

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ И СТРУКТУРНОГО ПЕРЕХОДА В ГЦК-РЕШЕТКЕ ПРИ БОЛЬШИХ ДЕФОРМАЦИЯХ

Е. А. Подольская¹, А. М. Кривцов², А. Ю. Панченко³

1. Институт Проблем Машиноведения РАН (ИПМаш РАН),
магистр механики, мл. научн. сотр., katepodolskaya@gmail.com

2. Институт Проблем Машиноведения РАН (ИПМаш РАН),
д-р физ.-мат. наук, профессор, akrivtsov@bk.ru

3. С.-Петербургский государственный политехнический университет,
магистр физики, аспирант, ArtemQT@yandex.ru

Введение. В настоящее время актуальность приобретают задачи, связанные с оценкой прочностных свойств объектов, в силу своей малости обладающих бездефектной кристаллической структурой. Прочность материала тесно связана с его устойчивостью при конечных деформациях [1].

Целью данной работы является исследование устойчивости при больших деформациях идеальной (без дефектов) гранецентрированной кубической (ГЦК) кристаллической решетки. ГЦК-решеткой обладают многие металлы, например, медь, железо (при определенных условиях), серебро, золото, платина. Вопрос устойчивости ГЦК-решетки рассматривался, например, в [2, 3]. В работе [2] показано, что плотноупакованные ГЦК и ГПУ (гексагональная плотноупакованная) структуры устойчивы в малом при любом парном центральном силовом взаимодействии частиц. В работе [3] рассмотрена устойчивость ГЦК- и ОЦК- (объемно-центрированных кубических) кристаллов с применением псевдопотенциалов; показано, что потеря устойчивости при сжатии и фазовые переходы связаны с обращением в ноль модуля сдвига. В настоящей работе применяется динамический критерий (вещественность частот упругих волн); с его помощью, например, в работе [4] исследовалась устойчивость нового наноматериала графена (один слой графита) с использованием парного моментного потенциала [5].

Настоящая работа является продолжением [6], где была исследована устойчивость двумерной треугольной кристаллической решетки — атомного слоя в ГЦК- и ГПУ-структурах — и было показано, что существуют дополнительные области устойчивости, связанные со структурным переходом в материале.

Взаимодействие частиц, составляющих решетку, описывается при помощи парного центрального силового взаимодействия. Это удобная и простая модель для построения теории, проведения аналитических расчетов и вычислительных экспериментов.

В ходе исследования обнаружена возможность структурного перехода ГЦК-решетки в ОЦК-решетку при диагональном тензоре деформации, главные оси которого совпадают с осями кубической симметрии. Кроме того, при наличии сдвиговых деформаций наблюдаются дополнительные области устойчивости, имеющие ту же природу, что и описанные в [6].

Критерий устойчивости. В работе применяется прямое тензорное исчис-

ление [1]. В качестве закона взаимодействия используются потенциалы Морзе и Леннард-Джонса:

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

Здесь D — глубина потенциальной ямы, величина параметра θ обратно пропорциональна ширине ямы. Вблизи положения равновесия при $\theta = 6$ потенциал Морзе эквивалентен потенциалу Леннард-Джонса с теми же значениями глубины потенциальной ямы и равновесного расстояния a [7]. Одно из отличий $P_M(r)$ от $P_{LJ}(r)$ состоит в том, что при сжатии материала в точку ($r = 0$) возникает конечная сила отталкивания, при $\theta = 6$ порядка $10^6 D/a$. Это позволяет проводить молекулярно-динамическое моделирование при сильном сжатии. Кроме того, быстрое затухание экспонент дает возможность ограничиться меньшим числом частиц. С помощью именно потенциала Морзе можно описать фазовый переход ОЦК → ГЦК, при этом значения параметра θ лежат в пределах от 3 до 5 для ряда металлов, у которых наблюдается данный переход [8].

