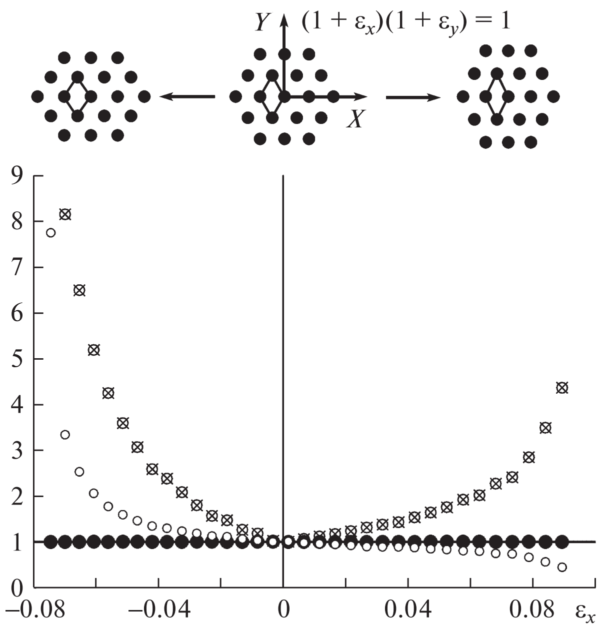

Рис. 3. Зависимость от деформации формоизменения отношений: диагональных компонент деформационной температуры Θ (в единицах Θ_0), шаровых частей функций Грюнайзена Γ_e (1)–(3) и Γ (8) и диагональных компонент функции Грюнайзена $\mathbf{\Gamma}_e$. Над графиком показаны направления главных осей тензора деформации, структура решетки относительно недеформированной конфигурации (в центре), элементарная ячейка и связь между компонентами тензора деформации.

метрии решетки функция Грюнайзена имеет шаровой вид.

При приближении к границам области устойчивости в пространстве деформаций[2] вдоль линии постоянного объема (рис. 3) величина Θ стремится к бесконечности, что также говорит о сдвиговом характере потери устойчивости. Кроме того, отношение диагональных компонент функции Грюнайзена существенно зависит не только от девиатора тензора деформации, но и от того, какая граница области устойчивости рассматривается, что наглядно демонстрирует необходимость использования уравнения состояния Ми–Грюнайзена в тензорном виде.

Таким образом, в данной работе для простой двумерной кристаллической решетки получено уравнение состояния Ми–Грюнайзена в тензорном виде, асимптотически точное при низком уровне теплового движения. Показано, что скалярный коэффициент Грюнайзена не позволяет описать состояние решетки при наличии деформации формоизменения, т.е. необходим учет тензорного характера функции Грюнайзена. В то же время соотношение компонент тензорной температуры оказывает существенное влияние на значение функции Грюнайзена при любых деформациях. Полученное определяющее соотношение может быть использовано в пакетах прикладных программ для моделирования термомеханических процессов в деформируемых твердых телах. Результаты данной работы позволили увеличить точность расчета напряженного состояния на 20%.

Авторы выражают искреннюю благодарность за полезные обсуждения и замечания в ходе работы В.А. Кузькину, Н.Ф. Морозову и А.Б. Фрейдину.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках проектной части государственного задания в сфере научной деятельности (№ 9.2091.2014/K) и гранта Президента Российской Федерации № МК-1820.2017.1.

[2] См.[13, 14] об определении областей устойчивости треугольной решетки в пространстве деформаций и физическом смысле их границ

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Гольдштейн Р.В., Морозов Н.Ф.* // Физ. мезомеханика. 2007. Т. 10. №. 5. С. 17–30.
2. *Anderson O.L.* // Geophys. J. Intern. 2000. V. 143. P. 279–294.
3. *Кривцов А.М., Кузькин В.А.* // Изв. РАН. МТТ. 2011. №. 3. С. 67–82.
4. *Kuzkin V.A., Krivtsov A.M.* // Phys. Status Solidi B. 2015. V. 252. №. 7. P. 1664–1670.
5. *Holian B.L., Hoover W.G., Moran B., Straub G.K.* // Phys. Rev. A. 1980. V. 22. № 6. P. 2798–2808.
6. *Hoover W.G., Hoover C.G.* // Phys. Rev. E. 2010. V. 81. 046302.
7. *Barton M.A., Stacey F.D.* // Phys. Earth and Planet. Interiors. 1985. V. 39. P. 167–177.
8. *Блехман И.И.* Теория вибрационных процессов и устройств. Вибрационная механика и вибрационная техника. СПб.: Руда и металлы, 2013. 640 с.
9. *Vashchenko V.Ya., Zubarev V.N.* // Soviet Phys. Solid State. 1963. V. 5. P. 653–655.
10. *Nie C., Zong B., Wang J.* // Physica B: Condensed Matter. 2015. V. 468/469. P. 7–10.
11. *Stacey F.D., Davis P.M.* // Phys. Earth and Planetary Interiors. 2004. V. 142. P. 137–184.
12. *Кривцов А.М.* Деформирование и разрушение тел с микроструктурой. М.: Физматлит, 2007. 304 с.
13. *Подольская Е.А., Кривцов А.М., Панченко А.Ю., Ткачев П.В.* // ДАН. 2012. Т. 442. № 6. С. 755–758.
14. *Podolskaya E.A., Panchenko A.Yu., Freidin A.B., Krivtsov A.M.* // Acta Mech. 2016. V. 227. № 1. P. 185–201.