

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
Физико-механический факультет
Кафедра “Теоретическая механика”

Диссертация допущена к защите
Зав. кафедрой
А. М. Кривцов
“ ”
2011г.

**ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание академической степени
МАГИСТРА**

Тема: Устойчивость идеальной бесконечной
кристаллической решетки

Направление: 010900 — Механика

Выполнил студент гр. 60510/10

Е. А. Подольская

Руководитель, д.ф.-м.н., проф.

А. М. Кривцов

Консультант по вопросам охраны труда, к.т.н., доц.

В. В. Монашков

Санкт-Петербург
2011

Содержание

1 Введение	3
1.1 Литературный обзор и содержание работы	3
1.2 Прямое тензорное исчисление	8
1.3 Объект исследования, потенциал взаимодействия и основные обозначения	9
2 Алгоритм исследования устойчивости	13
3 Устойчивость треугольной решетки при растяжении и сжатии в ортогональных направлениях	17
3.1 Геометрия	17
3.2 Условия устойчивости	18
3.3 О границах областей устойчивости	22
3.4 Молекулярно-динамическое моделирование	29
3.5 Выводы	34
4 Устойчивость треугольной решетки при растяжении и сжатии в ортогональных направлениях с учетом сдвига	36
4.1 Геометрия	36
4.2 Условия устойчивости	38
5 Устойчивость ГЦК решетки при растяжении и сжатии в ортогональных направлениях	42
5.1 Геометрия	42
5.2 Условия устойчивости	45
5.3 Молекулярно-динамическое моделирование	48
6 Заключение	49
7 Приложение А. Охрана труда	53
7.1 Требования к вентиляции, отоплению и кондиционированию воздуха	54
7.2 Требования к уровням шума	55
7.3 Требования к естественному и искусственному освещению для помещений вычислительных комнат	56
7.4 Пожарная безопасность при работе с вычислительной техникой	57
7.5 Требования электробезопасности	58
7.6 Эргономические требования	58
7.7 Напряженность трудового процесса	59

1 Введение

1.1 Литературный обзор и содержание работы

В начале XX века англичанин Аллан Гриффит при изучении механических свойств стекловолокна пришел к выводу, что вследствие наличия дефектов предел прочности реального материала на несколько порядков ниже, чем напряжение, теоретически требующееся для разрушения атомных связей. В настоящее время в связи с развитием нанотехнологий становится необходимым оценивать прочностные свойства тел, содержащих счетное количество атомных слоев, причем зачастую такие объекты бездефектны, и, следовательно, их прочность близка к теоретической, или идеальной. В статье Макмиллана из сборника [9] рассматривается вопрос о возможности экспериментального измерения идеальной прочности, а также приводится обзор публикаций, в которых идеальной прочностью называют максимальную величину приложенного напряжения и предполагается, что материал устойчив во время всего процесса деформирования. Действительно, возрастающий характер диаграммы нагружения означает устойчивость относительно малых приращений деформации вдоль пути нагружения, но из этого еще не следует, что каждая деформированная конфигурация, существующая на этом пути, будет устойчива при любом добавленном малом искажении. Поэтому при расчете идеальной прочности необходимо проверять устойчивость деформированного тела для каждого приращения напряжения или деформации. В данной работе исследуется устойчивость простейших объектов с микроструктурой — треугольной и гранецентрированной кубической (ГЦК) решеткой. Реальных материалов с треугольной решеткой не существует, тем не менее, это удобная модель для построения теории и проведения вычислительных экспериментов. ГЦК решеткой обладают многие металлы, например, медь, железо (при определенных условиях), серебро, золото, платина.

Поведение материала можно описывать двумя способами: как сплошную среду или с учетом микроструктуры. Ключевым понятием в классической континуальной теории является удельная потенциальная энергия деформации w , введенная Грином. Существование такой функции, согласно [12], “связывается с приписываемой упругой среде способностью аккумулировать работу внешних сил при нагружении и возвращать запасенную энергию при разгрузении”. Вариация удельной потенциальной энергии равна элементарной работе внешних сил, деленной на объем тела в отсчетной конфигурации. Это соотношение выражает первый закон термодинамики. Исходя из определения элементарной работы и предполагая, что удельная потенциальная энергия является функцией деформационного градиента,

можно получить соотношение для тензора напряжений Пиола:

$$\underline{\underline{P}} = \frac{\partial w}{\partial \overset{\circ}{\nabla} \underline{\underline{R}}}.$$

В случае изотропного материала удельную потенциальную энергию можно представить в виде функции тензора Грина, что позволяет вывести формулы для тензоров Коши и Пиола.

Конкретному заданию функции w отвечает некоторая группа материалов. Очевидно, что w должна обладать рядом свойств, которые вытекают из сравнения расчетов с результатами простейших экспериментов (одноосное растяжение, простой сдвиг и т.д.). В линейной теории упругости w является положительно определенной квадратичной формой, что согласуется с вариационными принципами минимума: при отсутствии деформаций потенциальная энергия минимальна, и она возрастает в процессе деформирования. Говорят, что в этом случае материал устойчив в энергетическом смысле.

В теории конечных деформаций функция w имеет более сложный вид. Все рассуждения проводятся в терминах ее первых и вторых производных по различным аргументам: компонентам и инвариантам тензоров и мер деформаций. Основной проблемой нелинейной теории упругости, согласно [18], является определение подходящих классов функций w , в том числе обеспечивающих устойчивость материала.

Впервые этот вопрос был рассмотрен Адамаром в начале XX века [26]. По Адамару, деформированное состояние устойчиво, если вторая вариация полной энергии положительна при равенстве нулю первой и второй вариаций на границе. Кроме того, он показал, что в случае устойчивости все скорости распространения волн вещественны. Условия Адамара также связывают с условиями сильной эллиптичности (строгое неравенство) уравнений равновесия. В терминах w , тензора Пиола и деформационного градиента оно имеет вид:

$$\underline{\underline{m}} \cdot \cdot \frac{\partial \underline{\underline{P}}}{\partial \overset{\circ}{\nabla} \underline{\underline{R}}} \cdot \cdot \underline{\underline{m}} > 0 \Leftrightarrow \underline{\underline{m}} \cdot \cdot \frac{\partial^2 w}{\partial \overset{\circ}{\nabla} \underline{\underline{R}}^2} \cdot \cdot \underline{\underline{m}} > 0.$$

При этом нельзя утверждать, что данное условие действительно необходимо и достаточно, как условие положительной определенности в линейной теории. Сильная эллиптичность, по мнению Труслелла и Лурье, является слишком жестким ограничением, а эллиптичность, наоборот, слишком слабым даже в линейной теории.

Существует множество приемов для математического описания удельной потенциальной энергии w [12]. Модельные материалы носят имена ученых середины XX века: Сетх (заменил в законе Гука линейный тензор деформаций тензором

Альманзи), Синьорини (предложил закон зависимости тензора напряжений Коши от меры деформации Альманзи), Мурнаган (w представляется полиномом по степеням компонент тензора Коши-Грина с постоянными коэффициентами, которые нужно определить из эксперимента), Блейтц и Ко (получили аппроксимацию w в виде трехконстантного выражения по результатам измерений деформаций специальных сортов резины) и т.д.

В 70е годы появились попытки обобщить теорию. Помимо устойчивости, условия сильной эллиптичности и условия Адамара связываются с гладкостью решений уравнений равновесия, выпуклостью w , возможностью распространения волн [18, 12, 5]. В работе [5] предложена методика проверки условий Адамара, которую можно использовать как при выборе уравнения состояния материала, так и при анализе применимости найденных решений конкретных задач нелинейной теории. В работе [6], вышедшей в 1994 году, выводятся условия сильной эллиптичности в моментно-упругих средах.

Помимо континуального подхода, существует альтернативная концепция описания материалов — дискретная. Каждое вещество обладает внутренней структурой, которая не может не сказываться на его свойствах. При упругом деформировании различие между двумя подходами к описанию материала может быть незначительным. При неупругом деформировании, а тем более при разрушении, что сопровождается изменением внутренней структуры вещества, континуальное описание вызывает затруднения. Кроме того, не вполне понятно, допустимо ли описывать нанообъекты, состоящие часто из нескольких атомарных слоев, с позиций классических теорий.

Начало исследованию сред с микроструктурой положил М. Борн в своих работах по анализу динамики кристаллических решеток [2, 3, 22]. В начале 1960-х годов появились первые работы [19, 25] по численному моделированию сред с микроструктурой на основе метода молекулярной динамики. Согласно этому методу материал, то есть сплошную среду, можно представить в виде совокупности материальных точек (атомов, ионов, молекул или, наоборот, астрономических объектов), взаимодействующих друг с другом и с внешними полями по определенным законам. Таким образом осуществляется переход от континуальной модели к дискретной, что является одним из важнейших шагов на пути от макромира к микромиру. Стоит также отметить работы [20, 27], в которых содержится подробная информация об исследованиях в области компьютерного моделирования методом динамики частиц.

