

УДК 539.3

УСТОЙЧИВОСТЬ ИДЕАЛЬНОЙ БЕСКОНЕЧНОЙ ДВУМЕРНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

© 2012 г. Е. А. Подольская, А. М. Кривцов, А. Ю. Панченко, П. В. Ткачев

Представлено академиком Н.Ф. Морозовым 17.10.2011 г.

Поступило 07.11.2011 г.

В настоящее время в связи с развитием нанотехнологий необходимо оценивать прочностные свойства тел, содержащих конечное количество атомных слоев. Часто такие объекты бездефектны и, следовательно, их прочность близка к теоретической, или идеальной. В статье Н. Макмиллана [1] рассматривается вопрос об экспериментальном измерении идеальной прочности, которой называют максимальную величину приложенного напряжения. При определении этой величины необходимо проверять устойчивость деформированного тела относительно любого дополнительного малого искажения для каждого приращения напряжения или деформации.

М. Борн установил, что кристаллическая решетка устойчива по отношению к малым однородным искажениям, если плотность упругой энергии, вычисленная в положении равновесия, является положительно определенной квадратичной формой [2]. В работе [3] показано, что плотноупакованные ГЦК- и ГПУ-структуры устойчивы в малом при любом парном центральном силовом взаимодействии частиц. Однако, как показано в работе [4], возникают проблемы при попытке применить критерий Борна в случае конечных деформаций.

В последнее время проведен ряд независимых исследований устойчивости [5, 6] нового наноматериала графена (один слой графита) при больших деформациях без учета тепловых колебаний атомов и влияния граничных условий с использованием потенциалов взаимодействия [7, 8]. В качестве критерия устойчивости использовано условие вещественности частот упругих волн. Исследование устойчивости графена является достаточно сложной задачей, что связано как с геометрией решетки, так и с применяемыми потенциалами взаимодействия. В данной работе рассматривается более простой объект, позволяющий получить аналитическое решение.

Целью работы является исследование устойчивости идеальной двумерной треугольной кристаллической решетки – атомного слоя в ГЦК- и ГПУ-структурах. Взаимодействие частиц, составляющих решетку, описывается при помощи парного центрального силового взаимодействия. Это удобная и простая модель для построения теории, аналитических расчетов и вычислительных экспериментов.

Данная работа продолжает исследование [9], где приведена часть области устойчивости двумерной треугольной решетки без учета сдвига. Первоначально задачей являлось установление физического смысла границ области устойчивости, найденной аналитически в работе [10], и верификация полученных результатов с помощью численного эксперимента. Однако детальное исследование задачи показало существование дополнительных областей устойчивости, связанных со структурным переходом в материале.

В работе применяется прямое тензорное исчисление [11]. В качестве закона взаимодействия используются потенциалы Морзе $\Pi(r)$ и Леннарда-Джонса $\Pi_{LJ}(r)$:

$$\begin{aligned}\Pi(r) &= D \left[\exp\left(-2\theta\left(\frac{r}{a}-1\right)\right) - 2 \exp\left(-\theta\left(\frac{r}{a}-1\right)\right) \right], \\ \Pi_{LJ}(r) &= D \left[\left(\frac{a}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{a}{r}\right)^6 \right].\end{aligned}\quad (1)$$

Параметр D отвечает за глубину потенциальной ямы, параметр θ – за ее ширину. Вблизи положения равновесия при $\theta = 6$ потенциал Морзе эквивалентен потенциалу Леннарда-Джонса с теми же значениями глубины потенциальной ямы и равновесного расстояния a [12]. Важное отличие потенциала Морзе от потенциала Леннарда-Джонса состоит в том, что при сжатии материала в точку ($r = 0$) сила взаимодействия остается конечной, в частности, при $\theta = 6$ сила отталкивания имеет величину порядка $10^6 \frac{D}{a}$. Это позволяет проводить молекулярно-динамическое моделирование при сильном сжатии. Кроме того, быстрое затухание