Для описания материала в отсчетной конфигурации введена система координат и положение каждой частицы связано с началом отсчета. Так как ГЦК-решетка простая, любую частицу можно выбрать в качестве нулевой. Частицам присваиваются номера $k = \pm 1 \dots \pm N$; частицы, расположенные симметрично относительно нулевой, имеют противоположные по знаку номера. Обозначим радиус-векторы, определяющие положения частиц относительно нулевой, через \mathbf{a}_k , причем $\mathbf{a}_{-k} = -\mathbf{a}_k$.

Далее будем рассматривать однородную деформацию, описываемую деформационным градиентом $\mathbf{R}\overset{\circ}{\nabla}$, где $\overset{\circ}{\nabla}$ — оператор Гамильтона в отсчетной конфигурации.

Для получения макроскопических уравнений используется длинноволновое приближение [9]. Это означает, что рассматриваются лишь функции, слабо изменяющиеся на расстояниях, сравнимых с длинами основных векторов решетки, то есть волны, длины которых много больше межатомных расстояний.

Связь между векторами \mathbf{A}_k (радиус-векторы частицы в актуальной конфигурации) и \mathbf{a}_k с использованием длинноволнового приближения имеет вид:

$$\mathbf{A}_k = \mathbf{R}(\mathbf{r} - \mathbf{a}_k) - \mathbf{R}(\mathbf{r}) \approx \mathbf{a}_k \cdot \overset{\circ}{\nabla} \mathbf{R} = \mathbf{R} \overset{\circ}{\nabla} \cdot \mathbf{a}_k. \quad (2)$$

Запишем уравнение движения сплошной среды в форме Пиолы [1]:

$$\rho_0 \ddot{\mathbf{u}} = \overset{\circ}{\nabla} \cdot \mathbf{P}, \quad (3)$$

где ρ_0 — плотность материала в отсчетной конфигурации, \mathbf{u} — вектор перемещений, \mathbf{P} — тензор напряжений Пиолы, определяющийся формулой [7]

$$\mathbf{P} = \frac{1}{2V_0} \sum_k \Phi_k \mathbf{a}_k \mathbf{A}_k, \quad \Phi_k = \frac{\Pi'(A_k)}{A_k}, \quad (4)$$

V_0 — объем элементарной ячейки

Далее исследуется первая вариация уравнения (3) вблизи деформированного состояния кристаллической решетки. В результате преобразований, более подробно описанных в [10], получаем волновое уравнение

$$\ddot{\mathbf{v}} = {}^4\mathbf{Q} \cdot \dots \nabla \nabla \mathbf{v}, \quad (5)$$

где $\mathbf{v} = \delta \mathbf{u}$ — первая вариация вектора перемещений, ∇ — оператор Гамильтона в актуальной конфигурации, ${}^4\mathbf{Q}$ — тензор четвертого ранга, зависящий от первой и второй производных потенциала взаимодействия (усилий в связях и жесткостей связей), а также от геометрии окружения частицы [1, 7].

Решением уравнения (5) является $\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 e^{i\omega t} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}$, \mathbf{K} — волновой вектор, ω — частота. Если акустический тензор $\mathbf{D} = {}^4\mathbf{Q} \cdot \mathbf{K}\mathbf{K}$ положительно определенный, то актуальная конфигурация устойчива [1]. Поскольку ω^2 — собственные числа тензора \mathbf{D} , то для любого вещественного \mathbf{K} должно выполняться условие

$$\omega^2 > 0. \quad (6)$$

Для трехмерной задачи характеристическое уравнение $\det(\mathbf{D} - \omega^2 \mathbf{E}) = 0$ (\mathbf{E} — единичный тензор) имеет вид

$$a\omega^6 + b\omega^4 + c\omega^2 + d = 0, \quad (7)$$

$$a = 1, \quad b = -\text{tr}\mathbf{D} = -I_1, \quad c = 1/2(\text{tr}^2\mathbf{D} - \text{tr}\mathbf{D}^2) = I_2, \quad d = -\det \mathbf{D} = -I_3,$$

где I_1, I_2, I_3 — инварианты тензора \mathbf{D} .