На сегодняшний день существует множество работ российских и зарубежных ученых как в области компьютерного моделирования, так и аналитического ис-

следования кристаллических структур на базе метода молекулярной динамики [4, 10, 33]. Для описания взаимодействия используют различные потенциалы, параметры которых обычно определяются из сравнения механических свойств модельного и реального материалов. С одной стороны, такой подход удобнее, чем характерные для континуальной концепции определяющие уравнения, поскольку во многих случаях речь идет о скалярной функции расстояния, а не об операторах, содержащих тензорные характеристики и термодинамические величины. С другой стороны, объекты исследования при больших деформациях оказываются анизотропными, тогда как при классическом подходе изотропия сохраняется.

Первые работы по исследованию устойчивости кристаллических структур также связаны с именем Борна [22], который установил, что кристаллическая решетка устойчива по отношению к малым однородным искажениям, если плотность упругой энергии, вычисленная в положении равновесия, является положительно-определенной квадратичной формой. Соответствующая матрица состоит из изотермических упругих модулей. В работе [31], вышедшей в 1965 году, показано, что плотноупакованные ГЦК и ГПУ структуры устойчивы в малом при любом парном центральном силовом взаимодействии частиц. Критерием устойчивости считается положительность собственных чисел динамической матрицы, компоненты которой являются коэффициентами в разложении в ряд Тейлора потенциальной энергии системы уже при произвольных малых искажениях. В статье [32] указаны проблемы, возникающие при попытке применить критерий Борна в случае конечных деформаций. Исходя из интеграла Гиббса получен критерий устойчивости — положительность определителя матрицы жесткости, составленной как из упругих модулей, так и из компонент тензора напряжений (по форме записи эта матрица похожа на акустический тензор [12]). Проведено сравнение с молекулярно-динамическим моделированием (использовался потенциал ЕАМ — метод погруженного атома) для гидростатического растяжения и сжатия ГЦК решетки. В работе [28] изучается устойчивость ГЦК и ОЦК кристаллов с применением псевдо-потенциалов. Критерий Борна также модифицируется. Показано, что потеря устойчивости при сжатии и фазовые переходы связаны с обращением в ноль модуля сдвига. В статье [23] критерий устойчивости [31] распространяется на случай многочастичного взаимодействия (потенциал ЕАМ) и для проверки производится молекулярно-динамическое моделирование ГЦК решетки.

Для описания взаимодействия между частицами в последних работах используются более сложные (к примеру, многочастичные) потенциалы, чем те, которыми пользовались Борн [22] или Уоллес [31], поэтому теоретический анализ по трудоемкости становится сравнимым с прямым моделированием. В работе [24]

содержится критика часто применявшегося ранее потенциала Леннарда-Джонса. В кристалле, частицы которого взаимодействуют посредством этого потенциала, имеется строгое соотношение между энергией образования вакансий и энергией когезии, не наблюдающееся у реальных металлов. С другой стороны, существуют парные потенциалы с большим, чем у Леннарда-Джонса, числом параметров, причем они моделируют как силовое, так и моментное взаимодействие [1], позволяющее описать неплотноупакованные структуры. В работе [17] рассматривается деформирование листа графена с использованием потенциала [1], силовой частью которого, правда, является потенциал Леннарда-Джонса. Для исследования устойчивости при аффинном преобразовании решетки строится акустический тензор четвертого ранга и используется критерий, заключающийся в существовании стационарных волн деформации. Отметим, что объект, называемый акустическим тензором, не является акустическим тензором, определенным в [12]. При этом в линейном приближении он совпадает с тензором жесткости среды. Авторы построили область устойчивости, в которой деформации растяжения и сдвига имеют порядок 0.12–0.15 (в материале Леннарда-Джонса разрыв связи наступает при растяжении на 11 %).

Цель настоящей работы — это исследование устойчивости бесконечных двумерной треугольной и трехмерной ГЦК решеток при жестком нагружении в ортогональных направлениях. Кроме того, в двумерном случае строится область устойчивости материала при наличии сдвиговой деформации. Взаимодействие между частицами полагается парным силовым, поскольку речь идет о плотноупакованных структурах. Критерий устойчивости, как и в [17], строится при помощи “акустического” тензора четвертого ранга, который далее будем называть тензором жесткости. Основа данной работы была заложена в [16], появившейся на несколько лет раньше, чем [17]. В статье [16] приведена часть области устойчивости двумерной треугольной решетки для диагонального тензора деформаций.

В первой части работы приводятся основные соотношения и алгоритм исследования устойчивости. Во второй части рассматривается деформирование двумерной треугольной решетки без сдвига, выясняется смысл границ области устойчивости и результаты проверяются с помощью молекулярно-динамического моделирования. В третьей части работы добавляется сдвиговая деформация. В четвертой части исследуется ГЦК решетка без учета сдвигов и результаты также проверяются с помощью молекулярно-динамического моделирования. Некоторые результаты этой работы приведены в статье [15]: области устойчивости треугольной решетки без учета сдвига и часть области устойчивости ГЦК решетки, построенная по набору достаточных условий.

1.2 Прямое тензорное исчисление

В работе используется прямое тензорное исчисление [12, 7]. Векторные величины подчеркиваются один раз \underline{a} , тензорные величины — два раза $\underline{\underline{A}}$. Ранг тензора обозначается верхним индексом, расположенным слева от тензора, ${}^4\underline{\underline{C}}$ и опускается в случае тензоров второго ранга. Тензором ранга n будем называть сумму объектов, состоящих из n упорядоченных векторов, связанных посредством операции тензорного умножения. Слово “упорядоченный” подчеркивает некоммутативность тензорного умножения. Тензоры ранга n образуют линейное пространство: сложение коммутативно, ассоциативно, выполняется дистрибутивность по числу и по тензору, умножение на число также ассоциативно; существует единичный элемент $\underline{\underline{E}}$ и нулевой элемент, состоящий из набора нулевых векторов. К скалярам можно относиться как к тензорам нулевого ранга, к векторам — как к тензорам первого ранга.

Существует три типа умножения векторов: скалярное $\underline{a} \cdot \underline{b}$ (в результате получается число), векторное $\underline{a} \times \underline{b}$ (в результате получается вектор) и тензорное $\underline{a} \otimes \underline{b}$ (в результате получается диада, тензор есть сумма диад). Обычно знак тензорного умножения \otimes опускают и пишут просто \underline{ab} . Ввиду линейности пространства тензоров ранга n дальнейшие понятия будем вводить на примере диад, триад и т.д. Двойное скалярное произведение определяется как $\underline{ab} \cdots \underline{cd} = (\underline{b} \cdot \underline{c})(\underline{a} \cdot \underline{d})$. Аналогично тройное скалярное выглядит следующим образом $\underline{abc} \cdots \underline{def} = (\underline{c} \cdot \underline{d})(\underline{b} \cdot \underline{e})(\underline{a} \cdot \underline{f})$. Следом тензора второго ранга называется $\text{tr } \underline{\underline{ab}} = \underline{a} \cdot \underline{b}$. Определителем тензора второго ранга $\det \underline{\underline{A}}$ называется определитель соответствующей этому тензору матрицы. По аналогии с векторами, в пространстве тензоров второго ранга существует базис из m^2 диад, где m — размерность соответствующего векторного пространства. Если, к примеру, векторный базис состоит из двух векторов \underline{e}_1 и \underline{e}_2 , то в тензорный базис войдут четыре диады $\underline{e}_1\underline{e}_1$, $\underline{e}_1\underline{e}_2$, $\underline{e}_2\underline{e}_1$ и $\underline{e}_2\underline{e}_2$. Действительно, в силу линейности тензорного пространства:

$$\underline{ab} = (a_1\underline{e}_1 + a_2\underline{e}_2)(b_1\underline{e}_1 + b_2\underline{e}_2) = a_1b_1\underline{e}_1\underline{e}_1 + a_1b_2\underline{e}_1\underline{e}_2 + a_2b_1\underline{e}_2\underline{e}_1 + a_2b_2\underline{e}_2\underline{e}_2.$$

Из коэффициентов при базисных диадах можно составить матрицу. Определитель этой матрицы и есть определитель тензора второго ранга.

Линейная операция, в результате которой векторы, образующие диаду, меняются местами, называется транспонированием и обозначается $(\underline{ab})^T = \underline{ba}$. Тензор второго ранга, который не меняется при транспонировании, называется симметричным. Если тензор второго ранга при транспонировании меняется на противоположный, то он называется антисимметричным. Любой тензор второго ранга можно представить в виде суммы симметричного и антисимметричного тензоров

единственным образом. Операция симметризации обозначается $\underline{\underline{A}}^S = \frac{1}{2} (\underline{\underline{A}} + \underline{\underline{A}}^T)$.