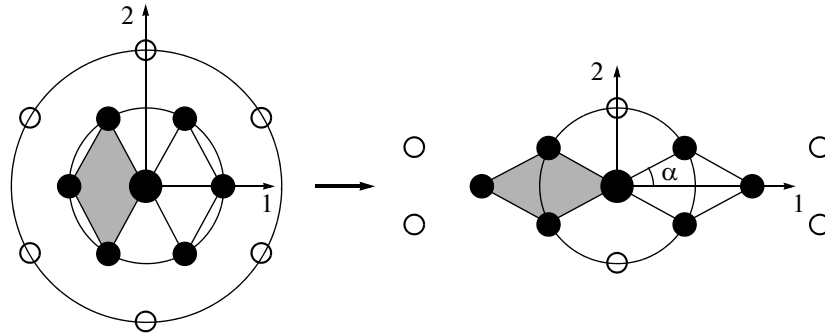


Рис. 1. Переход от вертикальной к горизонтальной ориентации треугольной решетки. Цифрами отмечены оси координат. Серым цветом выделена элементарная ячейка, кружком отмечен отсчетный атом, кружками меньшего радиуса – атомы первой координационной сферы, окружностями – второй.

экспонент дает возможность ограничиться учетом меньшего числа координационных сфер.

Для описания материала используется уравнение движения сплошной среды в форме Пиолы [11]:

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} = \overset{\circ}{\nabla} \cdot \mathbf{P}, \quad (2)$$

где \mathbf{u} – вектор перемещений, \mathbf{P} – тензор напряжений Пиолы, $\overset{\circ}{\nabla}$ – оператор Гамильтона в отсчетной конфигурации.

Далее исследуется первая вариация уравнения (2) вблизи деформированного состояния кристаллической решетки. В результате преобразования получаем уравнение

$$\ddot{\mathbf{v}} = {}^4\mathbf{Q} \cdots (\nabla \nabla \mathbf{v}), \quad (3)$$

где $\mathbf{v} = \delta \mathbf{u}$ – первая вариация вектора перемещений, ∇ – оператор Гамильтона в актуальной конфигурации, ${}^4\mathbf{Q}$ – акустический тензор четвертого ранга, зависящий от первой и второй производных потенциала взаимодействия (усилий в связях и жесткостей связей), а также от геометрии окружения частицы [11, 12]. Решение уравнения (3) ищем в виде волны

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 e^{i\omega t} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}}, \quad (4)$$

где \mathbf{K} – волновой вектор, ω – частота. Решение (4) будет описывать волну, если при вещественном волновом векторе \mathbf{K} частота ω также будет вещественна, т.е. $\omega^2 > 0$ (динамический критерий устойчивости). Статическим критерием устойчивости является положительность модулей Юнга и модулей сдвига [11], определяемых в актуальной (деформированной) конфигурации.

Подставляя (4) в (3), получим систему линейных однородных уравнений $(\mathbf{D} - \omega^2 \mathbf{E}) \cdot \mathbf{v}_0 = 0$, которая имеет нетривиальное решение в случае равенства нулю ее определителя. Тензор \mathbf{D} определяется формулой $\mathbf{D} = {}^4\mathbf{Q} \cdot \mathbf{K} \mathbf{K}$, \mathbf{E} – единичный тензор.

Для двумерной решетки условия устойчивости записываются в виде неравенств

$$I_1(\mathbf{D}) > 0, \quad I_2(\mathbf{D}) > 0, \quad 2I_1(\mathbf{D}^2) \geq I_1^2(\mathbf{D}), \quad (5)$$

где I_1, I_2 – главные инварианты тензора \mathbf{D} . Неравенства (5) должны выполняться при любом \mathbf{K} . Последнее неравенство в двумерном случае выполняется тождественно. Это означает, что квадрат частоты при смене знака проходит через нуль, следовательно, динамический критерий устойчивости в данном случае совпадет со статическим.

