

ПОДОЛЬСКАЯ ЕКАТЕРИНА АЛЕКСАНДРОВНА

**РАВНОВЕСИЕ И УСТОЙЧИВОСТЬ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ  
ТВЕРДЫХ ТЕЛ ПРИ МАЛЫХ И КОНЕЧНЫХ ДЕФОРМАЦИЯХ**

Специальность: 01.02.04 — механика деформируемого твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

**Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном  
образовательном учреждении высшего профессионального  
образования «Санкт-Петербургский государственный  
политехнический университет»**

- Научный руководитель** — доктор физико-математических наук,  
профессор Кривцов Антон Мирославович
- Официальные оппоненты** — Греков Михаил Александрович, доктор физико-  
математических наук, профессор, профессор  
кафедры «Вычислительные методы механики  
деформируемого тела» ФГБОУ ВПО СПбГУ
- Лалин Владимир Владимирович, доктор техни-  
ческих наук, профессор, заведующий кафедрой  
«Строительная механика и строительные  
конструкции» ФГБОУ ВПО СПбПУ
- Ведущая организация** — ФГБУН Ордена Ленина и Ордена Октябрьской  
Революции Институт геохимии и аналитической  
химии им. В.И. Вернадского РАН (г. Москва)

Защита состоится «18» декабря 2013 г. в 16.00 на заседании диссертационного  
совета Д 212.229.05 при ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный  
политехнический университет» по адресу:  
195251, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29, II уч. корп., ауд. 265.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке ФГБОУ  
ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет».

Автореферат разослан «14» ноября 2013 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета

Воробьева Татьяна Владимировна

**Актуальность темы.** Для обеспечения работоспособности материала и прогнозирования возникновения предельных состояний требуется построение моделей разрушения на разных масштабных уровнях с учетом внутренней структуры материала. При этом и с научной, и с практической точки зрения особое значение приобретает изучение поведения материалов с идеальной геометрической структурой. Это объясняется тем, что кристаллическая структура характерна для металлов, которые широко используются в технике, а их прочность существенно зависит от различного рода дефектов. Поэтому все большее применение находят монокристаллы, характеризующиеся достаточно малым числом дефектов, что позволяет повысить как прочность конструкции, так и существенно уменьшить метрологические погрешности, что особенно важно для упругих элементов приборов.

Одной из возможных причин разрушения материала является потеря устойчивости его внутренней структуры. Потеря устойчивости также может привести к структурному переходу, в том числе в другое устойчивое состояние. Поэтому актуальной является задача исследования устойчивости материала относительно произвольной вариации напряженно-деформированного состояния: при приближении к критическим деформациям материал может быть устойчив по отношению к приращению напряжений или деформаций вдоль пути нагружения, но при этом неустойчив относительно других возмущений. Исследование устойчивости сред с микроструктурой при конечных деформациях само по себе актуально в связи с тем, что в классической механике деформируемого твердого тела не существует общепринятого определения устойчивости и ее потери.

Так как для построения модели материала на микроуровне методами механики дискретных сред используются потенциалы, характеризующие взаимодействие частиц в узлах кристаллической решетки, а большинство известных в литературе потенциалов изначально разрабатывалось для описания физико-химических, но не механических свойств твердых тел, актуальной является также задача построения моделей, обладающих предсказательной силой в отношении механических параметров, не участвующих в калибровке модели.

**Методика исследований.** В данной работе применяются методы механики деформируемого твердого тела и аппарат, необходимый для решения задач нелинейной теории упругости, строится связь между дискретным и континуальным описанием. Объектом исследования является идеальная бесконечная кристаллическая решетка, как двумерная треугольная, так и трехмерные ГЦК (одноатомная) и ГПУ (двухатомная), и энергетически эквивалентная им сплошная среда. При этом предполагается, что дефекты отсутствуют, объемные силы и тепловые эффекты не рассматриваются. Считается, что частицы, формирующие регулярную решетку и находящиеся в ее узлах, взаимодействуют посредством парных потенциалов: силовых, зависящих только от относительного смещения частиц, и моментных, зависящих также от относительного поворота частиц. Это означает, что связь между частицами имеет продольную (силовое взаимодействие) и поперечную (моментное взаимодействие) жесткости. При переходе к сплошной среде используется правило Коши-Борна и его модификация для сложных решеток, устанавливающие связь между макродеформацией материального объема и градиентом перемещения частиц. Таким образом устанавливается и связь между упругими характеристиками на микро-

и макроуровне. Предсказательная сила модели проверяется путем расчета не использовавшихся при калибровке упругих модулей и сравнения полученных значений с экспериментальными данными. При исследовании устойчивости используется метод наложения малой деформации на конечную.

**Цель работы.** Целью данной работы является построение моделей для описания механических характеристик деформируемых твердых тел с регулярной микроструктурой, получение упругих свойств кристаллов с использованием дискретных методов механики деформируемого твердого тела и исследование устойчивости внутренней структуры кристаллов при конечных деформациях.

**Научная новизна.** Новизну работы составляют следующие **положения, выносимые на защиту**:

1. Получена аналитическая связь между упругими характеристиками металлов с ГПУ структурой на микро- и макроуровне при силовом и моментном взаимодействии. Показана эффективность моделирования ковалентности связи при помощи моментного взаимодействия для описания упругих свойств.
2. Предложен парный силовой потенциал, обеспечивающий устойчивое равновесие геометрически неидеальной ГПУ структуры, корректное соотношение между упругими модулями и энергетическую выгодность по сравнению с более плотноупакованной ГЦК структурой; подобраны параметры для ряда металлов.
3. Метод наложения малой деформации на конечную применен к исследованию устойчивости материалов с микроструктурой. Для простых решеток при силовом взаимодействии показана эквивалентность используемого критерия условию сильной эллиптичности уравнений равновесия и положительности второй вариации потенциальной энергии деформации в случае жесткого нагружения.
4. Аналитически построена область устойчивости треугольной решетки в пространстве конечных деформаций; выявлен структурный переход от вертикальной ориентации решетки к горизонтальной; дана трактовка границ области устойчивости в терминах упругих модулей деформированной среды.
5. Получены области устойчивости ГЦК решетки в шестимерном пространстве деформаций. Выявлен структурный переход, связанный со сменой ориентации ГЦК решетки, и переход ГЦК-ОЦК.
6. Получена область устойчивости идеальной ГПУ структуры в трехмерном пространстве деформаций; выявлен структурный переход ГПУ-ГЦК. В качестве критерия использовалась положительность второй вариации потенциальной энергии деформации.

**Достоверность полученных результатов.** Достоверность полученных результатов обеспечивается строгой постановкой математических задач, использованием апробированных физических моделей и проверена путем

сравнения с экспериментальными данными (равновесие и устойчивость ГПУ структур при малых деформациях) и с результатами проведенного на кафедре вычислительного эксперимента (устойчивость треугольной и ГЦК решеток).