1.3 Объект исследования, потенциал взаимодействия и основные обозначения

Объектом исследования в данной работе является простая кристаллическая решетка. Кристалл — это твердое тело, частицы которого (атомы, ионы или молекулы) расположены в определенном, периодически повторяющемся порядке, образуя пространственную кристаллическую решетку. Простейшей моделью тела с микроструктурой является монокристалл. Кристаллической решеткой называется множество точек (частиц, узлов), для которого существует такая пара (в трехмерном пространстве тройка) некомпланарных векторов, что смещение этого множества на любой из них есть тождественное преобразование. Это множество неограничено в пространстве. Если такая пара (тройка) векторов существует, то она является не единственной. Из всех возможных выберем такую, чтобы параллелограмм (параллелепипед), построенный на ее векторах, имел минимальную площадь (объем). Эти векторы называются основными, а параллелограмм (параллелепипед) — элементарной ячейкой. Основные векторы тоже определены неоднозначно.

Совокупность узлов, которая может быть получена из одного узла композициями перемещений на основные векторы, называется решеткой Браве данной кристаллической решетки. Простой называется решетка, совпадающая со своей решеткой Браве. Это означает, что для простой решетки перемещение на вектор, соединяющий любые два узла, есть тождественное преобразование. В противном случае кристаллическая решетка называется сложной. Элементарная ячейка простой решетки содержит один узел. В случае узлов, находящихся на границе ячейки, требуется следующее уточнение: элементарной ячейкой называется объединение внутренней области соответствующего параллелограмма (параллелепипеда) с такой частью его границы, что, перемещая ее на основные векторы, можно заполнить все пространство без перекрытий.

Рассмотрим множество частиц, которое в равновесии образует простую кристаллическую решетку. Далее для краткости будем иногда называть частицы атомами. Силы взаимодействия между атомами полагаются парными, центральными и зависящими только от межатомного расстояния следующим образом: при сближении частиц возникают силы отталкивания и наоборот. При увеличении межатомного расстояния силы притяжения достаточно быстро убывают, поэтому можно считать, что частица взаимодействует с небольшим ограниченным числом соседних атомов. Такой подход применяется для описания металлических кри-

сталлов.

Часто в расчетах используются потенциалы Морзе и Леннарда-Джонса:

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

Параметр D отвечает за глубину потенциальной ямы, параметр θ — за ее ширину. Вблизи положения равновесия при $\theta = 6$ потенциал Морзе эквивалентен потенциальному Леннарда-Джонса с теми же значениями глубины потенциальной ямы и равновесного расстояния a . Важное отличие потенциала Морзе от потенциала Леннарда-Джонса состоит в том, что при сжатии материала в точку ($r = 0$) будем при $\theta = 6$ иметь конечную силу отталкивания порядка $10^6 D/a$. Это позволяет проводить молекулярно-динамическое моделирование при сильном сжатии. Кроме того, быстрое затухание экспонент дает возможность ограничиться меньшим числом атомов. На рис. 1 приведены графики для потенциалов Морзе при $\theta = 6$ (красный) и Леннарда-Джонса (синий). Видим, что для потенциала Морзе взаимодействием с атомами, находящимися на удвоенном равновесном расстоянии, можно пренебречь. Кроме того, в книге [11] было показано, что 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.

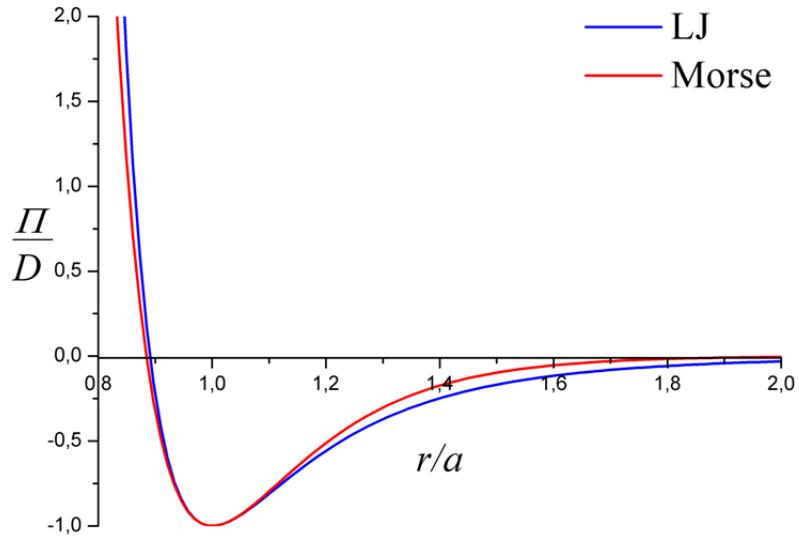


Рис. 1: Потенциалы Морзе при $\theta = 6$ (красный) и Леннарда-Джонса (синий)

Для описания материала введем систему координат и свяжем положение каждой частицы с началом отсчета. Выберем любую частицу, так как решетка простая,

и назовем ее отсчетной (или нулевой). Ввиду симметрии кристаллической решетки существуют множества атомов (координационные сферы), находящихся на одном и том же расстоянии от отсчетного. Совокупность ближайших соседей частицы называется первой координационной сферой, более далекие соседи образуют последующие сферы. Присвоим частицам номера $k = \pm 1 \dots \pm N$, причем частицы, расположенные симметрично относительно отсчетной, будут иметь противоположные по знаку номера. В простой решетке частицы всегда можно разбить на такие пары. Запишем радиус-векторы, определяющие положения частиц относительно отсчетного атома:

$$\underline{a}_k = \underline{r}_k - \underline{r}_0, \quad (2)$$

где \underline{r}_k определяет положение частиц относительно начала координат. Очевидно, что $\underline{a}_{-k} = -\underline{a}_k$. Также вычислим объем элементарной ячейки и обозначим его V_0 .

После деформации решетка придет в некую актуальную конфигурацию, а векторы \underline{r}_k и \underline{a}_k превратятся в \underline{R}_k и \underline{A}_k . Объем элементарной ячейки станет равен V . Для удобства будем рассматривать только однородную деформацию, чтобы условие $\underline{A}_{-k} = -\underline{A}_k$ оставалось в силе.

Введем $\overset{\circ}{\nabla}$ и ∇ – операторы Гамильтона в отсчетной и актуальной конфигурации (суммирование по правилу Эйнштейна):

$$\overset{\circ}{\nabla} = \underline{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad \nabla = \underline{e}_i \frac{\partial}{\partial X_i}. \quad (3)$$

Векторы \underline{e}_i образуют ортонормированный базис. Если в отсчетной конфигурации некий вектор \underline{r} имел в этом базисе проекции x_i , то, став после деформации вектором \underline{R} , он будет в этом базисе иметь проекции X_i . В данной работе мы будем иметь дело только с ортонормированным базисом \underline{e}_i .

Для получения макроскопических уравнений будем использовать длинноволновое приближение [22]. Это означает, что будут рассматриваться лишь функции, слабо изменяющиеся на расстояниях, сравнимых с длинами основных векторов решетки, то есть будут рассматриваться волны, длины которых много больше межатомных расстояний. Таким образом, тепловое движение не описывается вообще. С другой стороны, целью данной работы является исследование поведения материала при больших деформациях, которые вносят несравнимо больший вклад в вопросы устойчивости, чем тепловые колебания в узлах решетки. Поэтому в рамках данной задачи допустимо ввести длинноволновое приближение. Собственно говоря, проверка устойчивости сводится к решению вопроса о том, выдержит ли предварительно однородно деформированный материал некую малую случайную добавочную деформацию, которую и можно расценивать как результат теплового движения. Более того, при молекулярно динамическом моделировании для

проверки устойчивости частицам, находящимся в интересующей конфигурации, задается малая хаотическая (тепловая) скорость. Если далее наблюдаются ограниченные по амплитуде колебания кинетической энергии, то делается вывод об устойчивости. Если же кинетическая энергия начинает резко возрастать, то это означает, что все большее количество частиц приобретает скорость, сравнимую со скоростью диссоциации. Таким образом, происходит разрушение материала, и можно сделать вывод о неустойчивости.

Найдем связь между векторами \underline{A}_k и \underline{a}_k , используя длинноволновое приближение:

$$\underline{A}_k = \underline{R}(\underline{r} - \underline{a}_k) - \underline{R}(\underline{r}) \approx \underline{a}_k \cdot \overset{\circ}{\nabla} \underline{R}. \quad (4)$$

То есть в первом приближении радиус-векторы частиц, проведенные из отсчетного атома, в отсчетной и актуальной конфигурации связаны между собой тензором $\overset{\circ}{\nabla} \underline{R}$, который называется деформационным градиентом или градиентом места. Аналогично получим выражение для \underline{A}_{-k} :

$$\underline{A}_{-k} = -\underline{A}_k(\underline{r} - \underline{a}_k) = -\underline{A}_k(\underline{r}) + \underline{a}_k \cdot \overset{\circ}{\nabla} \underline{A}_k(\underline{r}) \approx -\underline{A}_k.$$

Таким образом, в первом приближении “парность” радиус-векторов сохраняется.

Для удобства записи введем следующие дополнительные обозначения: $F_k = F(A_k) = -\Pi'(A_k)$ – сила взаимодействия, $C_k = C(A_k) = \Pi''(A_k)$ – жесткость связи.