На рис. 1 изображена характерная часть треугольной решетки до и после деформации. Выделены оси, вдоль которых осуществляется деформирование. До деформации угол $\alpha = 60^\circ$. Введем ортонормированный базис так, чтобы вектор \mathbf{e}_1 был сонаправлен с осью 1, а \mathbf{e}_2 – с осью 2.

При рассмотрении больших деформаций необходимо учитывать более одной координационной сферы, например, для корректного описания перехода от вертикальной ориентации решетки к горизонтальной (рис. 1), который по сути является поворотом решетки на 90° . В [9] по этой причине была получена лишь часть области устойчивости. На рис. 1 серым цветом выделена элементарная ячейка, кружком отмечен отсчетный атом, кружками меньшего радиуса – атомы первой координационной сферы, окружностями – второй. Видим, что в число ближайших соседей отсчетного атома в переориентированной решетке попадают атомы со второй координационной сферы. Если исключить атомы второй сферы, то вместо второго положения равновесия получим явно неустойчивую конфигурацию. Дополнительное исследование показало, что учет следующих координационных сфер не оказывает заметного влияния на область устойчивости.

В случае деформирования без учета сдвига (рис. 1) условия (5) принимают вид

$$Q_{11} > 0, \quad Q_{12} > 0, \quad Q_{21} > 0, \quad Q_{22} > 0, \quad (6)$$

$$B > -\sqrt{AC}, \quad (7)$$

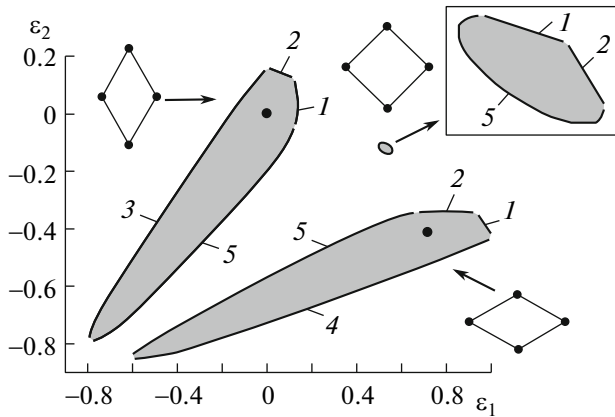


Рис. 2. Области устойчивости треугольной решетки в пространстве деформаций $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ без сдвига. Взаимодействие описывается потенциалом Морзе. Границы областей определяются уравнениями: $Q_{11} = 0$ (1), $Q_{22} = 0$ (2), $Q_{21} = 0$ (3), $Q_{12} = 0$ (4), $B = -\sqrt{AC}$ (5), где $A = Q_{11}Q_{21}, C = Q_{12}Q_{22}, 2B = Q_{11}Q_{22} + Q_{12}Q_{21} - 4Q_{44}^2$, Q_{ij} – компоненты акустического тензора 4Q .

где $A = Q_{11}Q_{21}, C = Q_{12}Q_{22}, 2B = Q_{11}Q_{22} + Q_{12}Q_{21} - 4Q_{44}^2$, Q_{ij} – компоненты тензора 4Q . Кроме того, $Q_{ij}, i, j = 1, 2$, – это квадраты скоростей распространения волн. Условия (6) являются необходимыми, так как в случае устойчивости все скорости распространения волн вещественны [11].

На рис. 2 серым цветом выделены области устойчивости двумерной треугольной решетки, ε_1 и ε_2 – линейные части тензора деформаций Коши–Грина, взаимодействие осуществляется посредством потенциала Морзе (1) с параметром $\theta = 6$. Условие (7), дополняющее условия (6), позволяет выделить три области устойчивости, соответствующие горизонтальной и вертикальной ориентациям решетки, а также промежуточной квадратной конфигурации.

Форма и количество областей зависит от выбора потенциала взаимодействия: при уменьшении параметра θ исчезает промежуточная область. Отдельное исследование показало, что использование потенциала Леннард-Джонса обеспечивает устойчивость материала при его гидростатическом сжатии, т.е. при его деформировании по линии $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$, вплоть до деформаций, сколь угодно близких к точке $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = -1$ (рис. 3).

