

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Институт прикладной математики и механики
Кафедра «Теоретическая механика»

Работа допущена к защите
Зав. кафедрой, д.ф.-м.н., проф.
_____ А. М. Кривцов
« » _____ 2017 г.

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание академической степени

МАГИСТРА

**Тема: Локальные и нелокальные динамические процессы в двумерных
решётках**

Направление: 01.04.03 - Механика и математическое моделирование

Выполнила: студентка гр. 63604/1 _____ А.Е. Осокина

Руководитель: д.ф.-м.н., проф. _____ А.В. Порубов

Санкт-Петербург
2017

Содержание

1	Введение	2
2	Линейная локальная модель	7
3	Нелокальная линейная модель	10
4	Дисперсионный анализ	12
5	Переход к континуальным уравнениям	15
5.1	Локальная модель	15
5.2	Нелокальная модель	18
6	Нелинейное взаимодействие	19
7	Заключение	20
	Список литературы	21

1 Введение

Исследования в области описания динамики распространения плоских волн в различных кристаллических решётках связаны, в первую очередь, с именем М. Борна [1], чьи работы датируются началом XX века и не теряют актуальности и по сей день в связи с развитием нанотехнологий и нанoeлектроники. Так, задача о распространении линейной волны в одномерной моноатомной цепочке, в которой частицы представляются материальными точками с определённой массой, а межатомные связи - жёсткими пружинами, является классической. В дальнейшем, задача усложнилась: рассматривались частицы с разными массами (Рис.1) или различными жесткостями, а также обобщения на нелинейность и нелокальность межатомного взаимодействия [1–6, 9–11].

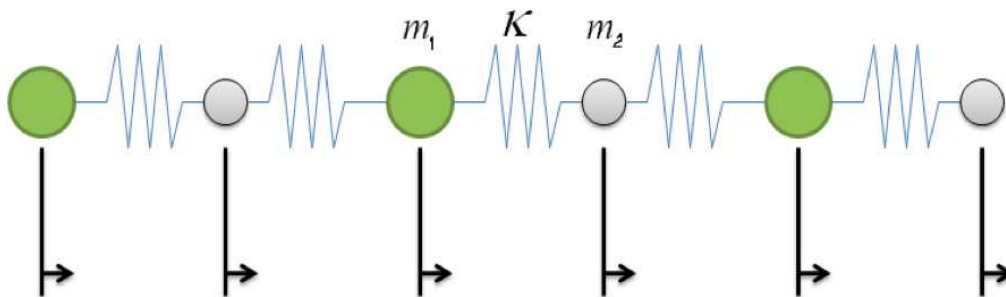


Рис. 1: Цепочка с двумя типами частиц

Прежде всего решались задачи в линейном приближении. Так, в работе [2] к описанию динамических процессов в решётках был применён тензорный подход, с его применением исследовались упругие свойства идеальных монокристаллов и наноструктур. Была описана методика, позволяющая получить связь макроскопических характеристик с параметрами микроструктуры в рамках линейной теории упругости, а также проведён сравнительный анализ трех моделей межатомного взаимодействия: силовой, моментной и угловой. Рассматриваются структуры, имеющие одноатомные кристаллические решетки (треугольная, квадратная, кубическая, ОЦК, ГЦК) и двухатомные кристаллические решетки (графен, алмаз). В монографии [3] было представлено обсуждение динамики для совершенных и несовершенных решеток и их связи с континуальными теориями четырех основных типов поведения: упругость, пьезоэлектричество, вязкоупругость и пластичность в рамках континуальной механики. Далее, были описаны процессы распространения волн в решётках различных типов, например, двухатомных [1, 10–12], а двумерность описывалась в рамках треугольной, квадратной, и гексагональной [3, 9, 13, 17, 18], трёхмерные модели также изучались [16].

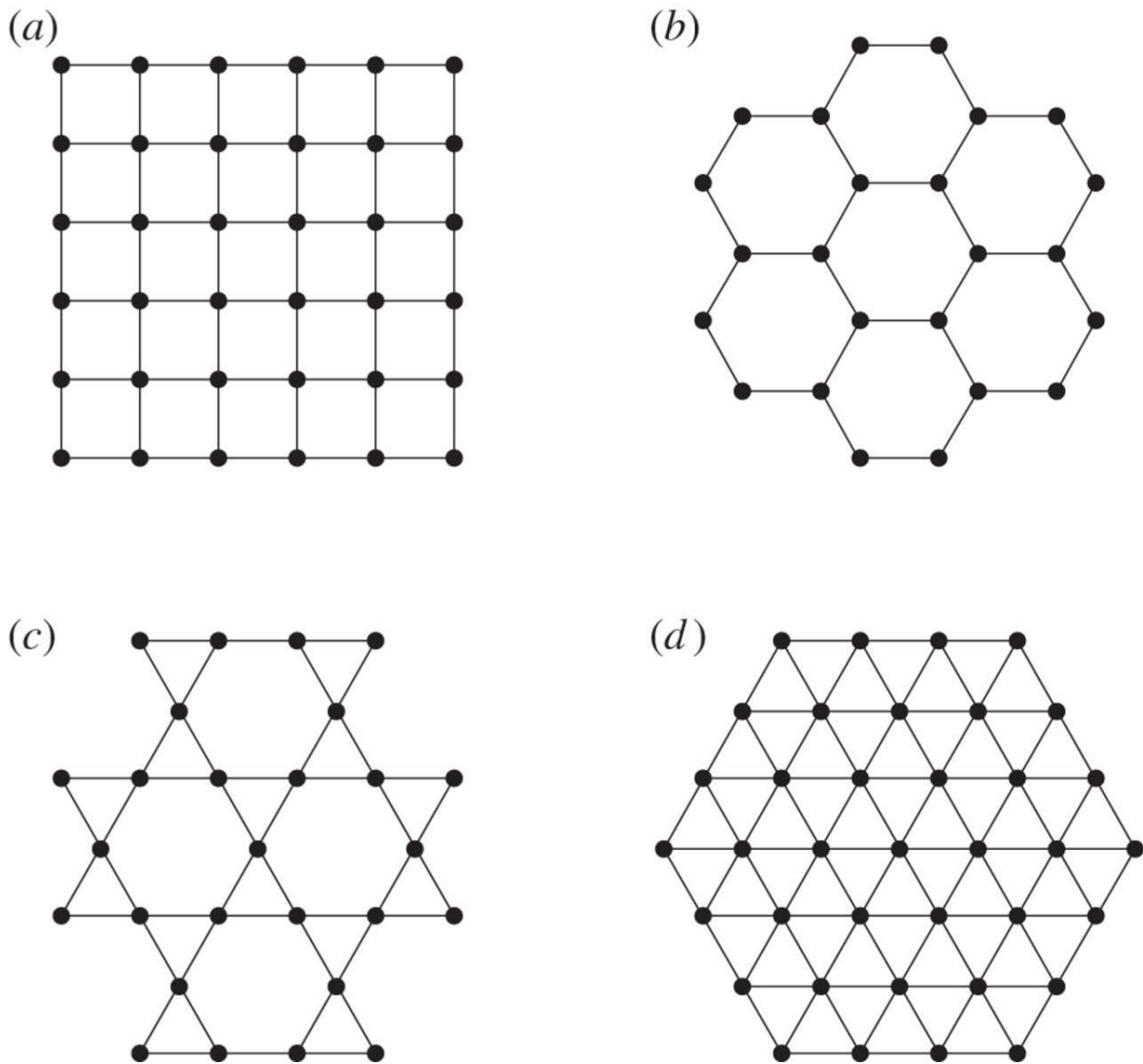


Рис. 2: Основные виды двумерных решёток: а)квадратная б)гексагональная д)треугольная

Роль нелинейных взаимодействий приобрела актуальность после доклада в 1955 г. Ферми, Пасты и Улама, в котором было описано моделирование одномерной нелинейной решетки, которая не показывала энергетического равнораспределения, т.е. практически вся энергия была сосредоточена в первой моде, и таким образом, нелинейность не гарантирует равного распределения энергии по модам, см. [4, 14]. В работе [4] также показано, что локализованное коротковолновое начальное возбуждение (затем называемое «оптическим») не передаёт энергию в ближайшие соседние гармоники, а при увеличении амплитуды порождает новые моды, и вместо термализации получается квазипериодическое движение. В книге [5] рассматриваются аспекты нелинейной динамики деформируемых твердых тел (известных как неупругие кристаллы), где нелинейные эффекты сочетаются или конкурируют друг с другом. Рассматривались различные модели - как дискретные, так и континуальные, в частности, воздействия тепловой, электрической или магнитной природы в кристаллической структуре, и анализировались с помощью уравнений рациональной механики.