**Практическая значимость работы.** Полученные выражения, связывающие упругие модули на микро- и макроуровнях, позволяют вычислить упругие характеристики эквивалентной сплошной среды и могут применяться для верификации и сравнения результатов молекулярно-динамического моделирования с расчетами на основе механики сплошных сред, в том числе в пакетах прикладных программ. Также может быть получена трактовка уже имеющихся экспериментальных результатов, например, в области создания новых конструкционных материалов. Предложенный потенциал для описания взаимодействия частиц, составляющих решетку реальных геометрически неидеальных ГПУ металлов, может быть использован при проведении вычислительных экспериментов и аналитических исследований, причем использование радиуса обрезания, не превышающего удвоенного равновесного расстояния, в сочетании с простым видом формулы для силы взаимодействия позволяет значительно увеличить скорость выполнения численных расчетов. Разработанный подход к исследованию устойчивости материалов с микроструктурой может быть применен для прогнозирования работоспособности элементов конструкций, для повышения достоверности расчетов по определению надежности конструкции при больших деформациях и для определения предельных нагрузок, диктуемых структурными превращениями, в том числе связанными с переходом в другое устойчивое состояние. Это в дальнейшем даст возможность улучшить массогабаритные характеристики конструкции и получить оптимальное соотношение между прочностью и жесткостью элементов, что в свою очередь позволит повысить экономичность, так как значительная часть стоимости конструкции приходится на стоимость материала.

**Апробация работы.** Результаты работы докладывались на семинарах Института проблем машиноведения РАН (Санкт-Петербург), кафедры Теоретическая механика СПбГПУ, Института Геохимии и Аналитической Химии им. В.И. Вернадского РАН (Москва), Физического факультета университета г. Севилья (Испания), а также на всероссийских и международных конференциях: Advanced Problems in Mechanics (Санкт-Петербург, 2008, 2009, 2011, 2012), Всероссийский форум студентов, аспирантов и молодых ученых «Наука и инновации в технических университетах» (2008), Международная научно-практическая конференция Неделя науки СПбГПУ (Санкт-Петербург, 2009, 2010), XIII Международная конференция «Математическое моделирование в механике деформируемых тел и конструкций. Методы граничных и конечных элементов» (ВЕМ-FEM 2009), Международная научная конференция по механике «Пятое Поляховские чтения» (2009), Международная научная конференция по механике «Шестые Поляховские чтения» (2012), 8th European Solid Mechanics Conference (ESMC 2012), Trilateral Scientific Seminar «Generalized Continua as Models for Materials with Multi-scale Effects or under Multi-field Actions» (2012), 84th Annual Meeting of the International Association of Applied Mathematics and Mechanics (GAMM 2013), European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes (EUROMAT 2013).

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 23 работы, в том числе 6 статей в изданиях из перечня ВАК. Список публикаций приведен в конце автореферата.

**Структура и объем работы.** Работа состоит из введения, двух глав и заключения. Работа содержит 104 страницы, 33 рисунка, 5 приложений, список литературы содержит 99 наименований.

**Во введении** дана общая характеристика работы, обоснована актуальность, приведен обзор литературы, изложена методика исследования, перечислены основные результаты, выносимые на защиту.

**Первая глава** посвящена аналитическому описанию равновесия и устойчивости в малом материалов со сложной решеткой на примере двухатомной ГПУ структуры с использованием парного силового и моментного взаимодействий. Известно, что в случае плотноупакованных структур (ГЦК, ГПУ) парное силовое взаимодействие обеспечивает минимум энергии. Проблема, рассмотренная в этой главе, заключается в том, что металлов с идеальной в смысле геометрии и плотности упаковки ГПУ структурой, в отличие от ГЦК, не существует, хотя сферическая симметрия металлической связи предполагает подобную же симметрию свойств. Отклонение симметрии от сферической обычно связано с наличием ковалентных связей, обладающих сдвиговой жесткостью.

**Первая глава** состоит из трех параграфов.

В **параграфе 1.1** приведены сведения о геометрических особенностях ГПУ и ГЦК структур. Связь в металлическом кристалле ненаправленная, поэтому в кристаллографии узел решетки заменяют твердым шаром, радиус которого (металлический радиус) равен половине расстояния между соседними узлами. Идеальная плотноупакованная решетка состоит из шаров, уложенных слоями в некотором объеме. Решетка реальных ГПУ металлов обладает меньшей плотностью упаковки, что соответствует укладке не шаров, а эллипсоидов вращения. В большинстве случаев отношение полуосей эллипсоида отличается от 1 не более, чем на 4%.

В **параграфе 1.2** для ГПУ структуры получены аналитические выражения компонент тензора жесткости эквивалентной сплошной среды  ${}^4C$  (в трехмерном случае ему соответствует матрица  $6 \times 6$ ) и модуля объемного сжатия  $K$  через жесткость и длину связи для двух «силовых» (без учета (1) и с учетом (2) геометрической неидеальности решетки) и «моментной» (без учета (3) геометрической неидеальности решетки) моделей:

$$\begin{aligned} C_{11} = C_{22} &= \frac{29\sqrt{2}c}{24} \frac{c}{a}, & C_{33} &= \frac{4\sqrt{2}c}{3} \frac{c}{a}, & C_{12} &= \frac{11\sqrt{2}c}{24} \frac{c}{a} \\ C_{13} = C_{23} = C_{44} = C_{55} &= \frac{\sqrt{2}c}{3} \frac{c}{a}, & C_{66} &= \frac{3\sqrt{2}c}{8} \frac{c}{a}, & K &= \frac{2\sqrt{2}c}{3} \frac{c}{a}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $a$  и  $c$  — длина и жесткость связи между соседними частицами;

$$\begin{aligned}
C_{11} &= \frac{\sqrt{3}}{3a_0\eta} \left( \frac{9}{2}c_0 + \frac{4}{4+3\eta^2}c \right), & C_{13} &= \frac{2\sqrt{3}\eta c}{a_0(4+3\eta^2)} \\
C_{12} &= \frac{\sqrt{3}}{3a_0\eta} \left( \frac{3}{2}c_0 + \frac{4}{4+3\eta^2}c \right), & C_{33} &= \frac{3\sqrt{3}\eta^3 c}{a_0(4+3\eta^2)} \\
K &= \frac{\sqrt{3}}{9a_0\eta} \left( 4c_0 + \frac{4+3\eta^2}{3}c \right), & C_{66} &= \frac{\sqrt{3}c_0}{2a_0\eta},
\end{aligned} \tag{2}$$