Положительность корней кубического уравнения (7) равносильна:

$$I_1 > 0, \quad I_2 > 0, \quad I_3 > 0, \quad \Delta \geq 0, \quad (8)$$

$$\Delta = -4b^3d + b^2c^2 - 4ac^3 + 18abcd - 27a^2d^2.$$

Аффинная деформация ГЦК решетки. Рассмотрим аффинную деформацию

$$\mathbf{R}\overset{\circ}{\nabla} \sim \begin{pmatrix} 1 + \varepsilon_x & \text{tg}\varphi_{yx} & 0 \\ 0 & 1 + \varepsilon_y & \text{tg}\varphi_{zy} \\ \text{tg}\varphi_{xz} & 0 & 1 + \varepsilon_z \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Часть внедиагональных элементов полагаются нулевыми, чтобы исключить из рассмотрения эквивалентные деформированные состояния. Пусть оси x, y, z совпадают с осями кубической симметрии. Предположим также, что $\text{tg}\varphi_{yx} = \text{tg}\varphi_{xz} = \text{tg}\varphi_{zy} = 0$. Тогда левые части неравенств (8) будут однородными многочленами различных степеней от квадратов компонент волнового вектора \mathbf{K} , коэффициенты — функции деформаций $\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z$. Инвариант I_1 есть диагональная квадратичная форма, поэтому необходимым условием устойчивости будет положительность коэффициентов этой формы.

Напишем достаточные условия, разбив левые части оставшихся неравенств на квадратичные формы в первых квадрантах. Будем применять метод Монте-Карло там, где, с одной стороны, достаточные условия показывают неустойчивость, с другой, необходимое условие показывает устойчивость. Метод Монте-Карло заключается в том, что для каждой точки из трехмерного пространства начальных деформаций $\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z$ составляются неравенства (8) и проверяется их смысл при различных \mathbf{K} .

Утверждение. Имеем однородное неравенство $P(x, y, z) > 0$ на положительном октанте. Сделаем замену $z = 1 - x - y$ и получим неоднородный многочлен $F(x, y) > 0$ при $x > 0, y > 0, x + y < 1$.

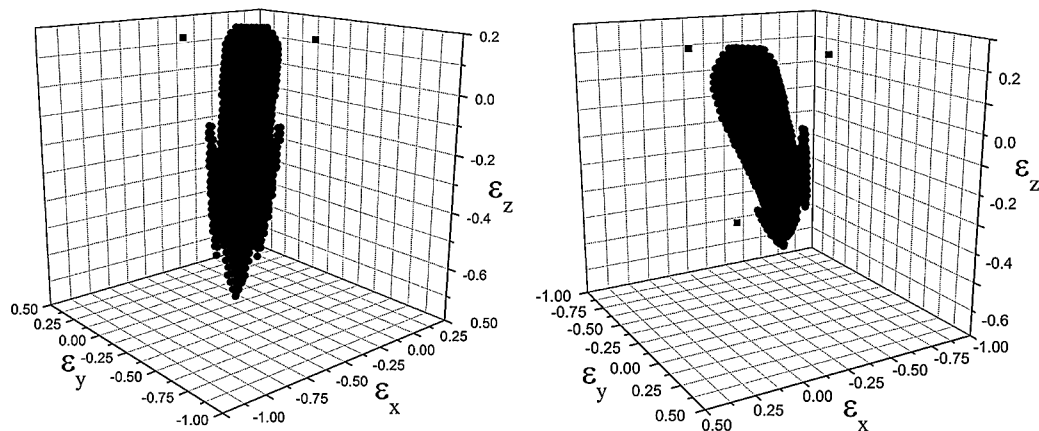


Рис. 1. Область устойчивости ГЦК-решетки в пространстве $\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z$ при диагональном тензоре деформации (потенциал Морзе, $\theta = 6$).

Это утверждение используется для ускорения расчетов методом Монте-Карло с целью обеспечения минимального перебора лучей параметров.

На рис. 1 приведена область устойчивости ГЦК-решетки, частицы которой взаимодействуют посредством потенциала Морзе (1) с параметром $\theta = 6$. Рассматриваются три координационные сферы. Видим, что область устойчивости невыпуклая: имеется основная часть, вытянутая вдоль оси $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon_z$, и три небольшие области, примыкающие к ней в зоне сильного сжатия. Установлено, что при деформации, реализующейся в этих дополнительных областях, возникает структурный переход из сжатой ГЦК-решетки в ОЦК, сжатой вдоль осей кубической симметрии и повернутой вокруг одной из осей. Это происходит вследствие «выдавливания» некоторых частиц с « n »-й координационной сферы на « $n + 1$ »-ю (рис. 2).