Впоследствии, по мере усложнения моделей в связи с желанием получить более точные резуль-

таты, появилась необходимость в нелокальном подходе к рассмотрению кристаллических структур: он позволял учесть влияние более дальних частиц на динамику рассматриваемой дискретной системы [6–8]. Изучение дискретной модели взаимодействия частиц, не являющихся ближайшими соседями в решетке привлекло значительный интерес из-за специфики дисперсии распространяющихся волн. [5, 9–11, 15, 17–19]. В частности, это важно для изучения влияния микроструктуры материалов. Динамические процессы в одномерных решетках исследуются более широко как в линейном, так и в нелинейном рассмотрении [3, 5, 10], а двумерные решетки в основном рассматриваются в линейном случае [10, 17, 18]. Некоторые двумерные процессы могут быть смоделированы в одномерном приближении, например, распространение плоских волн, а их поперечная неустойчивость требует двумерного рассмотрения. Некоторые физические явления не могут быть смоделированы в одномерном случае. В частности, это касается ауксетичного поведения [20–25]. Структурные особенности решетки обычно учитываются при описании отрицательного коэффициента Пуассона. [22, 26–28] В работе [20] было получено, что отрицательное значение коэффициента Пуассона получается для металлов с кубической структурой именно из-за особенностей их кристаллической решетки. Соотношения для коэффициента Пуассона в кубических материалах можно найти в [29]. Динамические процессы в решетках изучаются с использованием как дискретного, так и континуального моделирования [3, 5]. В линейном случае можно анализировать как дискретные, так и континуальные уравнения. Однако лишь некоторые дискретные нелинейные уравнения, такие как, например, уравнение решетки Тоды, имеют точные решения. Поэтому для получения континуальных определяющих уравнений в нелинейном случае необходим подход, основанный на длинноволновом пределе исходного дискретного уравнения. Известный континуальный предел акустической ветви [3, 5] требует длинноволнового приближения и соответствует дискретной модели только для малых волновых чисел.

В процессе исследований возник интерес к так называемым «ауксетикам» — материалам с отрицательным значением коэффициента Пуассона. Интерес обусловлен широким спектром возможных применений подобных материалов в различных сферах промышленности и высоких технологий [30]. Например, при создании полупроводников с низкой теплопроводностью и ультравысокой мобильностью дырок [31], в аэрокосмическом приборостроении [32]. Также в медицине [33] подобные материалы применяются для создания кровеносных сосудов, которые будут стремиться к увеличению толщины стенки (а не уменьшению) в ответ на пульсацию крови, что предотвращает разрыв сосуда. Спектр применения варьируется от спорта [34] и до ВПК и оборонной промышленности [35]

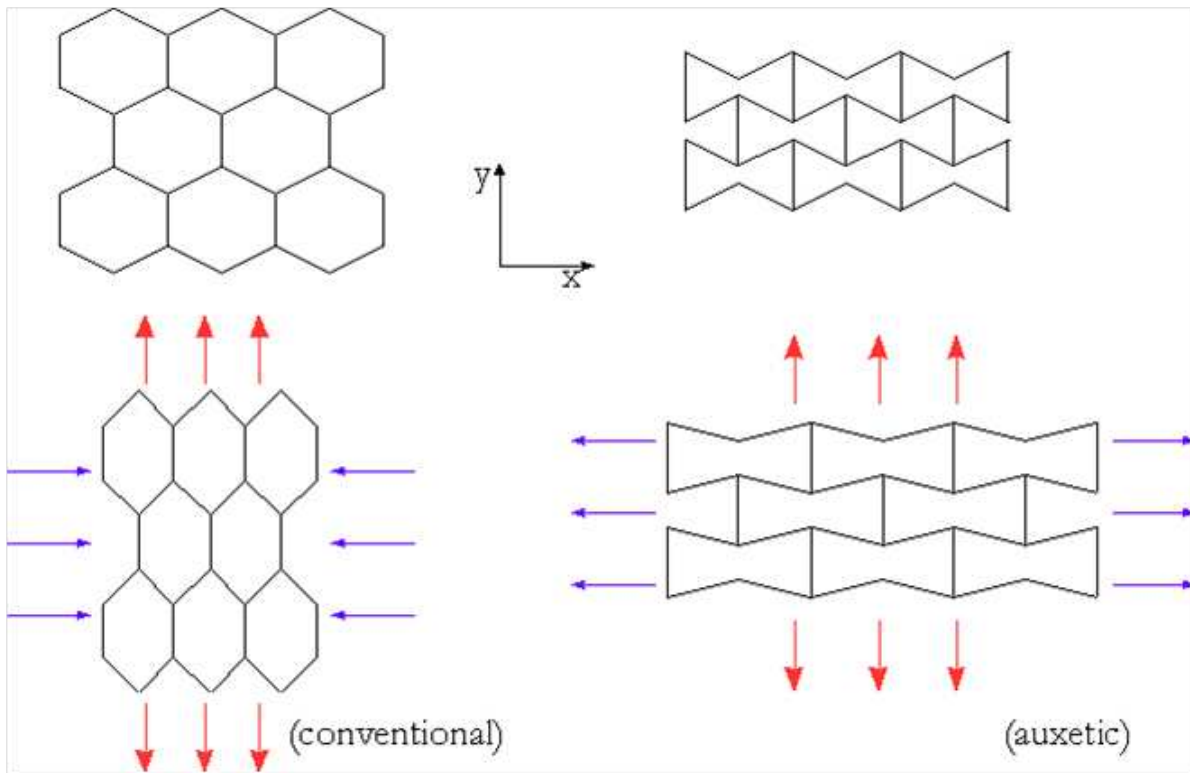


Рис. 3: Поведение ауксетиков при растяжении

В работах ряда исследователей, например, [36] было получено, что особенно много ауксетиков встречается среди кристаллов с кубической и квадратной решётками являются ауксетиками. Для того, чтобы учесть и описать подобные свойства, необходимо модифицировать классическую модель теории упругости. Чаще всего используется подход, при котором частицы представляются уже не как материальные точки, а как тела, обладающие формой и массой, с введёнными дополнительно степенями свободы. Например, в работах [26] рассматривается система связей анизотропных частиц, а в работе [28] с этой целью учитывались моментные взаимодействия: квадратная решётка моделировалась как совокупность жёстких круглых частиц, обладающих двумя трансляционными и одной вращательной степенью свободы.

В данной работе изучается возможность наличия связи между нелокальностью и проявлением ауксетичных свойств у материалов, обладающих квадратной кристаллической решёткой, а также вводится новый формализм, призванный упростить вывод нелокальных уравнений. Для этого мы основываем метод построения модели на использовании операторов сдвига и генерации нелокальных моделей любого порядка как функций локальной. [15] Целью использования подобного подхода является желание выяснить, какие дополнительные эффекты привносит в модель учёт нелокальных взаимодействий, а также понять, как нелокальность влияет на упругие константы, i.e., каким образом они меняются при переходе от локального описания к нелокальному. Также, линейный анализ используется для изучения особенностей дисперсионного соотношения, обусловленных включением в рассмотрение более дальних взаимодействий на основе длинноволнового приближения плоской волны. Кроме того, континуальный предел позволяет увидеть

влияние введения дополнительных дальних взаимодействий на ауксетическое поведение модели.

Перечисленное в предыдущем абзаце применяется к квадратной кристаллической решётке, представленной как совокупность массовых частиц, соединённых пружинами.

2 Линейная локальная модель

Рассматривается квадратная решётка с одинаковыми массами частиц M , см. Рис. 4. Силы взаимодействия между частицами моделируются пружинами с различными жесткостями в продольном/ поперечном и диагональном направлениях. Жесткости пружин полагаются равными C_1 и C_2 соответственно.