Вспомогательные величины:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{A}}_k &= \underline{A}_k \underline{A}_k, & {}^4\underline{\underline{A}}_k &= \underline{A}_k \underline{A}_k \underline{A}_k \underline{A}_k, \\ \underline{\underline{a}}_k &= \underline{a}_k \underline{a}_k, & {}^4\underline{\underline{a}}_k &= \underline{a}_k \underline{a}_k \underline{a}_k \underline{a}_k, \\ \mathcal{A}_k &= -\frac{F_k}{A_k}, & \mathcal{B}_k &= \frac{1}{A_k^2}(C_k - \mathcal{A}_k), \\ \underline{\underline{\mathcal{A}}} &= \frac{1}{2} \sum_k \mathcal{A}_k \underline{\underline{A}}_k, & {}^4\underline{\underline{\mathcal{B}}} &= \frac{1}{2} \sum_k \mathcal{B}_k {}^4\underline{\underline{A}}_k. \end{aligned} \quad (5)$$

Отметим, что ${}^4\underline{\underline{\mathcal{B}}}$ является тензором жесткости при линейном деформировании.

2 Алгоритм исследования устойчивости

Введем деформационные характеристики [12]. Мера и тензор деформации Коши-Грина определяются по формулам:

$$\underline{\underline{G}}^M = \underline{\underline{E}} + 2\underline{\underline{G}}, \quad \underline{\underline{G}} = \frac{1}{2} \left(\overset{\circ}{\nabla} \underline{u} + \underline{u} \overset{\circ}{\nabla} + \overset{\circ}{\nabla} \underline{u} \cdot \underline{u} \overset{\circ}{\nabla} \right), \quad (6)$$

где \underline{u} — вектор перемещений, $\overset{\circ}{\nabla}$ — оператор Гамильтона в отсчетной конфигурации. Диагональные компоненты тензора Грина имеют вид:

$$G_{ii} = \frac{1}{2} (\lambda_i^2 - 1), \quad \lambda_i = \frac{dR_i}{dr_i} = 1 + \varepsilon_i, \quad (7)$$

где ε_i — относительное удлинение волокна в направлении i . Видим, что диагональные компоненты тензора Грина отвечают за растяжение и сжатие в ортогональных направлениях. Внедиагональные компоненты определяются как:

$$\sin \theta_{21} = \frac{2G_{21}}{\sqrt{1+2G_{11}}\sqrt{1+2G_{22}}}, \quad (8)$$

где угол θ_{21} описывает отклонение оси 2 от вертикали в сторону уменьшения угла между осями 1 и 2. Остальные внедиагональные компоненты определяются аналогично. Кроме того, в силу (6) тензор $\underline{\underline{G}}$ симметричный.

Из (6) и (7) видим, что при отсутствии сдвигов $G_{ii} = 1/2\varepsilon_i^2 + \varepsilon_i$, так что в случае малых деформаций $G_{ii} = \varepsilon_i$. Соответствующий тензор деформаций будем называть линейным.

Линейный тензор деформаций $\underline{\underline{\varepsilon}}$ — это линейная часть $\underline{\underline{G}}$, то есть $\frac{1}{2} \left(\overset{\circ}{\nabla} \underline{u} + \underline{u} \overset{\circ}{\nabla} \right)$. Может оказаться так, что линейный тензор выглядит сложнее, чем нелинейный. Приведем простой пример, имеющий большое значение в нашей задаче.

Рассмотрим жесткий поворот среды на угол ψ вокруг оси e , задаваемый тензором поворота $\underline{\underline{P}}(\psi e)$. Поскольку деформации как таковой нет, тензор $\underline{\underline{G}}$ должен быть равен нулю. Перемещение определяется как

$$\underline{u} = (\underline{\underline{P}} - \underline{\underline{E}}) \cdot \underline{r},$$

поэтому градиент перемещения равен

$$\overset{\circ}{\nabla} \underline{u} = \underline{\underline{P}}^T - \underline{\underline{E}}.$$

Составим тензор $\underline{\underline{G}}$:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{G}} &= \frac{1}{2} \left(\overset{\circ}{\nabla} \underline{u} + \underline{u} \overset{\circ}{\nabla} + \overset{\circ}{\nabla} \underline{u} \cdot \underline{u} \overset{\circ}{\nabla} \right) = \\ &= \frac{1}{2} \left(\underline{\underline{P}}^T - \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{P}} - \underline{\underline{E}} + (\underline{\underline{P}}^T - \underline{\underline{E}}) \cdot (\underline{\underline{P}} - \underline{\underline{E}}) \right) = 0, \end{aligned}$$

так как $\underline{\underline{P}} \cdot \underline{\underline{P}}^T = \underline{\underline{E}}$. Таким образом, при любом жестком повороте нелинейный тензор деформаций равен нулю.

Составим тензор $\underline{\underline{\varepsilon}}$:

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{2} \left(\overset{\circ}{\nabla} \underline{u} + \underline{u} \overset{\circ}{\nabla} \right) = \frac{1}{2} (\underline{\underline{P}}^T - \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{P}} - \underline{\underline{E}}) = \underline{\underline{P}}^S - \underline{\underline{E}}.$$

Тензор поворота можно представить в виде

$$\begin{aligned} \underline{\underline{P}}(\psi) &= \underline{e}\underline{e} + (\underline{\underline{E}} - \underline{e}\underline{e}) \cos \psi + \underline{e} \times \underline{\underline{E}} \sin \psi \Rightarrow \\ \underline{\underline{\varepsilon}} &= (1 - \cos \psi) (\underline{e}\underline{e} - \underline{\underline{E}}) \neq 0. \end{aligned}$$

Таким образом, линейный тензор деформаций не обращается в ноль при жестком повороте.

Нелинейный тензор деформаций может быть заменен линейным только при условии, что градиент перемещений мал. Нелинейный тензор деформаций зависит не только от компонент линейного тензора, но еще и от линейного вектора поворота $\omega = \frac{1}{2} \overset{\circ}{\nabla} \times \underline{u}$. Это вектор, которым определяется малый поворот сре-ды [13]. Кроме того, если компоненты линейного тензора деформаций меньше, чем компоненты линейного вектора поворота, то из нелинейного тензора $\underline{\underline{G}}$ можно исключить линейную часть $\underline{\underline{\varepsilon}}$. В данной работе будем использовать только нелинейный тензор деформаций $\underline{\underline{G}}$.

Запишем уравнение движения в форме Пиола без учета объемных сил, так как масса частиц слишком мала, чтобы учитывать влияние гравитации:

$$\rho_0 \ddot{\underline{u}} = \overset{\circ}{\nabla} \cdot \underline{\underline{P}}, \quad (9)$$

ρ_0 — плотность материала в отсчетной конфигурации.

Здесь тензор Пиола определяется формулой [10]:

$$\underline{\underline{P}} = \frac{1}{2V_0} \sum_k \mathcal{A}_k \underline{a}_k \underline{A}_k. \quad (10)$$

Вектор перемещений равен:

$$\underline{u} = \underline{R} - \underline{r}. \quad (11)$$

Проведем деформирование кристалла, описываемое градиентом места $\overset{\circ}{\nabla} \underline{R}$. Процесс перехода решетки из отсчетного состояния в актуальное не рассматривается. Парные силовые потенциалы описывают лишь нелинейную упругость, не затрагиваю-щую пластические эффекты, поэтому мы можем себе позволить не интересоваться

историей деформирования. Устойчивость полученной конфигурации будем исследовать путем наложения дополнительной малой деформации. Формально математически это означает варьирование уравнения (9):

$$\rho_0 \delta \ddot{\underline{u}} = \overset{\circ}{\nabla} \cdot \delta \underline{P}. \quad (12)$$

Уравнение движения в форме Пиола содержат характеристики отсчетной конфигурации, которые варьировать не нужно.

Замечание: поскольку отсчетная конфигурация не обязательно ненапряженная, то теперь отсчетной будем называть ту, что определяется векторами \underline{R} , а актуальной — ее же после наложения малой произвольной деформации. Тогда в качестве нового вектора перемещений выступит его вариация $\delta \underline{u}$. Очевидно, что $\ddot{\underline{u}} = \delta \ddot{\underline{u}}$. Введем обозначение:

$$\underline{v} = \delta \underline{u}.$$

Далее вычислим вариацию тензора Пиола и выразим ее через \underline{v} . Из (10) получим:

$$\delta \underline{P} = \frac{1}{2V_0} \sum_k [\delta \mathcal{A}_k \underline{a}_k \underline{A}_k + \mathcal{A}_k \underline{a}_k \delta \underline{A}_k]. \quad (13)$$

Ясно, что

$$\delta \mathcal{A}_k = \mathcal{B}_k A_k \delta A_k.$$

Тогда вариация тензора Пиола (13) примет вид:

$$\delta \underline{\underline{P}} = \frac{1}{2V_0} \sum_k [\underline{a}_k \underline{A}_k \mathcal{B}_k A_k \delta A_k + \mathcal{A}_k \underline{a}_k \delta \underline{A}_k]. \quad (14)$$