где  $a_0$  и  $c_0$  — длина и жесткость связи между соседними частицами, принадлежащими одному слою;  $a$  и  $c$  — длина и жесткость связи между соседними частицами, принадлежащими различным слоям;  $\eta = 2h/a_0$ ,  $h = \sqrt{a^2 - a_0^2/3}$  — расстояние между соседними слоями (в случае идеальной геометрии  $\eta = \eta_0 = 2\sqrt{2/3}$ );

$$\begin{aligned}
C_{11} &= \frac{\sqrt{2}}{4a} \left( 5c_A + 3c_D - \frac{(c_A - c_D)^2}{6(c_A + 5c_D)} \right), & C_{13} &= \frac{\sqrt{2}}{3a}(c_A - c_D) \\
C_{12} &= \frac{\sqrt{2}(c_A - c_D)(11c_A + 49c_D)}{24a(c_A + 5c_D)}, & C_{33} &= \frac{2\sqrt{2}}{3a}(2c_A + c_D) \\
C_{66} &= \frac{\sqrt{2}}{12a} \left( 5c_A + 7c_D - \frac{(c_A - c_D)^2}{2(c_A + 5c_D)} \right), & C_{44} &= \frac{\sqrt{2}}{3a}(c_A + 2c_D) \\
K &= \frac{2\sqrt{2}c_A}{3a},
\end{aligned} \tag{3}$$

где  $c_A$  и  $c_D$  — продольная и поперечная жесткости связи,  $a$  — длина связи. Остальные компоненты могут быть получены из приведенных выше перестановкой индексов, например,  $C_{21} = C_{12}$ .

Далее, для ряда ГПУ металлов (Be, Cd, Co, Hf, Mg, Re, Ti, Zn, Zr) на основании экспериментальных данных для компонент тензора жесткости  $C_{11}$ ,  $C_{33}$  и длины связи  $a$  вычислены жесткости связи  $c$ ,  $c_0$ ,  $c_A$  и  $c_D$ , а затем осуществлена следующая проверка: два экспериментальных значения модуля объемного сжатия сравнивались с модулем объемного сжатия, вычисленным по формулам (1–3). Проверка устойчивости модели, то есть положительная определенность тензора жесткости, во всех трех случаях дала положительный результат для всех рассмотренных металлов.

В результате показано, что моделирование ковалентности связи при помощи моментного взаимодействия оказывается для большинства рассмотренных ГПУ металлов ( $d$ -элементов) столь же эффективным для описания упругих свойств, как и учет геометрической неидеальности решетки и рассмотрение двух видов связей. Также показано, что только моментное взаимодействие позволяет описать упругие характеристики бериллия ( $s$ -элемент), в том числе коэффициент Пуассона, на порядок отличающийся от коэффициента Пуассона других ГПУ металлов. Таким образом, правильный выбор взаимодействия оказывается важнее учета геометрических особенностей решетки, причем для

$d$ -элементов ковалентность связи можно не учитывать, но пренебрежение ей для  $s$ -элемента приводит к неверному результату.

Поскольку большинство металлов с ГПУ структурой относятся к  $d$ -элементам, в **параграфе 1.3** рассмотрена возможность описания равновесия и устойчивости неидеальных структур с использованием парных силовых потенциалов, отражающих сферическую симметрию металлической связи. Для ряда ГПУ металлов, отклонение геометрии которых от идеальной не велико (Mg, Sc, Ti, Co, Y, Zr, Tc, Ru, Hf, Re, Os, Tl, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Lu), подобраны параметры парного силового потенциала на базе потенциала Ми и сглаживающей функции, позволяющей ограничиться рассмотрением минимально возможного числа координационных сфер:

$$\tilde{F}(r) = k(r)F(r), \quad (4)$$

где  $k(r)$  — сглаживающая функция,  $F(r)$  — сила взаимодействия:

$$k(r) = \begin{cases} 1, & r \leq b, \\ \left(1 - \left(\frac{r^2 - b^2}{a_{cut}^2 - b^2}\right)^2\right)^2, & b < r \leq a_{cut}. \\ 0, & r > a_{cut} \end{cases} \quad (5)$$

Здесь  $b$  — критическое расстояние, при котором наступает разрыв межатомной связи (определяется из условия  $F'(b) = 0$ ). Кроме того, для этого потенциала  $a_{cut}$  выбирается произвольно, а потенциал получается непрерывным вплоть до второй производной включительно.

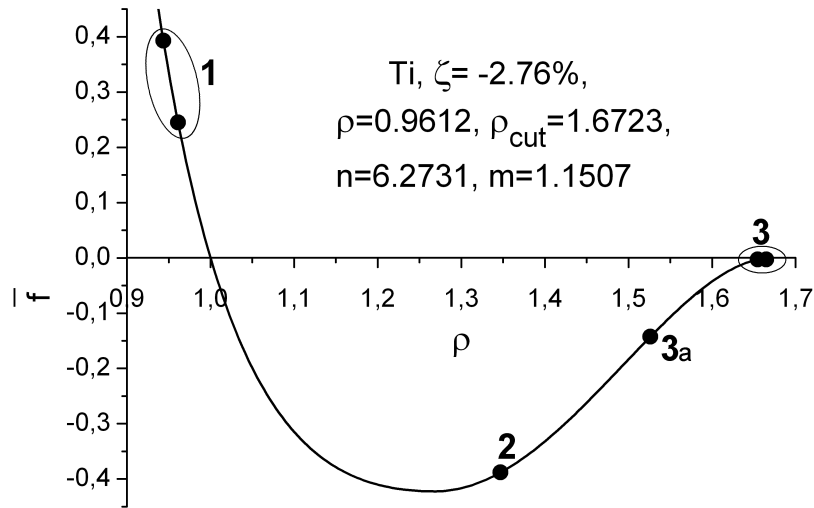


Рис. 1: Пример силы взаимодействия (титан)

На рис. 1 приведен график безразмерной силы взаимодействия. Точками отмечены силы, соответствующие различным координационным эллипсоидам (номера эллипсоидов обозначены цифрами). Введены обозначения:  $\zeta = \frac{\eta - \eta_0}{\eta_0}$ ,  $\rho$  — отношение металлического радиуса к равновесному расстоянию потенциала,  $\rho_{cut}$  — отношение  $a_{cut}$  к равновесному расстоянию потенциала,  $n$ ,  $m$  — параметры потенциала Ми.



Показано, что такой потенциал не только обеспечивает устойчивое равновесие неидеальной ГПУ структуры, но и правильно описывает соотношение между упругими модулями  $C_{11}$  и  $C_{33}$ . Кроме того, один из параметров потенциала (глубина потенциальной ямы) оказывается свободным, что позволяет использовать его для различных задач в зависимости от приоритетов в точности описания той или иной характеристики.

Также показано, что при использовании данного потенциала идеальная ГЦК структура, хотя и более плотноупакованная, является энергетически менее выгодной, чем неидеальная ГПУ. Задача решена аналитически полностью за исключением процедуры подбора параметров потенциала с применением оптимизации методом нелинейного программирования в пакете Maple.