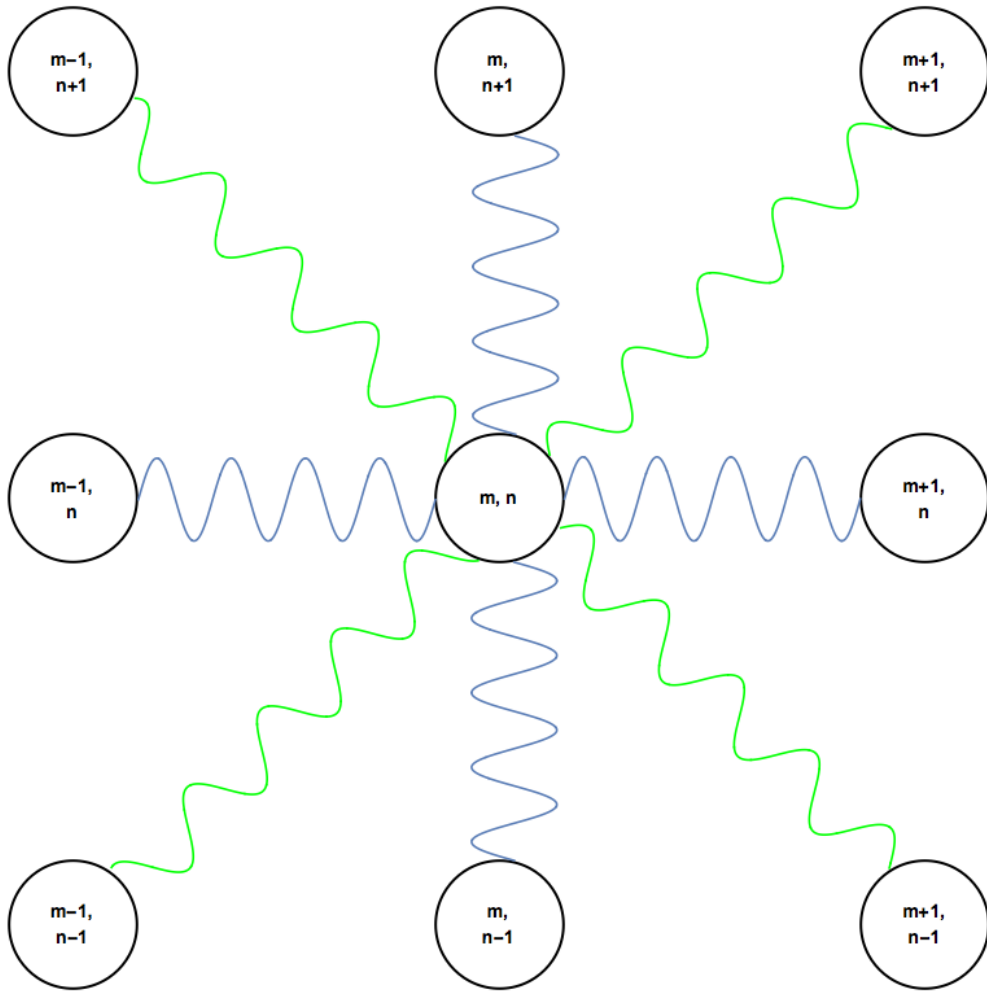


Рис. 4: Локальная модель квадратной решётки с диагональными пружинами

Введём вектор смещений для массы с номером m, n в следующем виде: $\vec{U}_{m,n} = u_{m,n}\vec{i} + v_{m,n}\vec{j}$, где $u_{m,n}, v_{m,n}$ – горизонтальная и вертикальная компоненты вектора смещения, а \vec{i}, \vec{j} – базовые векторы, соответствующие направлению от рассматриваемой частицы к частице, взаимодействие с которой

рассматривается.

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

Поскольку базовые векторы определяют геометрию решётки, потенциально возможно расширить применение данного формализма на решётки другого типа без сильных изменений в самой модели, просто варьируя выражения для векторов.

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 через операторы сдвига, заменив удлинения на следующие операторы, действующие на $u_{m,n}$ и $v_{m,n}$ [15]:

$$D_1 = \sum_m \frac{h^m}{m!} \frac{d^m}{dx^m} = e^{h \frac{d}{dx}} \tag{2}$$

$$D_2 = \sum_n \frac{h^n}{n!} \frac{d^n}{dy^n} = e^{h \frac{d}{dy}} \tag{3}$$

$$D_1^\dagger = \sum_m \frac{-h^m}{m!} \frac{d^m}{dx^m} = e^{-h \frac{d}{dx}} \tag{4}$$

$$D_2^\dagger = \sum_n \frac{-h^n}{n!} \frac{d^n}{dy^n} = e^{-h \frac{d}{dy}} \tag{5}$$

$$D_1 * D_2 = \sum_{m,n} \left(\frac{h^m}{m!} \frac{d^m}{dx^m} + \frac{h^n}{n!} \frac{d^n}{dy^n} \right) = e^{h \frac{d}{dx} + h \frac{d}{dy}} \tag{6}$$

$$D_1 * D_2^\dagger = \sum_{n,m} \left(\frac{h^m}{m!} \frac{d^m}{dx^m} + \frac{-h^n}{n!} \frac{d^n}{dy^n} \right) = e^{h \frac{d}{dx} - h \frac{d}{dy}} \tag{7}$$

$$D_1^\dagger * D_2 = \sum_{n,m} \left(\frac{-h^m}{m!} \frac{d^m}{dx^m} + \frac{h^n}{n!} \frac{d^n}{dy^n} \right) = e^{-h \frac{d}{dx} + h \frac{d}{dy}} \tag{8}$$

$$D_1^\dagger * D_2^\dagger = \left(\sum_{n,m} \frac{-h^m}{m!} \frac{d^m}{dx^m} + \frac{-h^n}{n!} \frac{d^n}{dy^n} \right) = e^{-h \frac{d}{dx} - h \frac{d}{dy}} \tag{9}$$

, которые действуют на функцию $u_{m,n}$ следующим образом:

$$\begin{aligned}
D_1 u_{m,n} &= u_{m+1,n}, & D_1(x_m, y_n) &= u(x_m + h, y_n) = u(x_{m+1}, y_n) \\
D_1^\dagger u_{m,n} &= u_{m-1,n}, & D_1^\dagger(x_m, y_n) &= u(x_m - h, y_n) = u(x_{m-1}, y_n) \\
D_2 u_{m,n} &= u_{m,n+1}, & D_2(x_m, y_n) &= u(x_m, y_n + h) = u(x_m, y_{n+1}) \\
D_2^\dagger u_{m,n} &= u_{m,n-1}, & D_2^\dagger(x_m, y_n) &= u(x_m, y_n - h) = u(x_m, y_{n-1}) \\
D_1 * D_2 u_{m,n} &= u_{m+1,n+1}, & D_1 * D_2(x_m, y_n) &= u(x_m + h, y_n + h) = u(x_{m+1}, y_{n+1}) \\
D_1 * D_2^\dagger u_{m,n} &= u_{m+1,n-1}, & D_1 * D_2(x_m, y_n) &= u(x_m + h, y_n - h) = u(x_{m+1}, y_{n-1}) \\
D_1^\dagger * D_2 u_{m,n} &= u_{m-1,n+1}, & D_1^\dagger * D_2(x_m, y_n) &= u(x_m - h, y_n + h) = u(x_{m-1}, y_{n+1}) \\
D_1^\dagger * D_2^\dagger u_{m,n} &= u_{m-1,n-1}, & D_1^\dagger * D_2(x_m, y_n) &= u(x_m - h, y_n - h) = u(x_{m-1}, y_{n-1})
\end{aligned} \tag{10}$$

Для того, чтобы получить дискретные уравнения движения массы с номером m, n , необходимо записать Лагранжиан

$$T_{m,n} - V_{m,n} = \frac{m}{2}(\dot{u}_{m,n}^2 + \dot{v}_{m,n}^2) - V_{m,n}, \tag{11}$$

где $V_{m,n} = V(u_m, v_n)$ - потенциальная энергия, отвечающая за взаимодействие частицы (m, n) с соседними частицами, указанными на Рис. 4. Уравнения движения получаются путем использования вариационного принципа Гамильтона- Остроградского.