Найдем вариацию вектора \underline{A}_k . Известно, что существует связь между операторами $\overset{\circ}{\nabla}$ и ∇ через деформационный градиент:

$$\overset{\circ}{\nabla} = (\overset{\circ}{\nabla} \underline{R}) \cdot \nabla. \quad (15)$$

Тогда получим следующее выражение для $\delta \underline{A}_k$ при учете (4) и (11):

$$\delta \underline{A}_k = \underline{a}_k \cdot (\overset{\circ}{\nabla} \delta \underline{R}) = \underline{a}_k \cdot (\overset{\circ}{\nabla} \delta \underline{u}) = \underline{a}_k \cdot (\overset{\circ}{\nabla} \underline{R}) \cdot (\nabla \underline{v}). \quad (16)$$

Модуль вектора определяется как $|\underline{a}| = \sqrt{\underline{a} \cdot \underline{a}}$, поэтому с учетом (6):

$$A_k = \sqrt{\underline{A}_k \cdot \underline{A}_k} = \sqrt{\underline{a}_k \cdot \underline{\underline{G}} \cdot \underline{a}_k} = \sqrt{\underline{a}_k \cdot \cdot \underline{\underline{G}}}. \quad (17)$$

Вычислим вариацию тензора деформаций Коши-Грина:

$$\delta \underline{\underline{G}} = (\overset{\circ}{\nabla} \underline{v}) \cdot (\underline{R} \overset{\circ}{\nabla}) + (\overset{\circ}{\nabla} \underline{R}) \cdot (\underline{v} \overset{\circ}{\nabla}) = 2 \left[(\overset{\circ}{\nabla} \underline{v}) \cdot (\underline{R} \overset{\circ}{\nabla}) \right]^S. \quad (18)$$

Теперь найдем вариацию (17) с помощью (18)

$$\begin{aligned}\delta A_k &= \frac{\underline{\underline{a}}_k \cdot \delta \underline{\underline{G}}}{2\sqrt{\underline{\underline{a}}_k \cdot \underline{\underline{G}}}} = \frac{1}{A_k} \underline{\underline{a}}_k \cdot \left[\left(\overset{\circ}{\nabla} \underline{\underline{v}} \right) \cdot \left(\underline{\underline{R}} \overset{\circ}{\nabla} \right) \right]^S = \\ &= \frac{1}{A_k} \underline{\underline{a}}_k \cdot \left[\left(\overset{\circ}{\nabla} \underline{\underline{R}} \right) \cdot (\nabla \underline{\underline{v}}) \cdot \left(\underline{\underline{R}} \overset{\circ}{\nabla} \right) \right] = \frac{1}{A_k} \underline{\underline{a}}_k \cdot (\nabla \underline{\underline{v}}).\end{aligned}\quad (19)$$

Таким образом, найдено выражение для вариации тензора Пиола через $\underline{\underline{v}}$:

$$\delta \underline{\underline{P}} = \frac{1}{2V_0} \sum_k \left[\mathcal{B}_k \underline{\underline{a}}_k \underline{\underline{A}}_k \cdot \cdot \cdot (\nabla \underline{\underline{v}}) + \mathcal{A}_k \underline{\underline{a}}_k \underline{\underline{A}}_k \cdot \cdot \cdot (\nabla \underline{\underline{v}}) \right]. \quad (20)$$

Подставим (20) в (12):

$$\begin{aligned}\rho_0 \ddot{\underline{\underline{v}}} &= \overset{\circ}{\nabla} \cdot \delta \underline{\underline{P}} = \nabla \cdot \left(\underline{\underline{R}} \overset{\circ}{\nabla} \right) \cdot \frac{1}{2V_0} \left[\sum_k \mathcal{A}_k \underline{\underline{a}}_k \underline{\underline{A}}_k \cdot \cdot \cdot (\nabla \underline{\underline{v}}) + \sum_k \mathcal{B}_k \underline{\underline{a}}_k \underline{\underline{A}}_k \cdot \cdot \cdot (\nabla \underline{\underline{v}}) \right] = \\ &= \nabla \cdot \frac{1}{V_0} \left[\underline{\underline{\mathcal{A}}} \cdot \cdot \cdot (\nabla \underline{\underline{v}}) + {}^4\underline{\underline{\mathcal{B}}} \cdot \cdot \cdot (\nabla \underline{\underline{v}}) \right] = \frac{1}{V_0} \left[\underline{\underline{\mathcal{A}}} \cdot \cdot \cdot (\nabla \nabla \underline{\underline{v}}) + {}^4\underline{\underline{\mathcal{B}}} \cdot \cdot \cdot (\nabla \nabla \underline{\underline{v}}) \right] = \frac{1}{V_0} {}^4\underline{\underline{C}} \cdot \cdot \cdot \nabla \nabla \underline{\underline{v}}.\end{aligned}\quad (21)$$

Предпоследний переход верен только в случае однородной деформации.

Итак, получили следующее уравнение движения

$$\begin{aligned}m \ddot{\underline{\underline{v}}} &= {}^4\underline{\underline{C}} \cdot \cdot \cdot \nabla \nabla \underline{\underline{v}}, \\ {}^4\underline{\underline{C}} &= \underline{\underline{\mathcal{E}}} \underline{\underline{\mathcal{A}}} + {}^4\underline{\underline{\mathcal{B}}}.\end{aligned}\quad (22)$$

Здесь $m = \rho_0 V_0$. В работе [17] этот тензор с точностью до параметра m называется акустическим. Мы будем называть его тензором жесткости. Кроме того, он похож на тензор, используемый в работе [32].

Теперь запишем решение этого уравнения в виде волны с частотой ω и волновым вектором $\underline{\underline{K}}$:

$$\underline{\underline{v}} = \underline{\underline{v}}_0 e^{i\omega t} e^{i\underline{\underline{K}} \cdot \underline{\underline{R}}}. \quad (23)$$

Введем дополнительные вспомогательные величины:

$$\underline{\underline{K}} = \underline{\underline{K}} \underline{\underline{K}}, \quad \Omega = m\omega^2, \quad \underline{\underline{D}} = {}^4\underline{\underline{C}} \cdot \cdot \cdot \underline{\underline{K}}.$$

Подстановка (23) в уравнение движения (22) дает систему уравнений, имеющих решение при

$$\det [\underline{\underline{D}} - \Omega \underline{\underline{E}}] = 0. \quad (24)$$

Условие устойчивости формулируется следующим образом: для любого вещественного вектора $\underline{\underline{K}}$ частота ω должна быть вещественной, то есть

$$\Omega > 0. \quad (25)$$

Это означает, что вектор малых перемещений $\underline{\underline{v}}$ останется малой величиной.

3 Устойчивость треугольной решетки при растяжении и сжатии в ортогональных направлениях

3.1 Геометрия

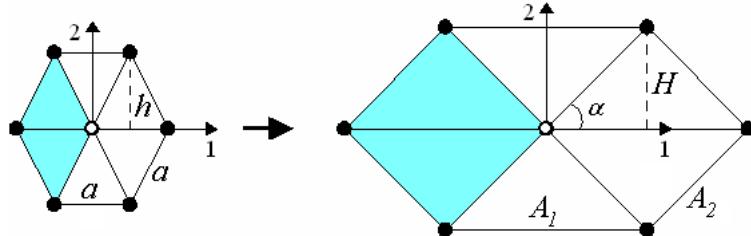


Рис. 2: Отсчетная и актуальная конфигурация

На рис. 2 изображена характерная часть треугольной решетки до и после деформации. Выделены оси, вдоль которых осуществляется жесткое нагружение. Отмечены основные размеры. До деформации угол $\alpha = 60^\circ$.

Введем ортонормированный базис так, чтобы вектор e_1 был сонаправлен с осью 1, а e_2 — с осью 2. Тогда векторы $\underline{n}_k = \underline{A}_k / A_k$ могут быть представлены в виде:

$$\begin{aligned} \underline{n}_1 &= e_1, & \underline{n}_2 &= e_1 \cos \alpha + e_2 \sin \alpha, & \underline{n}_3 &= -e_1 \cos \alpha + e_2 \sin \alpha, \\ \underline{n}_4 &= e_2, & \underline{n}_5 &= e_1 \cos \beta + e_2 \sin \beta, & \underline{n}_6 &= -e_1 \cos \beta + e_2 \sin \beta, \\ \underline{n}_{-k} &= -\underline{n}_k. \end{aligned} \quad (26)$$

Здесь выписаны единичные радиус-векторы для двух координационных сфер. Считается, что для обеспечения устойчивости равновесия плотноупакованной решетки достаточно рассмотреть одну координационную сферу ($k = 1 - 3$). В нашем случае речь идет о больших деформациях, поэтому одной координационной сферы не хватает для описания, например, перехода от вертикальной ориентации решетки к горизонтальной (рис. 3), который по своей сути является поворотом решетки на 90° . На рис. 3 голубым цветом выделена элементарная ячейка, красными кругами отмечена первая координационная сфера, а синими квадратами — вторая. Видно, что в число ближайших соседей отсчетного атома в переориентированной решетке попадают атомы со второй координационной сферы. Если исключить “синге квадраты”, то вместо второго положения равновесия получим явно неустойчивую конфигурацию. Дополнительное исследование показало, что учет дальнейших соседей не влияет на область устойчивости.