**Вторая глава** посвящена исследованию равновесия и устойчивости простых и сложных решеток при конечных деформациях на примере двумерной треугольной, ГЦК, ОЦК и ГПУ решеток. Очевидно, что при любой аффинной деформации простая решетка останется в равновесии, если взаимодействие парное и центральное. В сложных решетках начинает играть роль дополнительная степень свободы, связанная со сдвигом подрешеток.

В параграфе 2.1 описан алгоритм исследования устойчивости, используемый в данной работе. Критерий устойчивости для двумерной задачи имеет вид

$$\begin{aligned} Q_{11} > 0, \quad Q_{21} > 0, \quad Q_{12} > 0, \quad Q_{12} > 0, \quad B > -\sqrt{AC}, \\ A = Q_{11}Q_{21}, \quad C = Q_{12}Q_{22}, \quad 2B = Q_{11}Q_{22} + Q_{12}Q_{21} - 4Q_{44}^2, \end{aligned}$$

где  ${}^4\mathbf{Q}$  — акустический тензор 4 ранга в уравнении возмущенного движения эквивалентной сплошной среды

$$\ddot{\mathbf{v}} = {}^4\mathbf{Q} \cdot \cdot \cdot \nabla \nabla \mathbf{v}, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} {}^4\mathbf{Q} &= \frac{1}{\rho_0 V_0} (\mathbf{E}\Phi + {}^4\Psi), \\ \Phi &= -\frac{1}{2} \sum_k F_k a_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k, \quad {}^4\Psi = \frac{1}{2} \sum_k a_k^2 \left( C_k + \frac{F_k}{a_k} \right) \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k. \end{aligned}$$

Здесь  $\rho_0$  — плотность материала в отсчетной конфигурации,  $V_0$  — объем элементарной ячейки в отсчетной конфигурации,  $a_k$ ,  $\mathbf{e}_k$ ,  $F_k$ ,  $C_k$ ,  $\nabla$  — длина связи, направление связи, усилие в связи, жесткость связи, набла оператор в актуальной конфигурации,  $\mathbf{E}$  — единичный тензор,  $\mathbf{v}$  — вариация поля перемещений.

В общем случае критерий устойчивости принимает вид:

$$\forall \mathbf{n} \quad {}^4\mathbf{Q} \cdot \cdot \mathbf{n} \mathbf{n} > 0, \quad (7)$$

где  $\mathbf{n}$  — вектор волновой нормали в актуальной конфигурации.

При расчетах использовались потенциалы Морзе и Леннард-Джонса:

$$P_M(r) = D \left[ e^{-2\theta\left(\frac{r}{a}-1\right)} - 2e^{-\theta\left(\frac{r}{a}-1\right)} \right], \quad P_{LJ}(r) = D \left[ \left(\frac{a}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{a}{r}\right)^6 \right]. \quad (8)$$

Здесь  $D$  — глубина потенциальной ямы, величина параметра  $\theta$  обратно пропорциональна ширине ямы. Вблизи положения равновесия при  $\theta = 6$  потенциал Морзе эквивалентен потенциалу Леннарда-Джонса с теми же значениями глубины потенциальной ямы и равновесного расстояния  $a$ .

Показано, что используемый критерий устойчивости аналогичен условию сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентной сплошной среды. Потенциальная энергия деформации для рассматриваемой модели материала имеет вид:

$$w = \frac{1}{2V_0} \sum_k \Pi_k, \quad \Pi_k = \Pi(a_k). \quad (9)$$

Длинноволновое приближение позволяет ввести деформационный градиент как связь между длинами и векторами связей в отсчетной и актуальной конфигурациях:

$$a_k \mathbf{e}_k = a_k^0 \mathbf{e}_k^0 \cdot \overset{\circ}{\nabla} \mathbf{r}, \quad (10)$$

где  $a_k^0$ ,  $\mathbf{e}_k^0$ ,  $\overset{\circ}{\nabla}$  — длина связи, направление связи, набла оператор в отсчетной конфигурации.

Условие сильной эллиптичности имеет вид:

$$\forall \mathbf{n}^0 \quad {}^4\mathbf{Q}^0 \cdot \cdot \mathbf{n}^0 \mathbf{n}^0 > 0, \quad Q_{ijkl}^0 = \left( \frac{\partial^2 w}{\partial (\overset{\circ}{\nabla} \mathbf{r})^2} \right)_{ijkl}, \quad (11)$$

и можно показать, что с точностью до положительного множителя оно эквивалентно условию (7).

В параграфе 2.2 аналитически получена область устойчивости треугольной решетки в пространстве деформаций (рис. 2).

Материалов с треугольной решеткой не обнаружено, тем не менее это удобная и простая модель для построения теории, проведения аналитических расчетов и вычислительных экспериментов. Эта задача исследовалась ранее, но была получена односвязная область устойчивости. Показано, что учета всего лишь двух координационных сфер достаточно, чтобы получить симметричную двусвязную область устойчивости, части которой отвечают различной ориентации решетки, и тем самым описать структурный переход.

Ввиду того, что рассматривался бесконечный кристалл, полностью подвергнутый деформации (жесткое нагружение), было сделано предположение, что условие сильной эллиптичности окажется достаточным из-за сходства постановки задачи с постановкой задачи о деформировании тела с первой краевой задачей специального вида (так называемая «жесткая обойма»). Вычислительный эксперимент, проведенный на кафедре «Теоретическая механика» СПбГПУ, подтвердил это предположение.

Кроме того, выявлен смысл границ области устойчивости в терминах упругих модулей деформированной среды. Показано, что потеря устойчивости при гидростатическом сжатии связана с изменением знака модуля сдвига. Также показано, что потенциал Леннарда-Джонса, широко применяемый для моделирования дискретных систем, не позволяет описать этот тип потери устойчивости, в отличие от потенциала Морзе.