На рис. 2 показан пример перехода ГЦК \rightarrow ОЦК при $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \sqrt{2/3} - 1$, $\varepsilon_z = 2/\sqrt{3} - 1$; частица, принадлежавшая грани ГЦК-решетки, оказывается в центре ОЦК-решетки. На рисунке увеличены частицы, которые присутствуют и на рис. 2, а, и на рис. 2, б. На рис. 1 квадратами показаны три точки неустойчивого равновесия ОЦК-решетки. Неустойчивость связана с выбором потенциала взаимодействия, полученный результат согласуется с [8]. При уменьшении параметра θ дополнительные области увеличиваются.

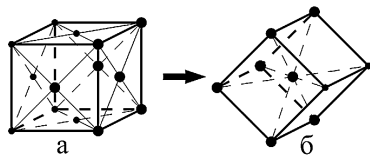


Рис. 2. Переход ГЦК (а) \rightarrow ОЦК (б).

Отдельное исследование показало, что, как и в двумерном случае [6], использование потенциала Леннарда-Джонса обеспечивает устойчивость материала при его гидростатическом сжатии, т. е. при его деформировании по линии $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon_z$, вплоть до деформаций, сколь угодно близких к точке $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon_z = -1$. При этом дополнительные области, соответствующие ОЦК-решетке, не возникают, что согласуется

с [8].

Также решена аналогичная задача деформирования ГЦК-решетки с учетом сдвиговых деформаций. Рассмотрим аффинную деформацию (9). Пусть теперь $\text{tg}\varphi_{yx} \neq 0$, $\text{tg}\varphi_{xz} \neq 0$, $\text{tg}\varphi_{zy} \neq 0$. Определитель аффинного преобразования (9) имеет вид:

$$\text{Det} = (1 + \varepsilon_x)(1 + \varepsilon_y)(1 + \varepsilon_z) + \text{tg}\varphi_{yx}\text{tg}\varphi_{xz}\text{tg}\varphi_{zy}. \quad (10)$$

Необходимо ввести ограничения на допустимые значения параметров деформации для того, чтобы аффинное преобразование было собственным ($\text{Det} > 0$), то есть каждая актуальная конфигурация была связана с отсчетной посредством непрерывной деформации. По аналогии с [6] положим все три тангенса положительными.

В ходе исследования областей устойчивости, построенных в шестимерном пространстве деформаций, обнаружены структурные переходы, в результате которых одна из осей кубической симметрии в отсчетной конфигурации становится осью [1,1,1] в актуальной конфигурации.

Молекулярно-динамическое (МД) моделирование. Для проверки полученных результатов использовался метод динамики частиц. Техника моделирования описана в [7]. Для ряда деформированных конфигураций проводился следующий вычислительный эксперимент. В качестве начального условия строилась ГЦК-решетка в деформированном состоянии с периодическими граничными условиями. Взаимодействие частиц осуществлялось посредством потенциала Морзе (1). Начальная кинетическая энергия частиц не превышала $0.0002D$. Эволюция системы описывалась при помощи численного интегрирования уравнений Ньютона методом Верле. Если в процессе эволюции системы наблюдались ограниченные по амплитуде колебания кинети-