Соответствующие длины связей (на рис. 2 показана первая координационная

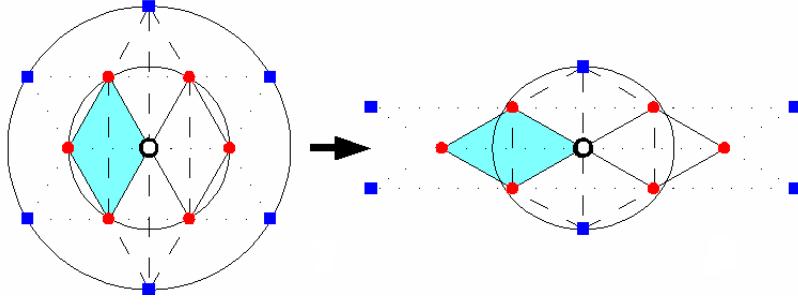


Рис. 3: Переход от вертикальной к горизонтальной ориентации треугольной решетки

сфера) зависят от деформаций следующим образом:

$$\begin{aligned} A_1 &= a(1 + \varepsilon_1), \quad H = h(1 + \varepsilon_2), \quad A_2 = A_3 = \sqrt{\frac{A_1^2}{4} + H^2}, \\ A_4 &= 2H, \quad A_5 = A_6 = \sqrt{\frac{9A_1^2}{4} + H^2}, \quad A_{-k} = -A_k, \\ \sin \alpha &= \frac{H}{A_2}, \quad \sin \beta = \frac{H}{A_5}. \end{aligned} \quad (27)$$

Здесь ε_1 и ε_2 — линейные части тензора деформаций Коши-Грина (6). Поскольку не рассматриваются сдвиговые деформации, тензор (6) диагональный.

Вычислим компоненты тензора жесткости ${}^4\underline{\underline{C}}$, подставив (26) и (27) в (22) и (5):

$$\begin{aligned} C_{11} &= 2A_5^2(\mathcal{A}_5 + (C_5 - \mathcal{A}_5)\cos^2\beta)\cos^2\beta + 2A_2^2(\mathcal{A}_2 + (C_2 - \mathcal{A}_2)\cos^2\alpha)\cos^2\alpha + A_1^2C_1, \\ C_{12} &= 2A_5^2(\mathcal{A}_5 + (C_5 - \mathcal{A}_5)\cos^2\beta)\sin^2\beta + A_3^2\mathcal{A}_4 + 2A_2^2(\mathcal{A}_2 + (C_2 - \mathcal{A}_2)\cos^2\alpha)\sin^2\alpha, \\ C_{21} &= 2A_5^2(\mathcal{A}_5 + (C_5 - \mathcal{A}_5)\sin^2\beta)\cos^2\beta + 2A_2^2(\mathcal{A}_2 + (C_2 - \mathcal{A}_2)\sin^2\alpha)\cos^2\alpha + A_1^2\mathcal{A}_1, \\ C_{22} &= 2A_5^2(\mathcal{A}_5 + (C_5 - \mathcal{A}_5)\sin^2\beta)\sin^2\beta + A_3^2C_3 + 2A_2^2(\mathcal{A}_2 + (C_2 - \mathcal{A}_2)\sin^2\alpha)\sin^2\alpha, \\ C_{44} &= 2A_5^2(C_5 - \mathcal{A}_5)\cos^2\beta\sin^2\beta + 2A_2^2(C_2 - \mathcal{A}_2)\cos^2\alpha\sin^2\alpha. \end{aligned} \quad (28)$$

Здесь совершен переход от четырех-индексной формы записи к двух-индексной по правилу: $11 = 1$, $22 = 2$, $12 = 21 = 4$ с учетом симметрии тензора жесткости.

3.2 Условия устойчивости

В двумерном случае уравнение (24) является квадратным $\Omega^2 - \Omega \operatorname{tr} \underline{\underline{D}} + \det \underline{\underline{D}} = 0$, поэтому условие устойчивости имеет вид:

$$\begin{cases} \operatorname{tr} \underline{\underline{D}} > 0, \\ \det \underline{\underline{D}} > 0. \end{cases} \quad (29)$$

Еще одно неравенство $2 \operatorname{tr} \underline{\underline{D}}^2 - \operatorname{tr}^2 \underline{\underline{D}} \geq 0$ в двумерном случае удовлетворяется автоматически.

Неравенства (29) должны выполняться при любом $\underline{\underline{K}}$.

Обозначим $\underline{\underline{T}} = \underline{\underline{E}} \cdot {}^4\underline{\underline{C}}$. Неравенство (29₁) является квадратичной формой $T_{11}K_1^2 + (T_{12} + T_{21})K_1K_2 + T_{22}K_2^2 > 0$ относительно компонент волнового вектора, поэтому оно выполняется при:

$$T_{11} > 0, \quad T_{11}T_{22} - T_{12}T_{21} > 0, \quad \underline{\underline{T}} = \underline{\underline{E}} \cdot {}^4\underline{\underline{C}}. \quad (30)$$

Здесь

$$T_{11} = C_{11} + C_{21}, \quad T_{12} = T_{21} = 0, \quad T_{22} = C_{12} + C_{22}.$$

Левая часть неравенства (29₂) превращается в квадратичную форму относительно квадратов компонент волнового вектора $\underline{\underline{K}}$:

$$AK_1^4 + 2BK_1^2K_2^2 + CK_2^4 > 0 \Leftrightarrow A > 0, \quad C > 0, \quad B > -\sqrt{AC}, \quad (31)$$

где

$$A = C_{11}C_{21}, \quad C = C_{12}C_{22}, \quad 2B = C_{11}C_{22} + C_{12}C_{21} - 4C_{44}^2. \quad (32)$$

Поясним, почему одним из условий положительной определенности (29₂) является $B > -\sqrt{AC}$. Рассмотрим функцию:

$$f(x) = Ax^2 + 2Bx + C, \quad x = \frac{K_1^2}{K_2^2} > 0.$$

Для обеспечения положительности $f(x)$ при положительных x требуется, чтобы, во-первых, $A > 0$, во-вторых, эта функция не имела вещественных положительных корней, в-третьих, пересекала ось ординат в положительной части. Это аналогично требованию, чтобы либо $x_* < 0$ (координата точки минимума) и $f(0) > 0$, либо $x_* > 0$, $f(0) > 0$ и $f(x_*) > 0$. Очевидно, что $f(0) > 0 \Leftrightarrow C > 0$. Поскольку $x_* = -B/A$, то либо $B > 0$, либо $B < 0$ и $-B^2/A + C > 0$, откуда следуют условия (31₂).

Теперь построим область устойчивости, подставив (28) и (1) в (30) и (31). В данной работе расчет проводится с использованием потенциала Морзе при $\theta = 6$.

Области, изображенные на рис. 4, не симметричные, потому что они построены в линейных частях тензора деформации относительно левого положения равновесия. Их можно перестроить относительно квадратной конфигурации со стороной a по формулам

$$\varepsilon_1^{sq} = \frac{1 + \varepsilon_1^{tr}}{\sqrt{2}} - 1, \quad \varepsilon_2^{sq} = \frac{\sqrt{3}(1 + \varepsilon_2^{tr})}{\sqrt{2}} - 1.$$

В новых осях области устойчивости будут расположены симметрично относительно диагонали (рис. 5).

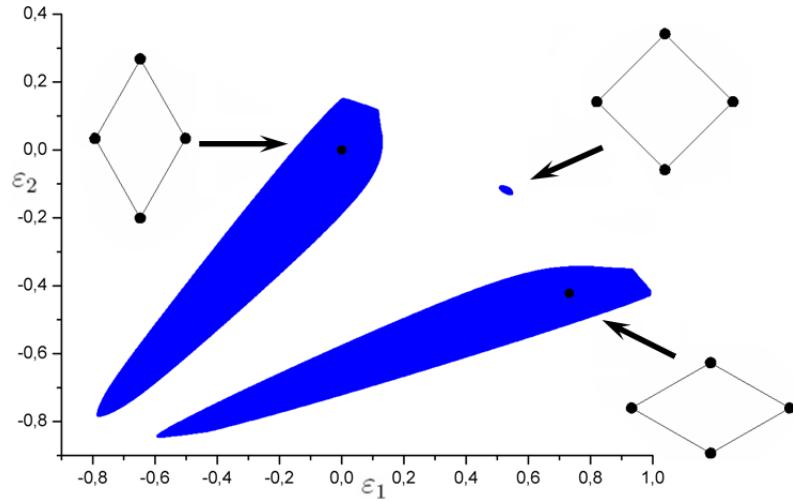


Рис. 4: Области устойчивости при растяжении и сжатии

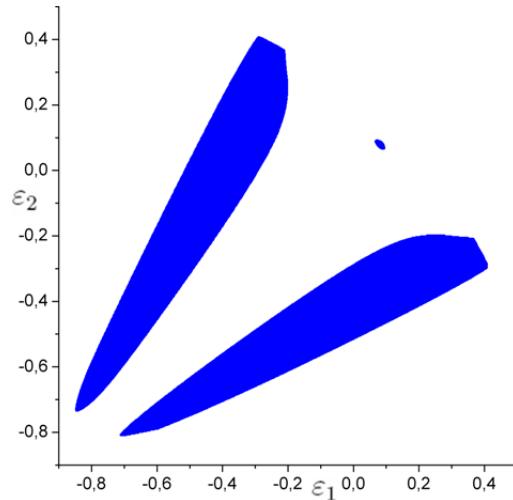


Рис. 5: Области устойчивости (начало координат соответствует квадратной конфигурации)

Теперь перестроим рис. 4 в осях нелинейных деформаций $G_{11} = 0.5\epsilon_1^2 + \epsilon_1$, $G_{22} = 0.5\epsilon_2^2 + \epsilon_2$. В работе [17] предлагается строить области устойчивости именно в этих осях. С другой стороны, в нашей работе рассматривается жесткое нагружение, поэтому имеет смысл получать области устойчивости в осях реально задаваемых удлинений.