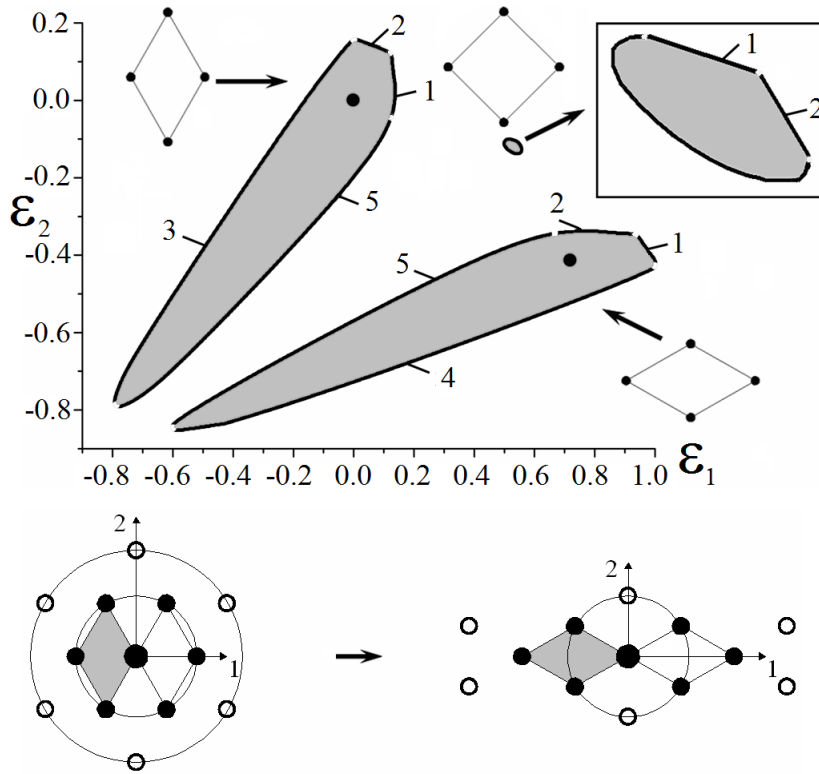


Рис. 2: Вверху: область устойчивости треугольной решетки в пространстве  $\epsilon_1, \epsilon_2$  при диагональном тензоре деформации, потенциал Морзе,  $\theta = 6$ . На границе меняют знак: 1)  $Q_{11}$ , 2)  $Q_{22}$ , 3)  $Q_{21}$ , 4)  $Q_{12}$ , 5)  $B + \sqrt{AC}$ , а также 1), 2), 5) модули Юнга, 3), 4) модули сдвига. Внизу: структурный переход от вертикальной ориентации решетки к горизонтальной, серым выделена элементарная ячейка.

Построена диаграмма  $\sigma - \epsilon$  одноосного растяжения (рис. 3, слева), график которой проходит через оба ненапряженных состояния, соответствующих вертикальной и горизонтальной ориентации решетки; как и ожидалось, потеря устойчивости предшествует максимуму на диаграмме.

Построен профиль потенциальной энергии деформации и ее производной по  $\epsilon_1$  на прямой, соединяющей два ненапряженных состояния с координатами  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 0$  и  $\epsilon_1 = \sqrt{3} - 1, \epsilon_2 = 1/\sqrt{3} - 1$  (рис. 3, справа). Показано, что зона между двумя областями устойчивости (выделены штриховкой) соответствует убыванию энергии, профиль энергии симметричный, минимумы расположены в ненапряженных состояниях.

В параграфе 2.3 получены области устойчивости ГЦК решетки в шестимерном пространстве деформаций. Для получения областей устойчивости был использован метод Монте-Карло, исследована сходимость. Сечение, представляющее собой трехмерную область в пространстве деформаций вдоль осей кубической симметрии, оказалось односвязным, но не выпуклым (рис. 4, справа). Основная часть области представляет собой область устойчивости ГЦК решетки, три примыкающие зоны — области устойчивости деформированной ОЦК решетки (рис. 5, вверху).

Также был подобран сглаженный потенциал взаимодействия на базе потенциала Морзе, обеспечивающий устойчивое равновесие недеформированных

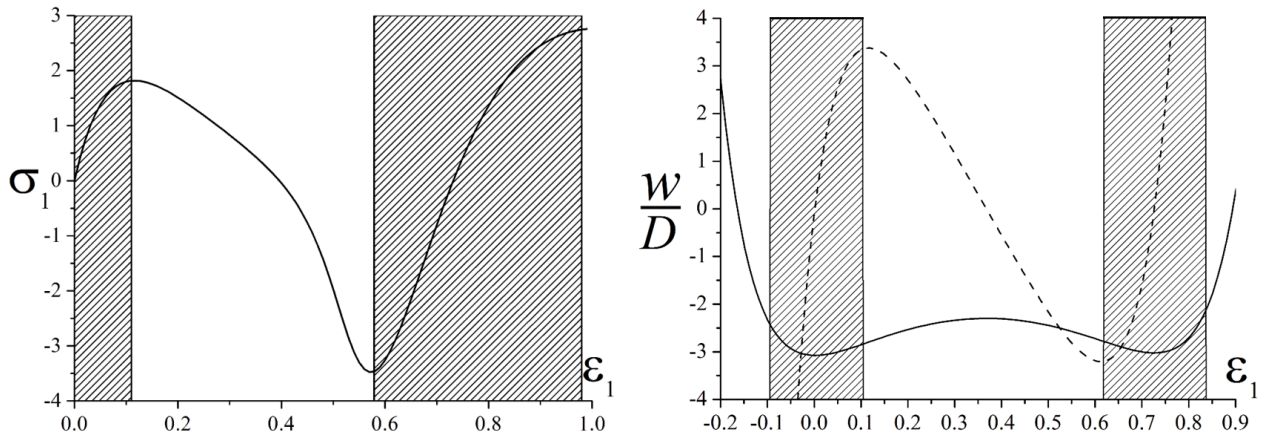


Рис. 3: Слева: одноосное нагружение ( $\sigma_2 = 0$ ). Справа: профиль потенциальной энергии деформации (сплошная линия) и ее производной по  $\varepsilon_1$  (пунктир). Сечение области устойчивости заштриховано.

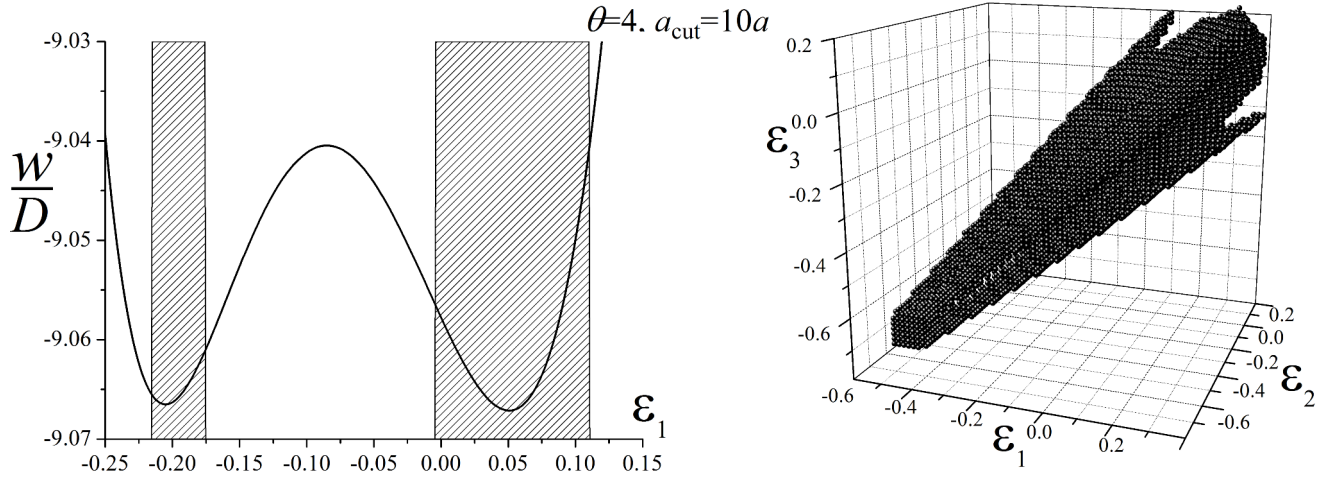


Рис. 4: Слева: Профиль потенциальной энергии деформации, на прямой, соединяющей недеформированную ОЦК (левый минимум) и деформированную ГЦК (правый минимум) решетки; сечение области устойчивости заштриховано. Справа: область устойчивости ГЦК решетки, сглаженный потенциал Морзе  $\theta = 4$ ,  $a_{cut} = 10a$ .