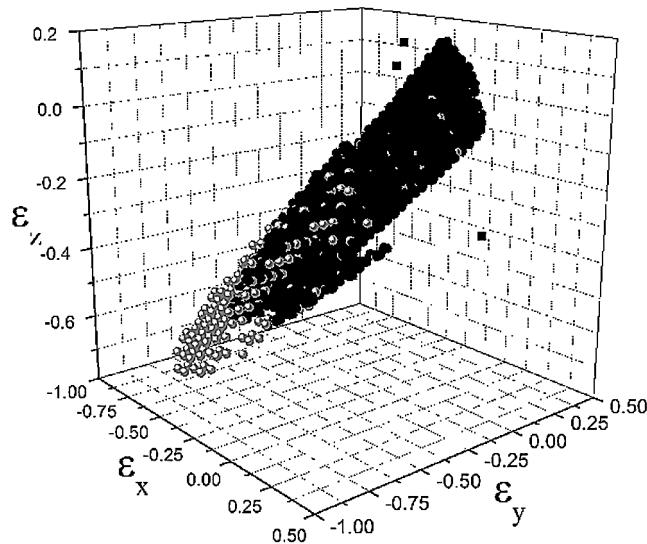


Рис. 3. Область устойчивости ГЦК-решетки в пространстве ε_x , ε_y , ε_z при диагональном тензоре деформации, (потенциал Морзе, $\theta = 6$). Серым цветом показаны точки, полученные при помощи МД-моделирования. Максимальное гидростатическое сжатие составляет 60% при теоретическом подходе и 75% при МД моделировании.

ческой энергии вокруг некоторого значения, не превышающего $0.0002D$, то делался вывод об устойчивости данной конфигурации. Если наблюдался резкий рост кинетической энергии, то деформированная конфигурация считалась неустойчивой. Области, полученные в результате молекулярно-динамического моделирования (рис. 3), совпали с приведенными на рис. 1 в пределах точности компьютерных вычислений. Наблюдающееся расхождение при сильном сжатии связано с тем, что при аналитических расчетах использовалось фиксированное количество координационных сфер, тогда как при МД-моделировании с увеличением сжатия в рассмотрение включалось все больше координационных сфер. Временные затраты на построение зон устойчивости оказались несоизмеримо больше, чем при теоретическом подходе.

Выводы. В ходе исследования устойчивости ГЦК-решетки при больших деформациях выявлено два типа структурных переходов: ГЦК \rightarrow ОЦК при сжатии вдоль осей кубической симметрии, ГЦК \rightarrow ГЦК при добавлении сдвиговых деформаций. При использовании потенциала Леннард-Джонса не наблюдается переход ГЦК \rightarrow ОЦК, материал не теряет устойчивость при сколь угодно большом гидростатическом сжатии. Молекулярно-динамическое моделирование дополняет результаты проведенного исследования в области сильного (60–75%) сжатия.

Литература

1. Лурье А. И. Нелинейная теория упругости. М.: Наука, 1980. 512 с.
2. Wallace D. C., Patrick J. L. Stability of crystal lattices // Phys. Rev. 1965. Vol. 137. N 1A. P. 152–160.
3. Milstein F., Rasky D. Theoretical study of shear-modulus instabilities in the alkali metals under hydrostatic pressure // Phys. Rev. B. 1996. Vol. 54. N 10. P. 7016–7025.
4. Товстик П. Е., Товстик Т. П. Модель двумерного графитового слоя // Вестн. С.-Петерб. ун-та. 2009. Вып. 3. С. 1–11.
5. Беринский И. Е., Иванова Е. А., Кривцов А. М., Морозов Н. Ф. Применение моментного взаимодействия к построению устойчивой модели кристаллической решетки графена // Изв. РАН. МТТ. 2007. № 5. С. 6–16.
6. Подольская Е. А., Кривцов А. М., Панченко А. Ю., Ткачев П. В. Устойчивость идеальной бесконечной двумерной кристаллической решетки // Докл. РАН. 2012. Т. 442, № 6. С. 755–758.
7. Кривцов А. М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: Физматлит, 2007. 304 с.
8. Теоретическая механика. Упругие и тепловые свойства идеальных кристаллов: учеб. пособие / И. Е. Беринский и др.; под ред. А. М. Кривцова. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2009. 144 с.
9. Born M., Huang K. Dynamical Theory of Crystal Lattices. Oxford: Clarendon Press, 1954. 420 p.
10. Podolskaya E. A., Panchenko A. Yu., Krivtsov A. M. Stability of 2D triangular lattice under finite biaxial strain // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics, 2011, 2 (2). P. 84–90.

Статья поступила в редакцию 26 апреля 2012 г.