Можно выделить два типа взаимодействий: взаимодействие центральной частицы (m, n) с ближайшими соседями по вертикали и горизонтали моделируется линейными пружинами с жесткостями C_1 и по диагонали пружинами с жёсткостью C_2 . На основе формализма, основанного на использовании, строим $V_{m,n} = V_l$ для случая линейно-упругих пружин:

$$\begin{aligned}
V_l = \frac{1}{2} & (C_1((D_1 - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_1)^2 + C_1((D_1^\dagger - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_2)^2 + C_1((D_2 - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_3)^2 + C_1((D_2^\dagger - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_4)^2 + \\
& C_2(((D_1 D_2 - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_5)^2 + ((D_1^\dagger D_2^\dagger - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_6)^2 + ((D_1^\dagger D_2 - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_7)^2 + \\
& ((D_1 D_2^\dagger - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_8)^2), \tag{12}
\end{aligned}$$

где $D_1 U_{m,n} = U_{m+1,n} = (u_{m+1,n}, v_{m+1,n})$, $D_2 U_{m,n} = U_{m,n+1} = (u_{m,n+1}, v_{m,n+1})$, etc.

Из вариационного принципа получаем дискретные уравнения движения:

$$\begin{aligned}
m\ddot{u}_{m,n} = C_1(D_1 + D_1^\dagger - 2)u_{m,n} + \frac{C_2}{2}[(D_1 * D_2 + D_1 * D_2^\dagger + D_1^\dagger * D_2 + D_1^\dagger * D_2^\dagger - 4)u_{m,n} + \\
(D_1 * D_2 - D_1 * D_2^\dagger + D_1^\dagger * D_2 - D_1^\dagger * D_2^\dagger)v_{m,n}] \tag{13}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
m\ddot{v}_{m,n} = C_1(D_2 + D_2^\dagger - 2)v_{m,n} + \frac{C_2}{2}[(D_1 * D_2 + D_1 * D_2^\dagger + D_1^\dagger * D_2 + D_1^\dagger * D_2^\dagger - 4)v_{m,n} + \\
(D_1 * D_2 - D_1 * D_2^\dagger + D_1^\dagger * D_2 - D_1^\dagger * D_2^\dagger)u_{m,n}] \tag{14}
\end{aligned}$$

Полученные дискретные уравнения понадобятся в дальнейшем для вывода дисперсионного соотношения и сравнения с соотношением для нелокальной модели.

3 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 Рис. 5. Предполагается, что жёсткость пружин между частицами $(m,n) - (m+1, n) \neq (m,n) - (m+2, n)$, так что для удобства рассмотрения и описания нелокальности мы вводим 2 дополнительные коэффициенты жёсткости C_3 и C_4 для описания нелокальных взаимодействий в продольном/поперечном и диагональном направлениях соответственно.

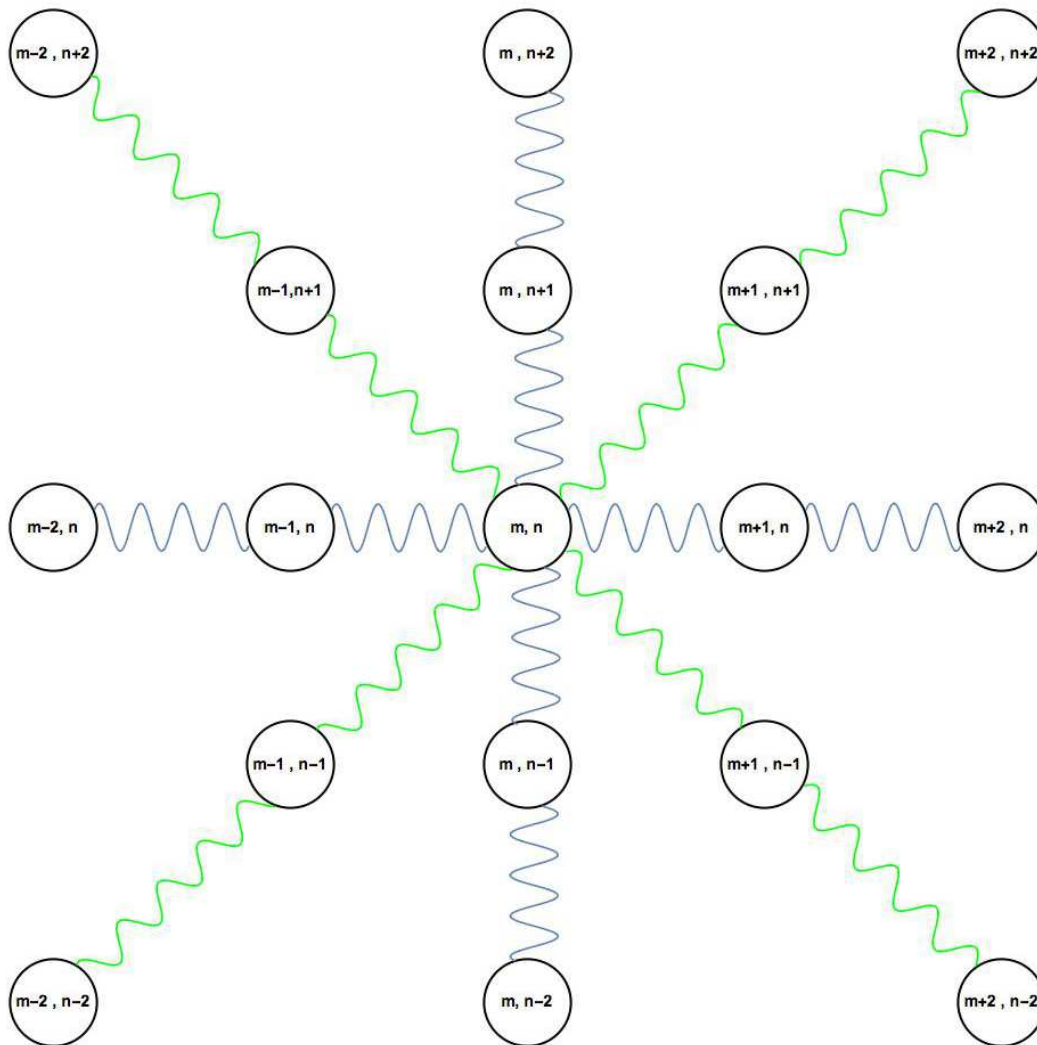


Рис. 5: Нелокальная решётка 2 порядка

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. (См. [15]) Соот-

ветственно, различные порядки нелокальности модели соответствуют различным же показателям степени. Покажем это на примере выведения уравнений для второго порядка нелокальности. В таком случае, энергия, описывающая только нелокальные взаимодействия есть

$$\begin{aligned}
V_n = & \frac{C_3}{2}(((D_1^2 - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_1)^2 + ((D_1^{\dagger 2} - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_2)^2 + ((D_2^2 - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_3)^2 + ((D_2^{\dagger 2} - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_4)^2 \\
& + \frac{C_4}{2}(((D_1^2 D_2^2 - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_5)^2 + ((D_1^{\dagger 2} D_2^{\dagger 2} - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_6)^2 + ((D_1^{\dagger 2} D_2^2 - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_7)^2 + ((D_1^2 D_2^{\dagger 2} - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_8)^2)
\end{aligned} \tag{15}$$

Полная потенциальная энергия взаимодействия будет учитывать и локальные, и нелокальные взаимодействия:

$$V_{m,n} = V_l + V_n \tag{16}$$

где V_l определена выражением (12). Кинетическая энергия по-прежнему определяется((11). Дискретные уравнения, полученные из вариационного принципа Гамильтона -Остроградского суть

$$\begin{aligned}
m\ddot{u}_{m,n} = & C_1(D_1 + D_1^\dagger - 2)u_{m,n} + C_3(D_1^2 + D_1^{\dagger 2} - 2)u_{m,n} + \\
& \frac{C_2}{2}((D_1 D_2 + D_1^\dagger D_2 + D_1 D_2^\dagger + D_1^\dagger D_2^\dagger - 4)u_{m,n} + (D_1 D_2 - D_1^\dagger D_2 - D_1 D_2^\dagger + D_1^\dagger D_2^\dagger)v_{m,n}) \\
& \frac{C_4}{2}((D_1^2 D_2^2 + D_1^{\dagger 2} D_2^2 + D_1^2 D_2^{\dagger 2} + D_1^{\dagger 2} D_2^{\dagger 2} - 4)u_{m,n} + (D_1^2 D_2^2 - D_1^{\dagger 2} D_2^2 - D_1^2 D_2^{\dagger 2} + D_1^{\dagger 2} D_2^{\dagger 2})v_{m,n}),
\end{aligned} \tag{17}$$

$$\begin{aligned}
m\ddot{v}_{m,n} = & C_1(D_2 + D_2^\dagger - 2)v_{m,n} + C_3(D_2^2 + D_2^{\dagger 2} - 2)v_{m,n} + \\
& \frac{C_2}{2}((D_1 D_2 + D_1^\dagger D_2 + D_1 D_2^\dagger + D_1^\dagger D_2^\dagger - 4)v_{m,n} + (D_1 D_2 - D_1^\dagger D_2 - D_1 D_2^\dagger + D_1^\dagger D_2^\dagger)u_{m,n}) \\
& \frac{C_4}{2}((D_1^2 D_2^2 + D_1^{\dagger 2} D_2^2 + D_1^2 D_2^{\dagger 2} + D_1^{\dagger 2} D_2^{\dagger 2} - 4)v_{m,n} + (D_1^2 D_2^2 - D_1^{\dagger 2} D_2^2 - D_1^2 D_2^{\dagger 2} + D_1^{\dagger 2} D_2^{\dagger 2})u_{m,n}).
\end{aligned} \tag{18}$$

Сравнение линейных локальной и нелокальной моделей будет проведено при помощи анализа дисперсионных соотношений.