ОЦК и ГЦК решеток; показано, что структурный переход ГЦК-ОЦК может быть осуществлен при одноосном нагружении вдоль одной из осей кубической симметрии. Аналогично построены области устойчивости ОЦК решетки.

Кроме того, при конечной деформации ГЦК решетки существует 6 структурных переходов ГЦК-ГЦК по схеме, аналогичной реализуемой в треугольной решетке: одна из осей кубической симметрии в отсчетной конфигурации становится осью  $[1,1,1]$  в актуальной конфигурации (рис. 5, внизу).

Построены профили потенциальной энергии деформации на прямых, соединяющих ОЦК и ГЦК решетки, при разных параметрах потенциала, например, рис. 4, слева. При молекулярно-динамическом моделировании эволюции деформированной конфигурации системы, соответствующей точке максимума на кривой, можно ожидать возникновение двухфазного состояния.

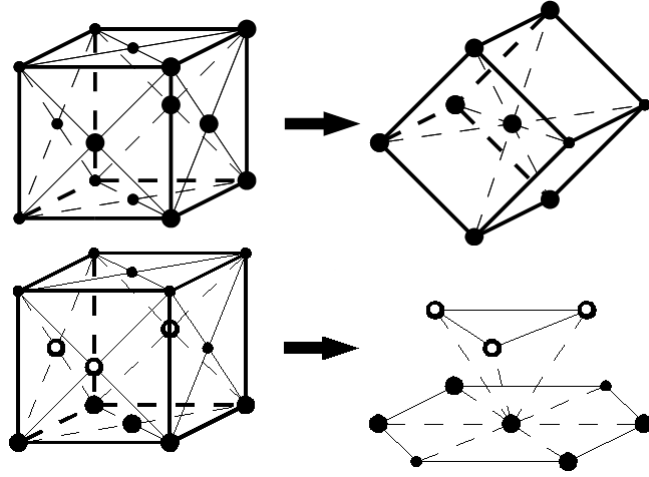


Рис. 5: Вверху: схема перехода ГЦК-ОЦК. Внизу: схема перехода ГЦК-ГЦК.

Построен профиль потенциальной энергии деформации на прямой, соединяющей недеформированные ГЦК решетки при переходе, представленном на рис. 5, внизу. Как и ожидалось, он качественно не отличается от двумерного случая (рис. 3, справа).

В параграфе 2.4 исследован вопрос о равновесии и устойчивости ГПУ структур с идеальной геометрией при конечной аффинной деформации. Для двухатомных решеток связь между длинами и векторами связей в отсчетной и актуальной конфигурациях имеет вид:

$$a_k \mathbf{e}_k = a_k^0 \mathbf{e}_k^0 \cdot \overset{\circ}{\nabla} \mathbf{r} + \nu_k \boldsymbol{\xi}, \quad (12)$$

где  $\nu_k = 0$ , если взаимодействуют частицы из одной подрешетки,  $\nu_k = 1$ , если частицы из разных подрешеток,  $\boldsymbol{\xi}$  — вектор сдвига подрешеток.

Уравнения равновесия эквивалентной сплошной среды в отсчетной конфигурации имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial \left( \overset{\circ}{\nabla} \mathbf{r} \right)} = 0 &\rightarrow \sum_k F_k^0 a_k^0 \mathbf{e}_k^0 \mathbf{e}_k^0 = 0, \\ \frac{\partial w}{\partial \boldsymbol{\xi}} = 0 &\rightarrow \sum_k \nu_k F_k^0 \mathbf{e}_k^0 = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Обычно второе уравнение выполняется тождественно, а первое используется для определения «поджатия связей»: при учете более 1 координационной сферы равновесное расстояние между ближайшими соседями меньше, чем равновесное расстояние потенциала.

После наложения однородной деформации второе уравнение будет определять сдвиг подрешеток

$$\frac{\partial w}{\partial \boldsymbol{\xi}} = 0 \rightarrow \sum_k \nu_k F_k \mathbf{e}_k = 0. \quad (14)$$

Обнаружено, что если одна из главных осей тензора деформации есть ось трансверсальной изотропии, а две другие лежат в плоскости изотропии, то вектор

сдвига подрешеток также лежит в плоскости изотропии. Поскольку деформация самих подрешеток однородная, то дополнительное уравнение равновесия не требуется.

В качестве критерия устойчивости рассматривается положительность второй вариации потенциальной энергии деформации, которая для простой решетки равносильна выполнению условий сильной эллиптичности уравнений равновесия даже с точки зрения формы записи.

$$\begin{aligned} \delta^2 w &= \delta \left( \mathbf{r} \overset{\circ}{\nabla} \right) \cdot {}^4\mathbf{Q} \cdot \delta \left( \mathbf{r} \overset{\circ}{\nabla} \right) + 2\delta\xi \cdot {}^3\mathbf{Q} \cdot \delta \left( \mathbf{r} \overset{\circ}{\nabla} \right) + \delta\xi \cdot {}^2\mathbf{Q} \cdot \delta\xi = \\ &= \delta \left( \mathbf{r} \overset{\circ}{\nabla} \right) \cdot {}^4\mathbf{Q}_* \cdot \delta \left( \mathbf{r} \overset{\circ}{\nabla} \right) + \delta\xi_* \cdot {}^2\mathbf{Q} \cdot \delta\xi_*, \end{aligned} \quad (15)$$

$${}^4\mathbf{Q}_* = {}^4\mathbf{Q} - {}^3\mathbf{Q}^T \cdot {}^2\mathbf{Q}^{-1} \cdot {}^3\mathbf{Q}, \quad \delta\xi_* = \delta\xi - {}^2\mathbf{Q}^{-1} \cdot {}^3\mathbf{Q} \cdot \delta \left( \mathbf{r} \overset{\circ}{\nabla} \right)$$

Считая  $\delta \left( \mathbf{r} \overset{\circ}{\nabla} \right)$  и  $\delta\xi_*$  независимыми переменными, получим

$$\delta^2 w > 0 \Leftrightarrow \begin{cases} \delta \left( \mathbf{r} \overset{\circ}{\nabla} \right) \cdot {}^4\mathbf{Q}_* \cdot \delta \left( \mathbf{r} \overset{\circ}{\nabla} \right) > 0 & \forall \delta\xi_*, \quad \forall \delta \left( \mathbf{r} \overset{\circ}{\nabla} \right) \\ \delta\xi_* \cdot {}^2\mathbf{Q} \cdot \delta\xi_* > 0 \end{cases} \quad (16)$$

Построена область устойчивости ГПУ структуры (рис. 6),  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  описывают деформацию в плоскости изотропии,  $\varepsilon_3$  — вдоль оси трансверсальной изотропии. Область устойчивости оказалась двухсвязной: одна часть, вытянутая вдоль линии  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3$ , отвечает ГПУ структуре, вторая — ГЦК структуре.