Покажем, что динамический критерий устойчивости совпадает со статическим. Для этого вычислим модули Юнга и модули сдвига в каждой деформированной конфигурации,

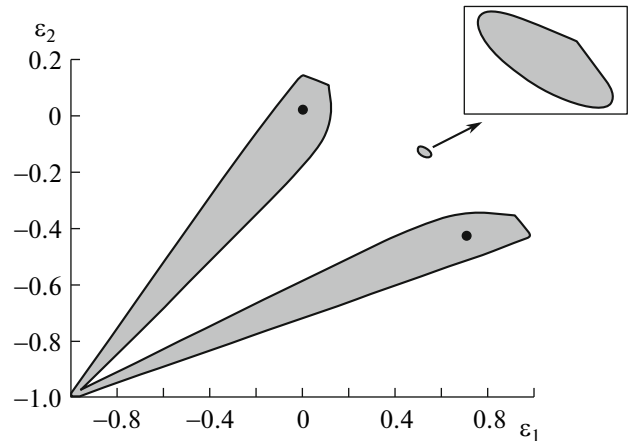


Рис. 3. Области устойчивости треугольной решетки в пространстве деформаций $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ без сдвига. Взаимодействие описывается потенциалом Леннард-Джонса.

пользуясь представлением [12] для тензора напряжений Коши:

$$\sigma = \frac{1}{2V} \sum_k A_k F_k,$$

где $V = \frac{\sqrt{3}}{2}(\varepsilon_1 + 1)(\varepsilon_2 + 1)$ – объем элементарной ячейки, A_k – радиусы-векторы частиц относительно отсчетного атома (находится в центре шестиугольника на рис. 1), F_k – векторы сил взаимодействия, $F_k = -\Pi'(A_k)$.

Требование положительности модулей Юнга E и модулей сдвига G приводит к результату, совпадающему с приведенным на рис. 2: модули Юнга меняют знак на границах 1, 2 и 5, модули сдвига – на границах 3 и 4, в серых зонах все модули положительны и деформированное состояние устойчиво. Потеря устойчивости при гидростатическом сжатии связана с изменением знака модуля сдвига, что согласуется с результатами вычислений для ГЦК-решетки [13].

Для проверки полученных результатов использовался метод динамики частиц. Техника моделирования описана в [12]. Для ряда деформированных конфигураций проводили следующий вычислительный эксперимент. В качестве начального условия строилась треугольная решетка в деформированном состоянии с периодическими граничными условиями. Взаимодействие между частицами описывалось посредством потенциала Морзе (1). Начальная кинетическая энергия частиц не превышала $0.0002D$. Эволюция системы описывалась решением задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

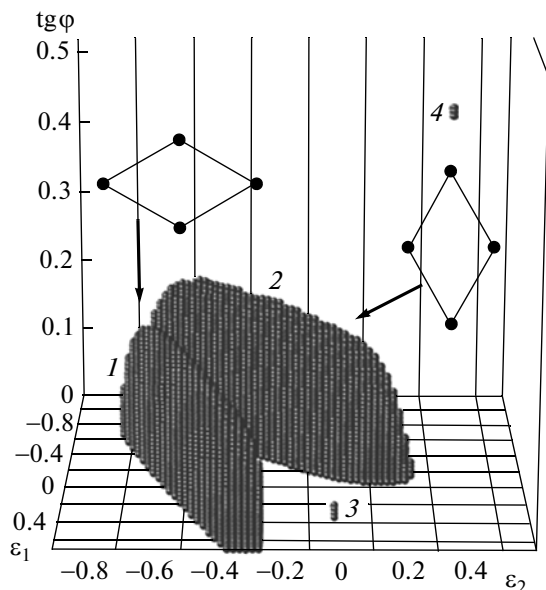


Рис. 4. Области устойчивости треугольной решетки в пространстве деформаций ε_1 , ε_2 , φ . Взаимодействие описывается потенциалом Морзе. Области устойчивости соответствуют: 1 – горизонтальной ориентации решетки, 2 – вертикальной ориентации решетки, 3 – квадратной конфигурации при $\varphi \approx 0$, 4 – квадратной конфигурации при $\varphi \approx 26^\circ$.