4 Дисперсионный анализ

В этом разделе рассматривается влияние взаимодействий дальнего порядка на дискретное дисперсионное отношение на примере плоских волн. Также длинноволновой предел сравнивается с уравнениями модели кубической кристаллической решетки, дабы понять, может ли взаимодействие частицы с дальними соседями повлиять на проявление ауксетических особенностей полученной континуальной модели.

Рассмотрим распространение продольных плоских волн в горизонтальном направлении. В этом случае поперечное смещение $v_{m,n} = 0$, и изменений по n не происходит, т.е., соответствующие операторы сдвига равны нулю. В случае локальной модели имеем одно уравнение движения из (13), (14),

$$m\ddot{u}_m = (C_1 + C_2)(2(1 - D_1 + D_1^\dagger)u_m) \quad (19)$$

В случае нелокальной модели второго порядка получаем из (17), (18)

$$m\ddot{u}_m = (C_1 + C_2)(2(1 - D_1 + D_1^\dagger)u_m + (C_3 + C_4)(2(1 - D_1^2 + D_1^{\dagger 2})u_m). \quad (20)$$

Решение уравнений ищется в виде

$$u_m = A \exp i(k m - \omega t),$$

k - нормированное волновое число (т.к. уравнения дискретные), ω - частота.

Подставляя это выражение в (19), получим следующие локальное дисперсионное соотношение:

$$\omega^2 = \frac{2}{m}((C_1 + C_2)(1 - 2\cos k) \quad (21)$$

В то время как подстановка в (20) приводит к другому дисперсионному соотношению:

$$\omega^2 = \frac{2}{m}((C_1 + C_2)(1 - 2\cos k) + (C_3 + C_4)(1 - 2\cos 2k) \quad (22)$$

На Рис.6 приведены графики дисперсионных соотношений для локальной и нелокальной моделей. Видно, что учет нелокальности приводит к появлению дополнительных экстремумов.

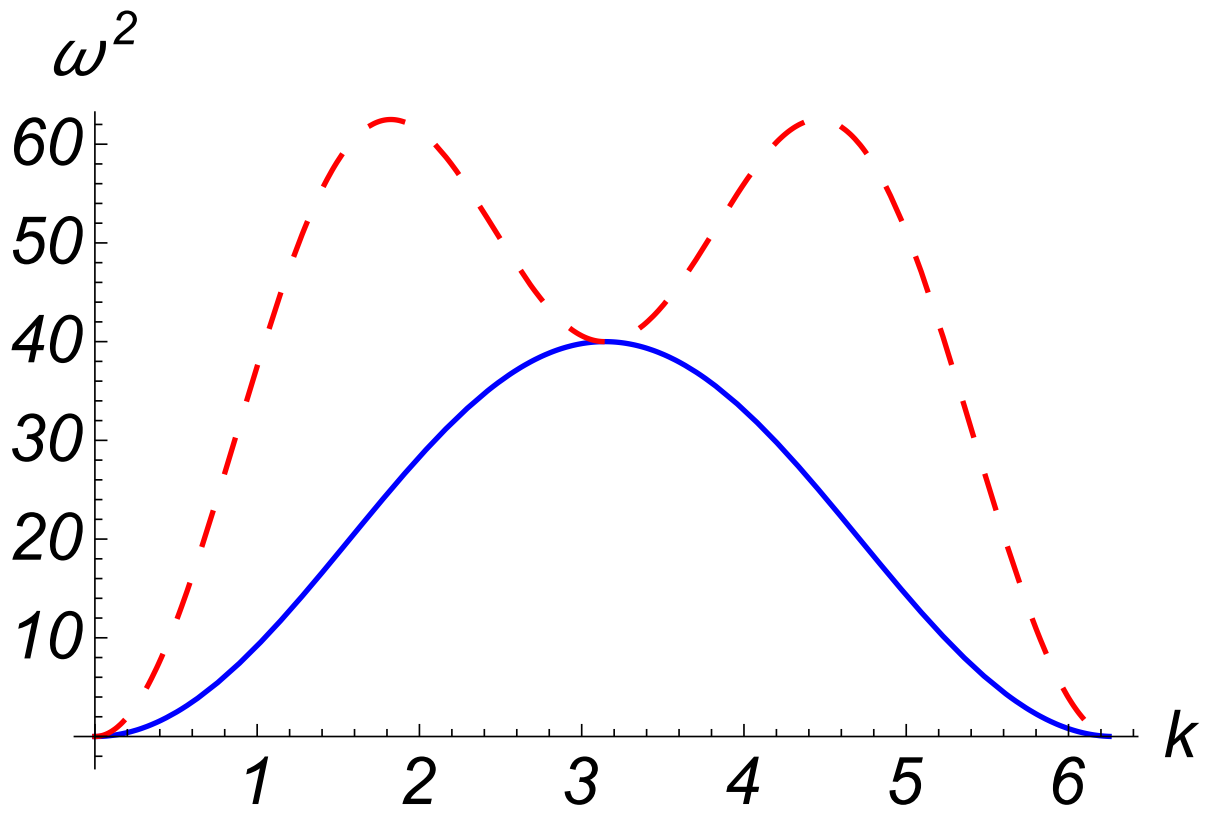


Рис. 6: Дисперсионные кривые для локальной и нелокальной моделей.