На этих рисунках видно, что есть две области устойчивости. В работе [16] были рассмотрены только ближайшие соседи отсчетного атома, поэтому автор не получил правую область устойчивости, соответствующую горизонтальной ориентации треугольной решетки (рис. 3). Кроме того, видна еще одна небольшая область вблизи ромбической решетки со стороной $A_2 \approx 1.08a$ и углом 45° . Вычислим предельную деформацию, которую может выдержать связь, описываемая потенциа-

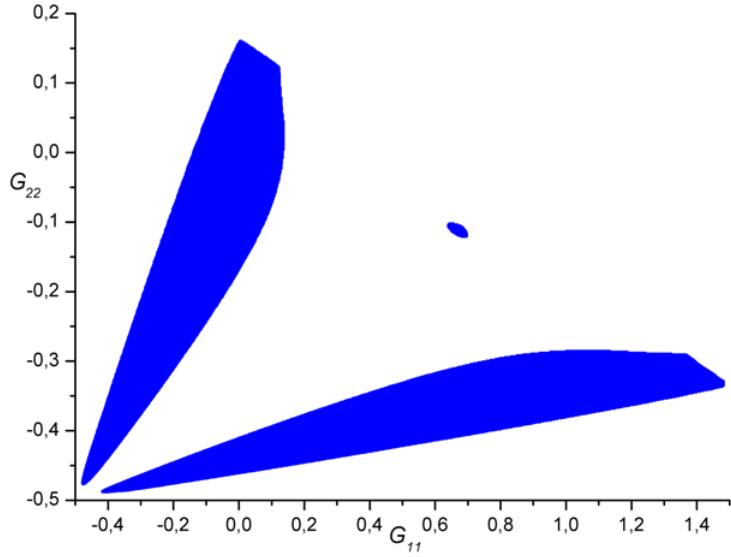


Рис. 6: Области устойчивости при растяжении и сжатии в осях G_{11}, G_{22}

лом Морзе (1) при $\theta = 6$. Для этого нужно приравнять нулю вторую производную от потенциала. Получим, что

$$\varepsilon_* = \frac{\ln 2}{6} \approx 0.1155.$$

Видим, что жесткость боковых сторон ромба положительна. Воспользуемся критерием устойчивости [22]:

$$C_{11} > 0, \quad C_{11}C_{22} - C_{12}C_{21} > 0, \quad C_{44} > 0. \quad (33)$$

Условия положительной определенности должны накладываться на истинный тензор жесткости, то есть на ${}^4\underline{\underline{\mathcal{B}}}$. В данной задаче, если рассматривать взаимодействие только ближайших соседей, ${}^4\underline{\underline{\mathcal{B}}} = {}^4\underline{\underline{\mathcal{C}}}$. В этом случае получим, что определитель тензоров равен нулю, то есть имеем безразличное равновесие. При учете второй координационной сферы оба тензора определены отрицательно. Казалось бы, это означает, что промежуточная квадратная конфигурация неустойчива и таким образом, под сомнение ставится весь критерий устойчивости.

В работе [29] было доказано, что структуру из трех частиц, взаимодействующих посредством потенциала Леннарда-Джонса и расположенных в вершинах равностороннего треугольника, можно равномерно сжать в одну точку без потери устойчивости. В нашем случае потеря устойчивости при гидростатическом сжатии происходит примерно на уровне 80%, что также вызывает вопросы. На рис. 7 показано, как зависят очертания областей устойчивости от ширины потенциальной ямы θ . Видим, что при уменьшении θ промежуточная область исчезает, а крайние области сближаются. С увеличением θ увеличивается промежуточная область,

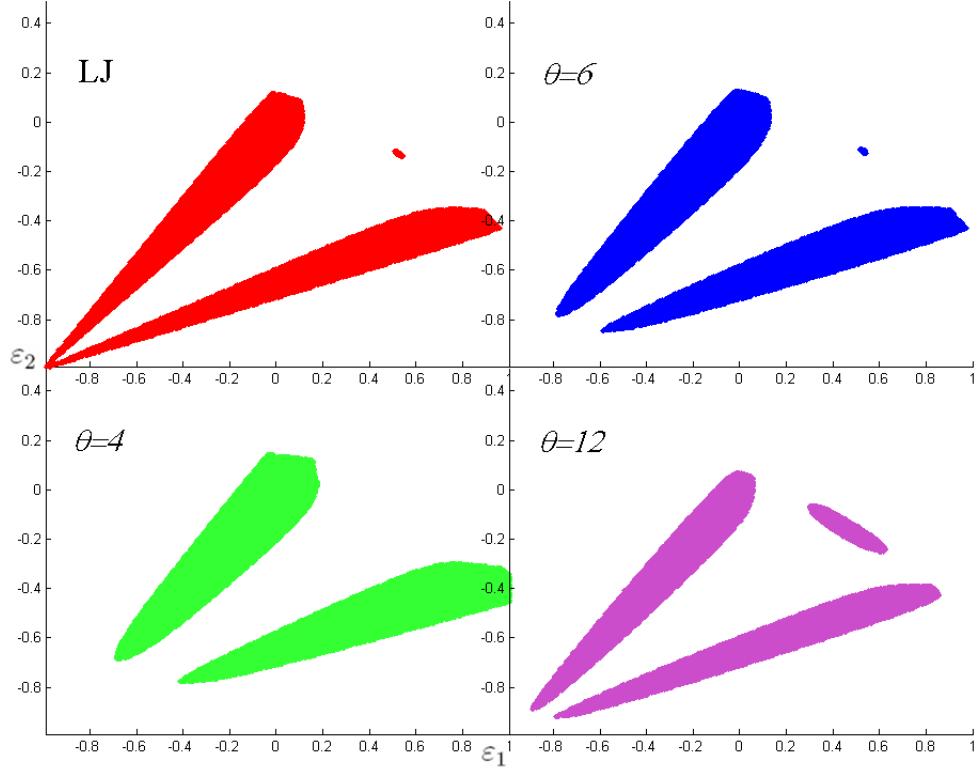


Рис. 7: Области устойчивости в зависимости от ширины потенциальной ямы

максимальное сжатие также растет, краине сужаются к линиям гидростатического нагружения. Также были построены области устойчивости с использованием потенциала Леннарда-Джонса. Их очертания похожи на рис. 4, присутствует промежуточная область, но при этом наблюдается устойчивость при сжатии материала в точку, что согласуется с [29].

3.3 О границах областей устойчивости

Выясним, чему соответствуют границы полученных областей устойчивости треугольной решетки при растяжении и сжатии в ортогональных направлениях. Очевидно, что применять критерий Борна [22] недопустимо, так как рассматриваются большие деформации. Тем не менее, было проверено, что в области малых деформаций эти критерии совпадают и показывают устойчивость.

Условия (30) и (31) означают, что:

$$C_{11} > 0, \quad C_{22} > 0, \quad C_{12} > 0, \quad C_{21} > 0, \quad (34)$$

$$2C_{44}^2 < \frac{1}{2}(C_{11}C_{22} + C_{12}C_{21}) + \sqrt{C_{11}C_{22}C_{12}C_{21}}. \quad (35)$$

Еще в начале XX века Адамар показал, что в случае устойчивости все скорости

распространения волн вещественны, то есть должно выполняться условие (34). Будем называть это волновым критерием устойчивости.