$$m\ddot{\mathbf{r}}_k = \sum_{n=1}^N F(|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n|) \frac{\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n|}, \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (8)$$

где N – число частиц, m – масса частицы, \mathbf{r}_k – радиус-вектор частицы под номером k . Если далее наблюдались ограниченные по амплитуде колебания кинетической энергии вокруг некоторого значения, не превышающего $0.0002D$, то делался вывод об устойчивости данной конфигурации. Если наблюдался резкий рост кинетической энергии, то деформированная конфигурация признавалась неустойчивой. Области, полученные в результате молекулярно-динамического моделирования, совпали с приведенными на рис. 2 в пределах точности компьютерных вычислений. Временные затраты на построение зон устойчивости оказались несоизмеримо больше, чем при аналитическом подходе.

Так же была решена аналогичная задача деформирования треугольной решетки с учетом сдвига. Получены две основные и две промежуточные области в трехмерном пространстве деформаций ε_1 , ε_2 , φ , соответствующие двум ориентациям решетки и квадратным конфигурациям

при угле сдвига $\varphi \approx 0$ и $\varphi \approx 26^\circ$. Эти области симметричны относительно плоскости $\varphi = 0$ (рис. 4).

Таким образом, исследована устойчивость двумерной треугольной решетки при произвольной деформации. Описан структурный переход от вертикальной ориентации решетки к горизонтальной (рис. 2). В случае двухосной деформации задача решена аналитически. Границы полученных областей устойчивости объяснены как в терминах коэффициентов волнового уравнения (3), так и при помощи модуля Юнга и модуля сдвига, которые не могут быть отрицательными в реальном материале. При использовании потенциала Леннард-Джонса материал не теряет устойчивости при сколь угодно большом гидростатическом сжатии. Применение в тех же условиях потенциала Морзе позволяет описать потерю устойчивости и показать, что неустойчивость связана с изменением знака модуля сдвига. Результаты аналитических расчетов подтверждены молекулярно-динамическим моделированием.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ишлинский А.Ю. Атомистика разрушения. Сборник статей 1983–1985 гг. М.: Мир, 1987. 248 с.
2. Born M., Huang K. Dynamical Theory of Crystal Lattices. Oxford: Clarendon Press, 1954. 420 p.
3. Wallace D.C., Patrick J.L. // Phys. Rev. 1965. V. 137. № 1A. P. 152–160.
4. Wang J., Li J., Yip S., Phillpot S., et al. // Phys. Rev. 1995. V. 52. № 17B. P. 12627–12635.
5. Товстик П.Е., Товстик Т.П. // Вестн. СПбГУ. 2009. В.3. С. 1–11.
6. Дмитриев С.В., Баимова Ю.А., Савин А.В., Кившарь Ю.С. // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 93. В. 10. С. 632–637.
7. Беринский И.Е., Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. // Изв. РАН. МТТ. 2007. № 5. С. 6–16.
8. Savin A.V., Kivshar Yu.S., Hu B. // Phys. Rev. B. V. 82. 2010. 195422.
9. Ткачев П.В., Кривцов А.М. // XXXIII Неделя науки СПбГПУ. Материалы Междунар. науч.-практ. конф. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2004. Ч. 5. С. 4–6.
10. Подольская Е.А., Ткачев П.В., Кривцов А.М. XXXIX Неделя науки СПбГПУ. Материалы Междунар. науч.-практ. конф. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2010. Ч. 5. С. 111–112.
11. Лурье А.И. // Нелинейная теория упругости. М.: Наука, 1980. 512 с.
12. Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: Физматлит, 2007. 304 с.
13. Milstein F., Rasky D. // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. № 10. P. 7016–7025.