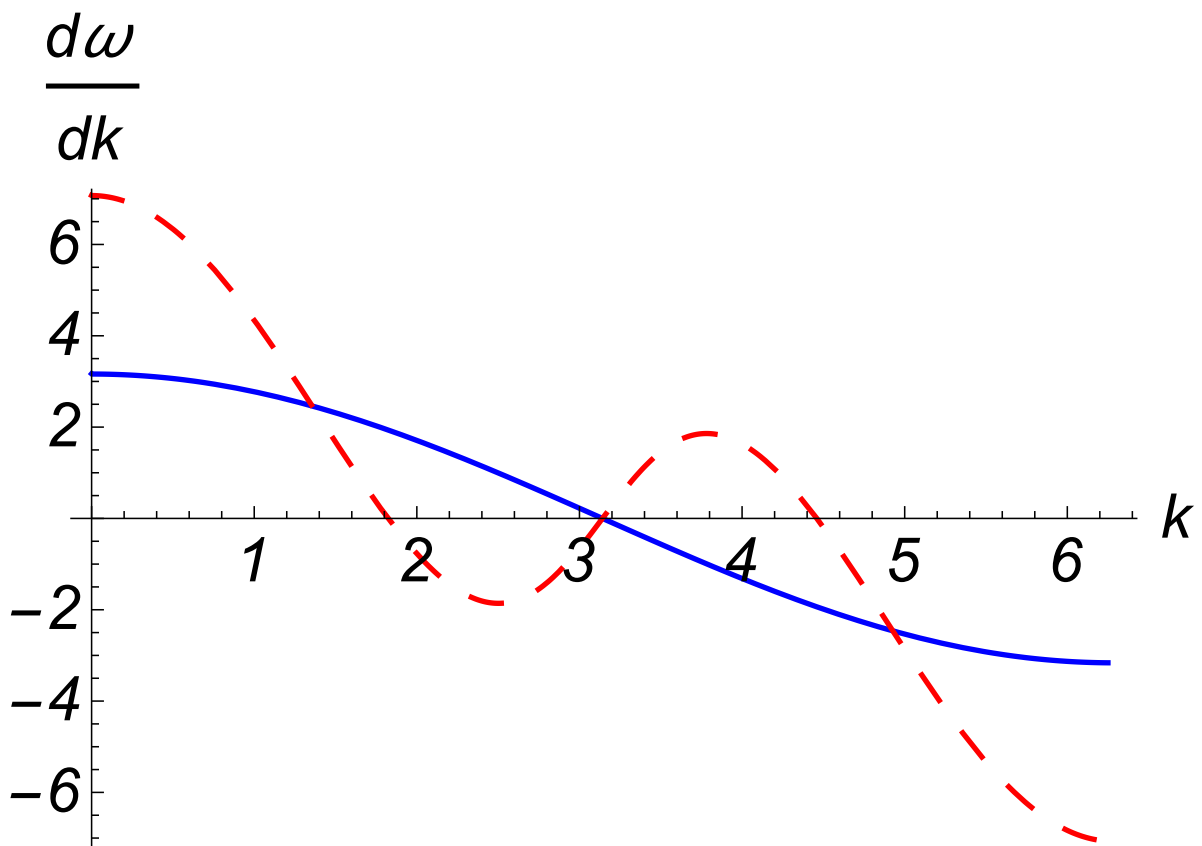


Рис. 7: Групповые скорости для для локальной и нелокальной моделей.

На графике для групповых скоростей на Рис. 7 видно, что наличие дополнительных максимумов отвечает за изменение знака групповой скорости.

Дисперсионные соотношения нелокальной модели при различных соотношениях между коэффициентами жесткости представлены на Рис. 8. Видно, что не при всех коэффициентах возможно появление дополнительных экстремумов.

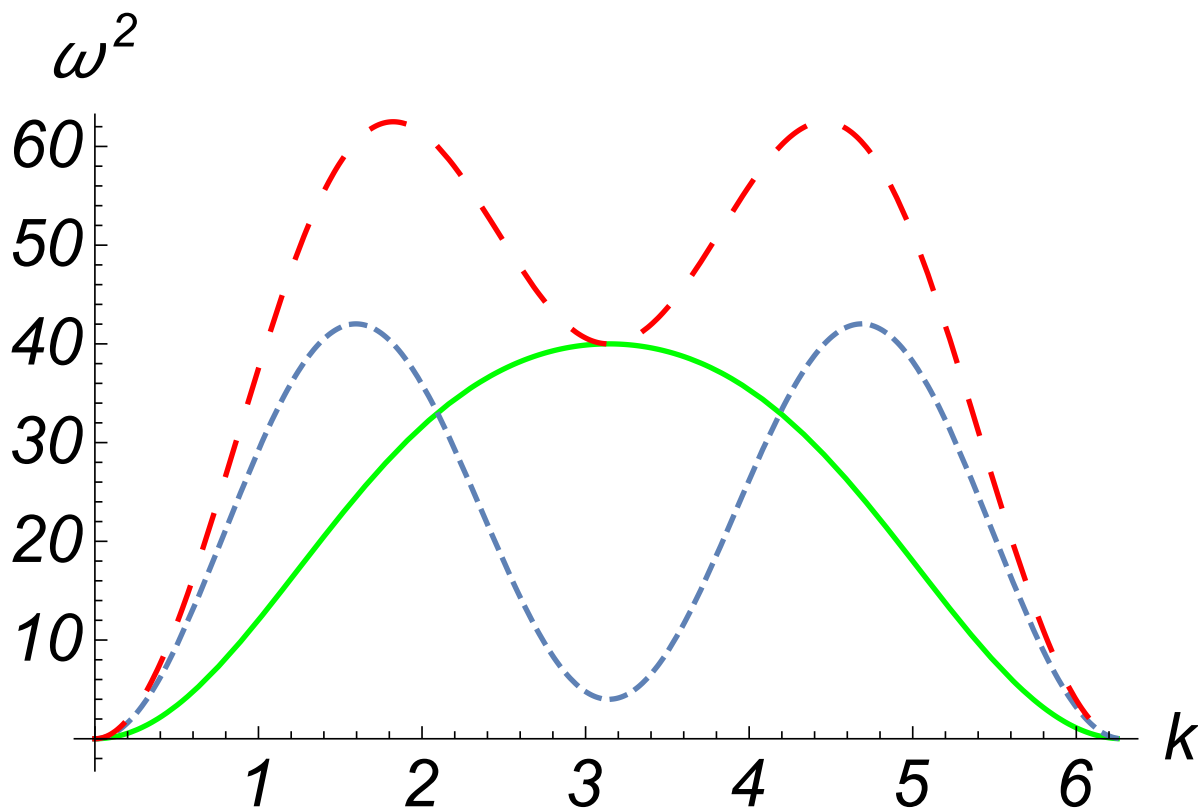


Рис. 8: Дисперсионные кривые для нелокальной модели при различных соотношениях между коэффициентами жесткости.

5 Переход к континуальным уравнениям

Для того, чтобы получить связь между упругими константами и параметрами решётки и делать 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 монотонные дифференцируемые функции $u(x, y, t)$ and $v(x, y, t)$, описывающие смещения в континуальной среде, которую предстоит получить [17]. Для того, чтобы получить точные выражения для функций смещения, необходимо использовать разложение в ряд Тейлора с удерживанием необходимого количества членов, и подставлять следующим образом:

$$D_1 u(x, y, t) \rightarrow u(x + a, y, t)$$

$$D_2 u(x, y, t) \rightarrow u(x, y + a, t), etc$$

5.1 Локальная модель

В результате, полученные континуальные уравнения имеют вид:

$$m\ddot{u}_{tt} = a^2[C_2(u_{yy} + 2v_{xy}) + (C_1 + C_2)u_{xx}] \quad (23)$$

$$m\ddot{v}_{tt} = a^2[C_2(v_{xx} + 2u_{xy}) + (C_1 + C_2)v_{yy}] \quad (24)$$

Теперь эти уравнения можно соотнести с уравнениями тела с кубической кристаллической решёткой, и получить связь между упругими константами и коэффициентами жесткости решётки:

$$C_{11} = \frac{C_1 + C_2}{a} \quad (25)$$

$$C_{12} = \frac{C_2}{a} \quad (26)$$

$$C_{44} = \frac{C_2}{a} \quad (27)$$

Из них видно, что подобные соотношения имеют место только при условии выполнения условия Коши, $C_{12} = C_{44}$, а именно, когда между однородно деформированными областями решетки действуют центральные силы.

Т.к. тело не изотропно, коэффициент Пуассона по разным направлениям будет принимать различные значения. Используя выражения для главных кристаллографических направлений кубической решётки [29], получаем:

$$\nu_{\langle 110, 001 \rangle} = \frac{4C_2^2}{C_1^2 + 5C_1C_2 + 2C_2^2} \quad (28)$$

$$\nu_{\langle 110, 1\bar{1}0 \rangle} = \frac{C_1^2 + C_1C_2 - 2C_2^2}{C_1^2 + 5C_1C_2 + 2C_2^2} \quad (29)$$

Видно, что с точки зрения исследования ауксетичного поведения, интерес представляет коэффициент Пуассона в направлении $\langle 110, 1\bar{1}0 \rangle$, т.к. только он может принимать отрицательные значения. Обозначение соответствует измерению ν в направлении $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ при растяжении вдоль $\langle 110 \rangle$. (См. Рис.9 и 10 для других коэффициентов) На рисунках приведены кристаллографические направления в кубической решётке, в случае с квадратной направлением считается двумерная проекция плоскости, т.е. прямая в соответствующей плоскости.