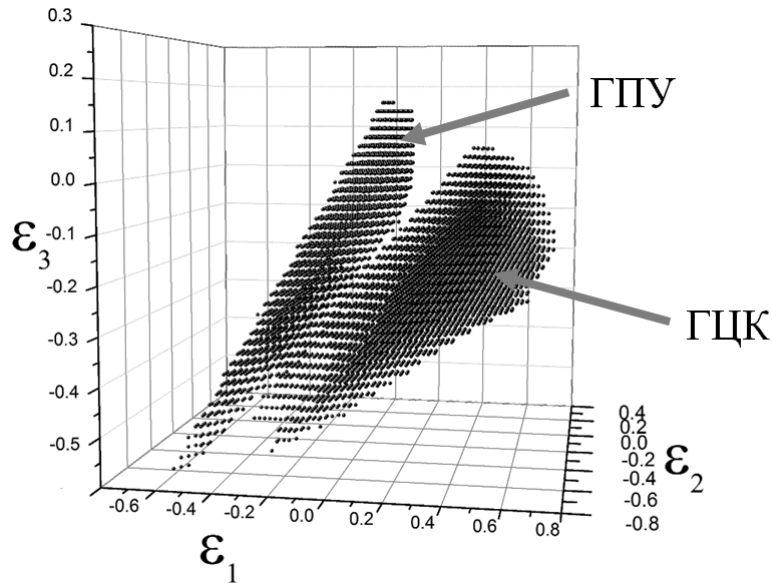


Рис. 6: Область устойчивости ГПУ структуры, потенциал Леннард-Джонса.

**В заключении** сформулированы основные результаты работы.

1. Получена аналитическая связь между упругими модулями металлов с ГПУ структурой на микро- и макроуровне при силовом и моментном взаимодействии и показано, что моделирование ковалентности связи при помощи моментного взаимодействия оказывается для большинства рассмотренных

металлов столь же эффективным для описания упругих свойств, как и учет геометрической неидеальности решетки и рассмотрение двух видов связей; только моментное взаимодействие позволяет описать упругие характеристики бериллия, в том числе коэффициент Пуассона, на порядок отличающийся от коэффициента Пуассона других ГПУ металлов.

2. Для ряда ГПУ металлов, отклонение геометрии которых от идеальной не велико, подобраны параметры парного силового потенциала на базе потенциала Ми и сглаживающей функции, позволяющей ограничиться рассмотрением минимально возможного конечного числа координационных сфер. Показано, что такой потенциал не только обеспечивает устойчивое равновесие неидеальной ГПУ структуры, но и правильно описывает соотношение упругими модулями. Также обнаружено, что при использовании данного потенциала идеальная ГЦК структура, хотя и более плотноупакованная, является энергетически менее выгодной, чем неидеальная ГПУ.
3. Метод наложения малой деформации на конечную применен к исследованию устойчивости материалов с микроструктурой. Для простых решеток при силовом взаимодействии показана эквивалентность используемого критерия условию сильной эллиптичности уравнений равновесия и положительности второй вариации потенциальной энергии деформации в случае жесткого нагружения.
4. Аналитически построена область устойчивости треугольной решетки в пространстве конечных деформаций; выявлен структурный переход от вертикальной ориентации решетки к горизонтальной; дана трактовка границ области устойчивости в терминах упругих модулей деформированной среды. Эта задача исследовалась ранее, но была получена односвязная область устойчивости. Показано, что потенциал Леннард-Джонса, широко применяемый для моделирования дискретных систем, не позволяет описать потерю устойчивости при гидростатическом сжатии, в отличие от потенциала Морзе. Построен профиль потенциальной энергии деформации на прямой, соединяющей два ненапряженных состояния, из которого видно, что на данном пути нагружения условие выпуклости энергии совпадает с условием устойчивости.
5. Получены области устойчивости ГЦК решетки в шестимерном пространстве деформаций. Сечение, представляющее собой трехмерную область в пространстве деформаций вдоль осей кубической симметрии, оказалось односвязным, но не выпуклым. Выявлен структурный переход, связанный со сменой ориентации ГЦК решетки, и переход ГЦК-ОЦК. Построены профили потенциальной энергии деформации на прямых, соединяющих ОЦК и ГЦК решетки и ГЦК и ГЦК решетки. В первом случае разным решеткам соответствуют минимумы разной глубины, во втором случае картина качественно не отличается от двумерного случая.
6. Исследован вопрос о равновесии ГПУ структур с идеальной геометрией при конечной аффинной деформации. Обнаружено, что если одна из главных осей тензора деформации есть ось трансверсальной изотропии, а две другие лежат в плоскости изотропии, то вектор сдвига подрешеток также

лежит в плоскости изотропии. Получена область устойчивости идеальной ГПУ структуры в трехмерном пространстве деформаций. Выявлен структурный переход ГПУ-ГЦК. В качестве критерия использовалась положительность второй вариации потенциальной энергии деформации.