Отсюда получаем, в итоге, условие для ауксетичного поведения: $C_1 < C_3$

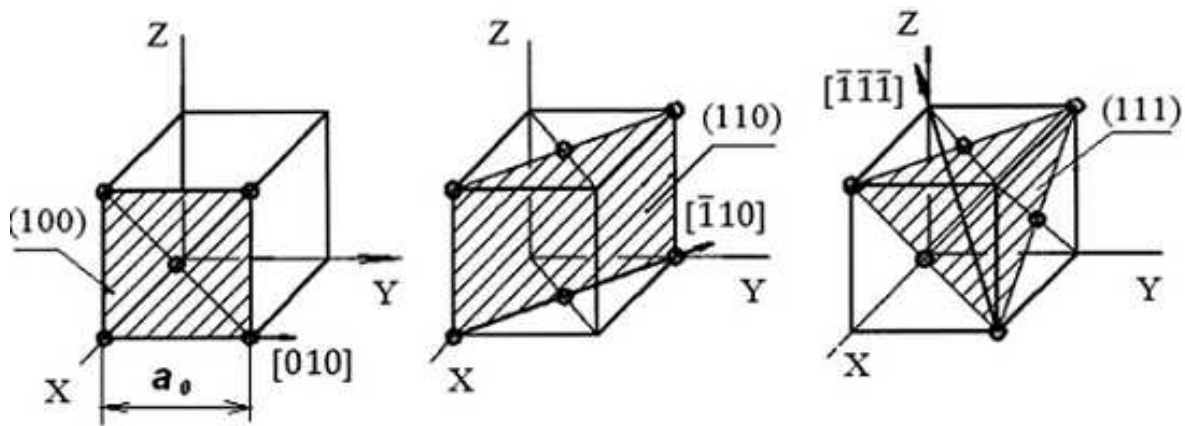


Рис. 9: Кристаллографические направления

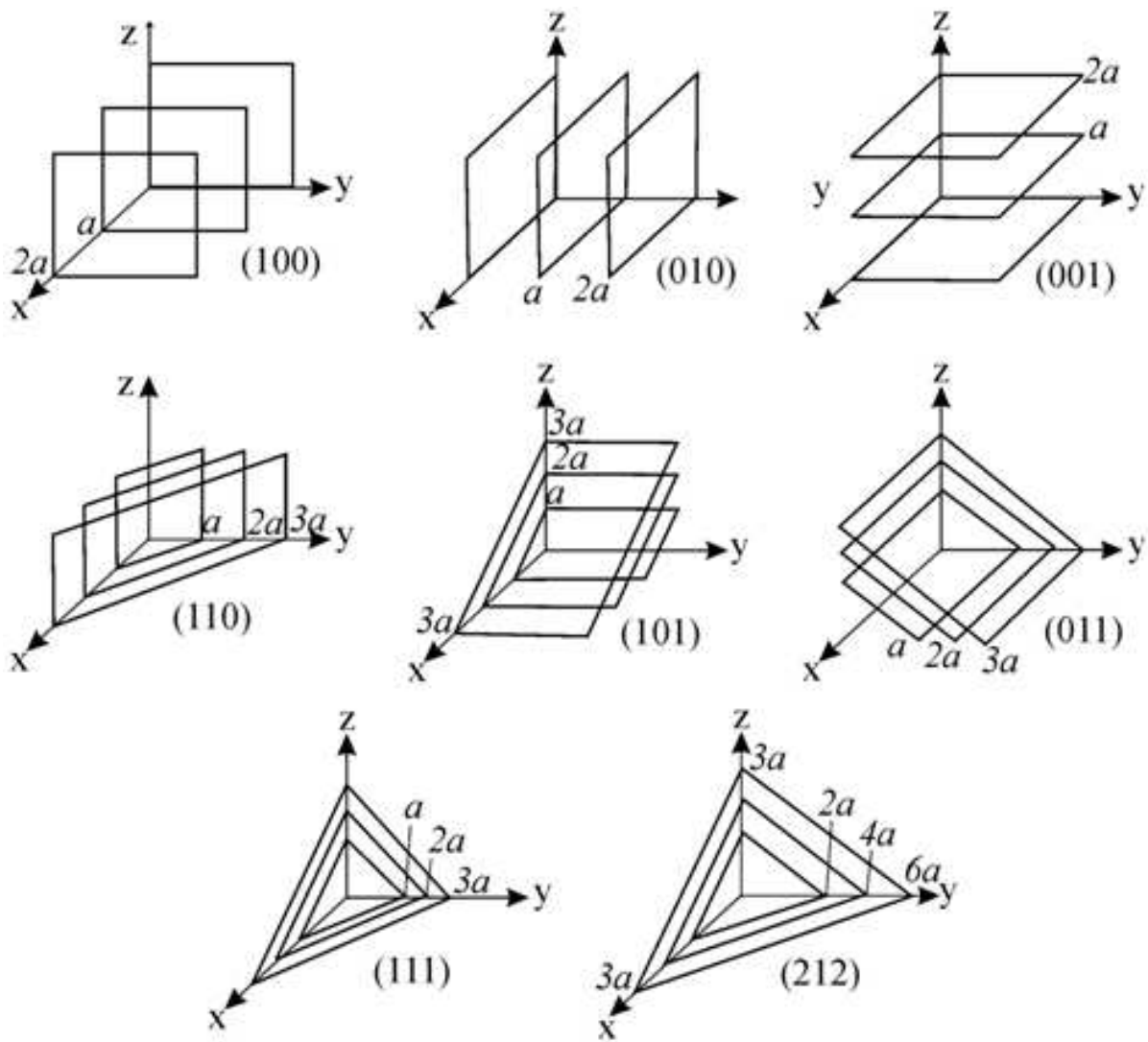


Рис. 10: Кристаллографические направления

5.2 Нелокальная модель

Проводя ту же самую процедуру линеаризации, что и в случае локальной модели (берём слабую нелинейность и оставляем 2 члена ряда Тейлора), получаем нелокальные континуальные уравнения:

$$m\ddot{u}_{tt} = a^2[(C_2 + 4C_4)u_{yy} + 2(C_2 + 4C_4)v_{xy} + (C_1 + C_2 + 4(C_3 + C_4))u_{xx}] \quad (30)$$

$$m\ddot{v}_{tt} = a^2[(C_2 + 4C_4)v_{xx} + 2(C_2 + 4C_4)u_{xy} + ((C_1 + C_2 + 4(C_3 + C_4))v_{yy})] \quad (31)$$

Упругие константы:

$$C_{11} = \frac{C_1 + C_2 + 4(C_3 + C_4)}{a} \quad (32)$$

$$C_{12} = \frac{C_2 + 4C_4}{a} \quad (33)$$

$$C_{44} = \frac{C_2 + 4C_4}{a} \quad (34)$$

Анизотропные коэффициенты Пуассона имеют следующий вид:

$$\nu_{\langle 100,001 \rangle} = \frac{C_2 + 4C_4}{C_1 + 2C_2 + 4C_3 + 8C_4} \quad (35)$$

$$\nu_{\langle 110,1\bar{1}0 \rangle} = \frac{(C_1 - C_2 + 4C_3 - 4C_4)(C_1 + 2C_2 + 4C_3 + 8C_4)}{(2C_2 + 4C_4)(C_1 + C_2 + 4(C_3 + C_4)) + (C_1 + 4C_3)(C_1 + 3C_2 + 4(C_3 + 3C_4))} \quad (36)$$

Отсюда можно получить условие ауксетичного поведения: необходимо, чтобы

$$\nu_{\langle 110,1\bar{1}0 \rangle} < 0 \Rightarrow C_1 + 4C_3 < C_2 + 4C_4 \quad (37)$$

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.

6 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 $\epsilon \ll 1$, континуальные смещения предполагаются функциями медленно меняющейся в том же направлении переменной $Y = \epsilon y$. Этот же параметр используется для учета слабонелинейных волн, однако его использование зависит от того, изучаются ли поперечные вариации продольных или поперечных волн. Энергия нелинейного локального взаимодействия:

$$\begin{aligned}
 V_{loc} = & \frac{1}{2}(C_1((D_1 - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_1)^2 + C_1((D_1^\dagger - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_2)^2 + C_1((D_2 - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_3)^2 + C_1((D_2^\dagger - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_4)^2 \\
 & + C_2(((D_1 D_2 - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_5)^2 + ((D_1^\dagger D_2^\dagger - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_6)^2 ((D_1^\dagger D_2 - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_7)^2 + ((D_1 D_2^\dagger - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_8)^2) \\
 & \frac{Q_1}{3}(((D_1 - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_1)^3 + ((D_1^\dagger - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_2)^3 + ((D_2 - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_3)^3 + ((D_2^\dagger - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_4)^3) \\
 & + \frac{Q_2}{3}(((D_1 D_2 - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_5)^3 + ((D_1^\dagger D_2^\dagger - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_6)^3 + ((D_1^\dagger D_2 - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_7)^3 + ((D_1 D_2^\dagger - 1)\vec{U}_{m,n} \cdot \vec{n}_8)^3) \quad (38)
 \end{aligned}$$

Бесконечно малый параметр ϵ учитывается при составлении уравнений в операторах сдвига в направлении оси y : $D_2 = e^{h\epsilon \frac{d}{dy}}$, $D_2^\dagger = e^{-h\epsilon \frac{d}{dy}}$. Уравнения движения могут быть выведены так же, как и для линейной модели.