### **Публикации по теме исследования а) Публикации в изданиях, входящих в перечень ВАК:**

1. Подольская Е. А., Кривцов А. М., Панченко А. Ю. Исследование устойчивости и структурного перехода в ГЦК-решетке при больших деформациях / Е. А. Подольская, А. М. Кривцов, А. Ю. Панченко // Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 1. Математика. Механика. Астрономия. – 2012. – №. 3. – С. 123–128.
2. Подольская Е. А., Кривцов А. М. Описание геометрии кристаллов с гексагональной плотноупакованной структурой на основе парных потенциалов взаимодействия / Е. А. Подольская, А. М. Кривцов // Физика твердого тела. – 2012. – Т. 54. – №. 7. – С. 1327–1334.
3. Подольская Е. А., Кривцов А. М., Панченко А. Ю., Ткачев П. В. Устойчивость идеальной бесконечной двумерной кристаллической решетки / Е. А. Подольская, А. М. Кривцов, А. Ю. Панченко, П. В. Ткачев // Доклады Академии наук. – 2012. – Т. 442. – №. 6. – С. 755–758.
4. Podolskaya E. A., Panchenko A. Yu., Bukovskaya K. S. Influence of shear strain on stability of 2D triangular lattice / E. A. Podolskaya, A. Yu. Panchenko, K. S. Bukovskaya // Наносистемы: физика, химия, математика. – 2011. – Т. 2. – №. 3. – С. 60–64.
5. Podolskaya E. A., Panchenko A. Yu., Krivtsov A. M. Stability of 2D triangular lattice under finite biaxial strain / E. A. Podolskaya, A. Yu. Panchenko, A. M. Krivtsov // Наносистемы: физика, химия, математика. – 2011. – Т. 2. – №. 2. – С. 84–90
6. Кривцов А. М., Подольская Е. А. Моделирование упругих свойств кристаллов с гексагональной плотноупакованной решеткой / А. М. Кривцов, Е. А. Подольская // Изв. РАН. МТТ. – 2010. – №. 3. – С. 77–86.

### **б) Другие публикации:**

1. Теоретическая механика. Упругие и тепловые свойства идеальных кристаллов: учеб. пособие / И. Е. Беринский, Н. Г. Двас, А. М. Кривцов, А. М. Кударова, В. А. Кузькин, А. А. Ле-Захаров, О. С. Лобода, И. И. Нейгебауэр, Е. А. Подольская; под ред. А.М. Кривцова. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2009. – 144 с.
2. Panchenko A. Yu., Podolskaya E. A., Krivtsov A. M. MD modeling of structural transitions in solids with FCC and BCC crystal lattice with defects at nonzero temperature / A. Yu. Panchenko, E. A. Podolskaya, A. M. Krivtsov // CD-ROM Book of abstracts of European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes «EUROMAT 2013», Seville, Spain. – 2013.



3. Podolskaya E. A. On Stability Criteria of Ideal Crystalline Solids under Finite Strain within Force and Moment Interaction Models / E. A. Podolskaya // Book of abstracts «GAMM 2013», Novi Sad, Serbia. – 2013. – P. 219
4. Podolskaya E. A., Krivtsov A. M., Panchenko A. Yu. Stability and Structural Transitions in Crystal Lattices / E. A. Podolskaya, A. M. Krivtsov, A. Yu. Panchenko // Surface Effects in Solid Mechanics. Advanced Structured Materials. № 30. – Springer Berlin Heidelberg, 2013. – P. 123–133.
5. Podolskaya E. A. Influence of Moment Interaction on Stability of Plane Triangular Lattice Under Finite Strain / E. A. Podolskaya // Book of abstracts, Second Trilateral Seminar «Generalized continua as models for materials with multi-scale effects or under multi-field actions», Lutherstadt Wittenberg, Germany. – 2012. – P. 32.
6. Podolskaya E. A., Krivtsov A. M., Panchenko A. Yu. Stability and Structural Transitions in Crystal Lattices / E. A. Podolskaya, A. M. Krivtsov, A. Yu. Panchenko // CD-ROM Book of abstracts of 8th European Solid Mechanics Conference, Graz, Austria. – 2012.
7. Podolskaya E. A., Krivtsov A. M., Panchenko A. Yu. Structural transitions in 2D and 3D ideal crystal lattices / E. A. Podolskaya, A. M. Krivtsov, A. Yu. Panchenko // Book of abstracts of XL Summer School–Conference «Advanced Problems in Mechanics», St. Petersburg. – 2012. – P. 70.
8. Подольская Е. А., Кривцов А. М., Панченко А. Ю. Исследование устойчивости и фазового перехода в ГЦК решетке при больших деформациях / Е. А. Подольская, А. М. Кривцов, А. Ю. Панченко // Тезисы докладов Международной научной конференции по механике «Шестые Поляховские чтения», 31 января–3 февраля 2012, Санкт-Петербург. – 2012. – С. 241–242.
9. Podolskaya E. A., Panchenko A. Yu., Bukovskaya K. S. Influence of shear strain on stability of 2D triangular lattice / E. A. Podolskaya, A. Yu. Panchenko, K. S. Bukovskaya // Proceedings of XXXIX International Summer School–Conference «Advanced Problems in Mechanics», St. Petersburg. – 2011. – P. 358–363.
10. Podolskaya E. A., Panchenko A. Yu., Krivtsov A. M. Stability of 2D triangular lattice under finite biaxial strain / E. A. Podolskaya, A. Yu. Panchenko, A. M. Krivtsov // Proceedings of XXXIX International Summer School–Conference «Advanced Problems in Mechanics», St. Petersburg. – 2011. – P. 350–357.
11. Подольская Е. А., Ткачев П. В. Кривцов А. М. Исследование устойчивости ГЦК решетки / Е. А. Подольская, П. В. Ткачев, А. М. Кривцов // XXXIX Неделя науки СПбГПУ, 6–11 декабря, 2010. Материалы международной научно-практической конференции. Часть V. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2010. – С. 111–112
12. Подольская Е. А. Моделирование механических свойств кристаллов с гексагональной плотноупакованной решеткой с помощью парных потенциалов взаимодействия / Е. А. Подольская // Математическое моделирование в

- механике деформируемых тел и конструкций. Методы граничных и конечных элементов. Труды XIII Международной конференции. 28 сентября–01 октября, 2009, Санкт-Петербург. – 2009. – Т.1. – С. 161–162
13. Podolskaya E. A. Modeling and design of mechanical properties and structure of HCP lattice using pair potentials / E. A. Podolskaya // Book of abstracts of XXXVII Summer School–Conference «Advanced Problems in Mechanics», St. Petersburg. – 2009. – P. 71.
  14. Подольская Е. А. Моделирование упругих свойств гексагональной плотноупакованной решетки. / Е. А. Подольская // Избранные труды Международной научной конференции по механике «Шестые Поляховские чтения», 3–6 февраля 2009, Санкт-Петербург. – 2009. – С.321–326.
  15. Подольская Е. А. Моделирование упругих свойств гексагональной плотноупакованной решетки. / Е. А. Подольская // Тезисы докладов Международной научной конференции по механике «Шестые Поляховские чтения», 3–6 февраля 2009, Санкт-Петербург. – 2009. – С. 187
  16. Podolskaya E. A. Modeling of hexagonal close-packed crystal lattices / E. A. Podolskaya // Proceedings of XXXVI Summer School–Conference «Advanced Problems in Mechanics», St. Petersburg. – 2008. – P. 533–539
  17. Подольская Е. А. ГПУ решетка при силовом и моментном взаимодействии / Е. А. Подольская // Наука и инновации в технических университетах: Материалы Всероссийского форума студентов, аспирантов и молодых ученых. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2008. – С. 168