7 Заключение

Результатом данной работы можно считать 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. В результате, нелокальные уравнения для устойчивой двумерной квадратной решетки были получены в очень компактном виде. 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 было выведено соотношение для жесткостей решётки, при котором ауксетичность точно будет проявляться. Более того, представленный подход к описанию нелокальных взаимодействий в кристаллах может также быть обобщен на любой тип кристаллической решетки.

Дальнейшее развитие связано, прежде всего, с разработкой нелинейной модели. Учет нелинейных слагаемых сильно усложняет двумерную задачу, что делает необходимым принятие разумных упрощений относительно характера распространения волны, характерного масштаба для слабой нелинейности и его соотношения с масштабом для изменений в направлении, перпендикулярном направлению распространения нелинейной волны деформации.

Другим возможным направлением развития формализма, основанного на использовании операторов сдвига, следует считать построение континуальных моделей в пределе коротких волн, подобно тому, как это делалось для треугольной решетки в [13].

Список литературы

- [1] M. Born, K. Huang - "Dynamical Theory of Crystal Lattices, Publishing house of foreign literature, 1958. P.70-77)"
- [2] A.M. Krivtsov - «Mono-and diatomic crystals' elastic properties»- SPb .: Publishing house of Polytechnic University, 2009
- [3] A. Askar, Lattice Dynamical Foundations of Continuum Theories, World Scientific, Singapore, 1985.
- [4] N. Zabusky, G. Deem. - "Dynamics of nonlinear lattices, Journal of computational physics, V.2, 1967. P.126-131."
- [5] G.A. Maugin, Nonlinear Waves in Elastic Crystals.- Oxford University Press, UK, 1999.
- [6] I.A. Kunin - «Elastic Media with Microstructure. Nonlocal Theory of Material Media», Publishing House «Science»,1975
- [7] A.Cemal Eringen, "Linear theory of nonlocal elasticity and dispersion of plane waves International Journal of Engineering Science Vol. 10, Issue 5, May 1972, 425-435
- [8] Zhiyong Xu, Yaroslav V. Kartashov, and Lluís Torner, "Soliton Mobility in Nonlocal Optical Lattices Phys. Rev. Lett. 95, 113901, September 2005, DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.113901>
- [9] A.I. Manevich, L.I. Manevitch, The mechanics of nonlinear systems with internal resonances, Imperial College Press, London, 2005.
- [10] Martin Ostoja-Starzewski, Lattice models in micromechanics, Appl Mech Rev vol 55, no 1, January 2002, 35–60.
- [11] I. V. Andrianov, J. Awrejcewicz, D. Weichert, Improved continuous models for discrete media, Mathematical Problems in Engineering (Open Access), (2010), Article ID 986242, 35 pages, doi : 10.1155/2010/986242.
- [12] A.V.Porubov, I.V.Andrianov - "Nonlinear waves in diatomic crystals» Wave Motion V.50, Issue 7, 2013, P. 1153–116"
- [13] A.V. Porubov, I.E. Berinskii. - "Nonlinear plane waves in materials having hexagonal structure» International Journal of Non-Linear Mechanics, V.67, 2014. P. 27–33.
- [14] Ablowitz, M. J. and Segur, H.(1981) "Solitons and the Inverse Scattering Transform SIAM, Philadelphia.

- [15] Thomas M. Michelitsch , Bernard Collet - «Nonlocal constitutive laws generated by matrix functions: Lattice dynamics models and their continuum limits», International Journal of Engineering Science **80** (2014) 106–123.
- [16] Neil W. Ashcroft, N. David Mermin - "Solid state physics Publ. house "Mir 1979. (vol.2) P. 122-130
- [17] Metrikine, A. V. and Askes, H."An isotropic dynamically consistent gradient elasticity model derived from a 2D slattice Philosophical Magazine, 2006, 86:21,P.3259 — 3286
- [18] H. Askes, A. Metrikine, Higher-order continua derived from discrete media: continualisation aspects and boundary conditions. Intern. J. Solids Structures, 42(2005) 187–202.
- [19] A.M. Kosevich, and S.E. Savotchenko, Peculiarities of dynamics of one-dimensional discrete systems with interaction extending beyond nearest neighbors, and the role of higher dispersion in soliton dynamics, Low Temp. Phys. 25 (1999), 550–557.
- [20] Ray H. Baughman, Justin M. Shacklette, Anvar A. Zakhidov and Sven Stafstroem, Negative Poisson’s ratios as a common feature of cubic metals, NATURE VOL 392 26 MARCH 1998, 362–365.
- [21] P. Kolat, B.M. Maruszewski, K.M. Wojciechowski, Solitary waves in auxetic plates, J. Non-Crystalline Solids, **356** 2001-2009 (2010).
- [22] R. Lakes, Deformation mechanisms in negative Poisson’s ratio materials: structural aspects, Journal of Materials Science 26 (1991) 2287–2292.
- [23] Yunan Prawoto, "Seeing auxetic materials from the mechanics point of view: A structural review on the negative Poisson’s ratio Computational Materials Science 58 (2012) 140–153
- [24] Конёк Д.А., Войцеховски К.В., Плескачевский Ю.М., Шилько С.В., "Материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона (обзор)"Механика композитных материалов и конструкций"(2004).–том 10, № 1-с. 35-69.
- [25] Krasavin V. V. and Krasavin A. V., Negative Poisson’s Ratios in Cubic Monocrystals of Metals, "Заводская лаборатория. Диагностика материалов 2013, № 02 Vol.79, 55–57
- [26] A.A. Vasiliev, An analysis of auxetic properties of the cell having finite size particles, Letters on Materials, Volume 3, Issue 4, November 2013, 288– 291. see www.lettersonmaterials.com
- [27] Justin Dirrenberger, Samuel Forest, Dominique Jeulin "Effective elastic properties of auxetic microstructures: anisotropy and structural applications Int J Mech Mater Des (2013) 9:21–33, DOI 10.1007/s10999-012-9192-8
- [28] V. I. Erofeev and I. S. Pavlov, Parametric identification of crystals having a cubic lattice with negative poisson’s ratios, Journal of Applied Mechanics and Technical Physics,(2015) Vol. 56, No. 6, pp. 1015–1022

- [29] J. Turley and G. Sines, The anisotropy of Young's modulus, shear modulus and Poisson's ratio in cubic materials, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 1971, Vol. 4. 264–271.
- [30] Stavroulakis, G. E. (2005), "Auxetic behaviour: appearance and engineering applications." *phys. stat. sol. (b)*, 242: 710–720. doi:10.1002/pssb.200460388
- [31] Li-Chuan Zhang, Guangzhao Qin, Wu-Zhang Fang, Hui-Juan Cui, Qing-Rong Zheng, Qing-Bo Yan, Gang Su - «Tinselenidene: a Two-dimensional auxetic material with ultralow lattice thermal conductivity and ultrahigh hole mobility», *Scientific Reports*, (2016) 1-9
- [32] A. Alderson, K. L. Alderson, (2007), "Auxetic Materials Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering, Vol 221, Issue 4, pp. 565 - 575, DOI: 10.1243/09544100JAERO185
- [33] Evans, K. E. and Alderson, A. (2000), "Auxetic Materials: Functional Materials and Structures from Lateral Thinking". *Adv. Mater.*, 12: 617–628. doi:10.1002/(SICI)1521-4095(200005)12:9<617::AID-ADMA617>3.0.CO;2-3
- [34] Mohammad Sanamia, Naveen Raviralaa, Kim Aldersona, Andrew Alderson, "Auxetic materials for sports applications" *Procedia Engineering* 72 (2014) 453 – 458, doi: 10.1016/j.proeng.2014.06.079
- [35] Royale S Underhill - «Defense Applications of Auxetic Materials», *DSIAC Journal of Advanced Materials*, Vol. 1 ,(2014) 7-13
- [36] V.N. Belomestnykh, E.G. Soboleva - «Lateral strain ratios for cubic ionic crystals», *Letters on Materials*,(2011) vol.1