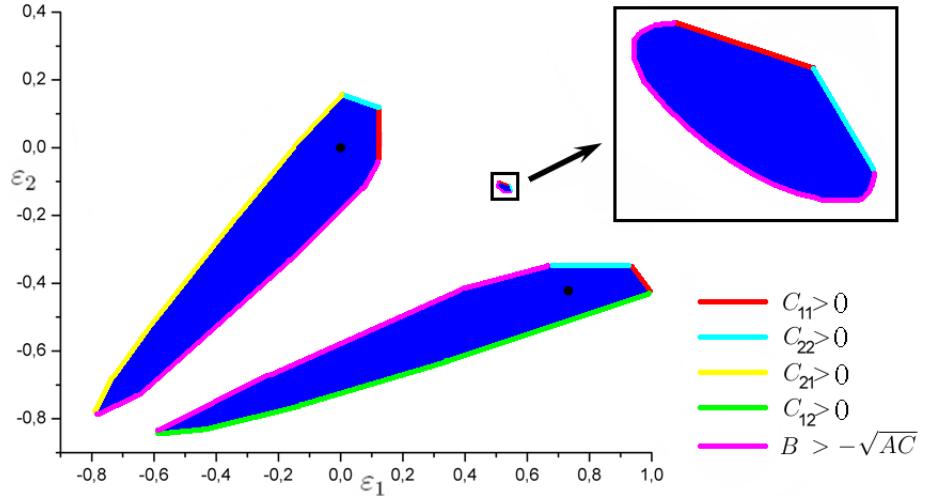


Рис. 8: Границы областей устойчивости при растяжении и сжатии

На рис. 8 дана интерпретация границ областей устойчивости. На красных, голубых, желтой и зеленой линиях соответствующие компоненты тензор жесткости обращаются в ноль, в синих областях они положительны. Фиолетовые линии, проходящие на оставшихся границах, отвечают условию (35). Если руководствоваться только условиями (34), то исчезнут внутренние границы между тремя областями (рис. 9).

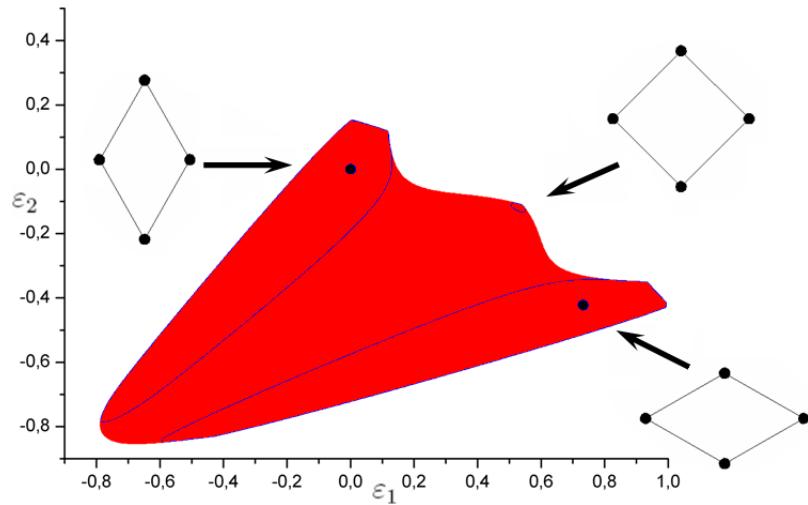


Рис. 9: Волновой критерий устойчивости

Чтобы понять, существуют ли внутренние границы между двумя областями устойчивости, рассмотрим одноосные нагружения вдоль осей 1 и 2 ($\sigma_2 = 0$ и $\sigma_1 = 0$ соответственно):

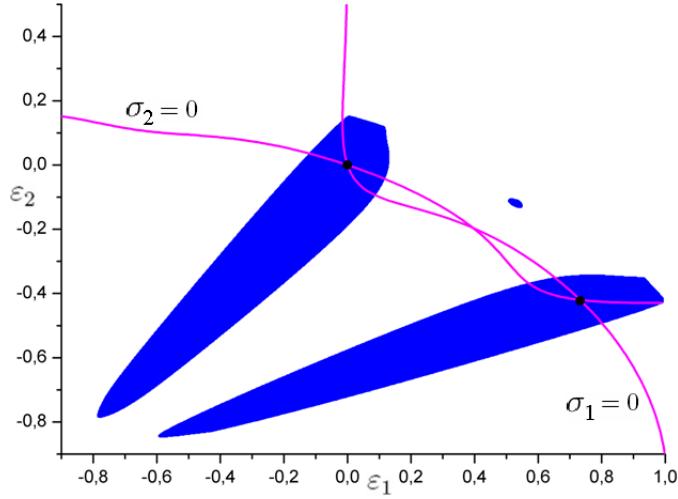


Рис. 10: Путь нагружения

Согласно [10] тензор напряжений Коши в простой решетке имеет вид

$$\underline{\sigma} \equiv \frac{1}{2V} \sum_k A_k F_k, \quad (36)$$

где $V = \sqrt{3}/2(1 + \varepsilon_1)(1 + \varepsilon_2)$ — текущий объем элементарной ячейки; силы коллинеарны соответствующим радиус-векторам, потому что взаимодействие парное и центральное. Элементарная ячейка треугольной решетки выделена голубым цветом на рис. 2. С учетом двух координационных сфер получим:

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= -\frac{A_5 F_5 \cos^2 \beta + A_2 F_2 \cos^2 \alpha + 0.5 A_1 F_1}{V}, \\ \sigma_2 &= -\frac{A_5 F_5 \sin^2 \beta + 0.5 A_4 F_4 + A_2 F_2 \sin^2 \alpha}{V}, \\ \sigma_{12} &= \sigma_{21} = 0. \end{aligned} \quad (37)$$

Подставим (1), (27) в (37) и потребуем, к примеру, чтобы $\sigma_2 = 0$. Графики зависимости σ_1 от ε_1 и G_{11} , наложенные на области устойчивости, приведены на рис. 11 и 12.

Видим, что как только кривая становится ниспадающей, происходит потеря устойчивости, и наоборот. Были изучены несколько видов одноосных нагружений, и во всех случаях наблюдается тот же эффект. Таким образом можно сделать вывод, что волновой критерий слишком слабый. Также были вычислены коэффициенты Пуассона, определяемые как $\nu_1 = -\left. \frac{G_{22}}{G_{11}} \right|_{\sigma_2=0}$, $\nu_2 = -\left. \frac{G_{11}}{G_{22}} \right|_{\sigma_1=0}$. В районе нуля они равны примерно 1.33, что согласуется со значениями для треугольной решетки, полученными в [10].

Обратимся к условию (35). В линейной теории C_{44} является модулем сдвига материала. Очевидно, что он должен быть положительным. Условие (35) огра-

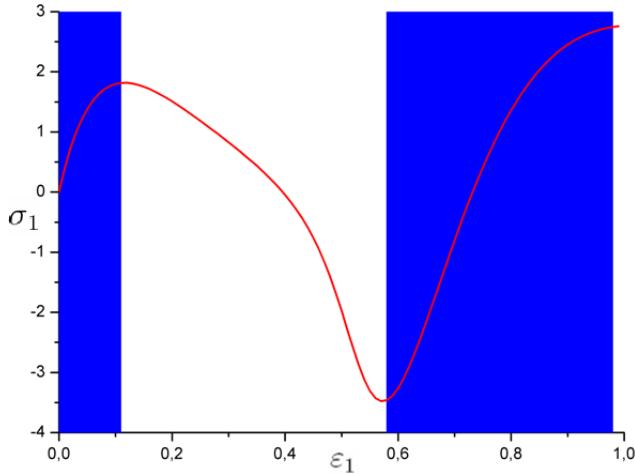


Рис. 11: Одноосное нагружение (зависимость от линейной части деформации)

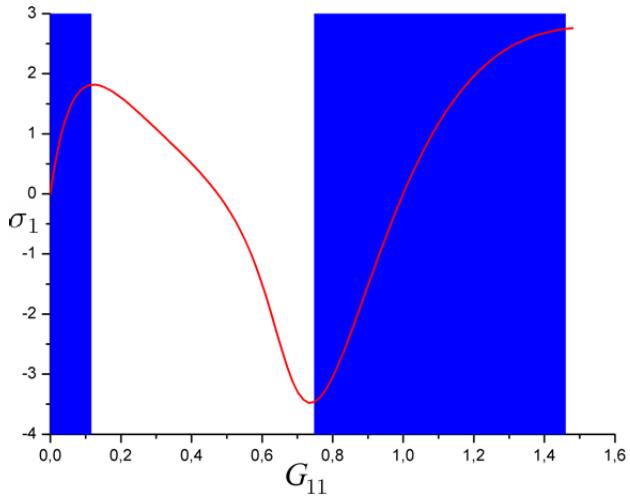


Рис. 12: Одноосное нагружение

ничивает лишь модуль C_{44} , то есть позволяет ему быть немного отрицательным. На рис. 13 показано, что C_{44} действительно оказывается отрицательным, правда в достаточно узкой пограничной области.

Возникает вопрос: нужно ли требовать положительность C_{44} ? Ведь совершенно неясно, действительно ли эта компонента нашего тензора жесткости является модулем сдвига материала.

Решим следующую задачу. Пусть материал находится в актуальной конфигурации. Наложим на него малый сдвиг. Очевидно, что как в тензоре напряжений Коши (36), так и в нелинейном тензоре деформаций (6), появятся диагональные компоненты. По определению из [13], в линейной теории отношение этих компонент и есть модуль сдвига G . Поскольку треугольная решетка анизотропна, то нужно рассмотреть два случая. Во-первых, на актуальную конфигурацию мож-

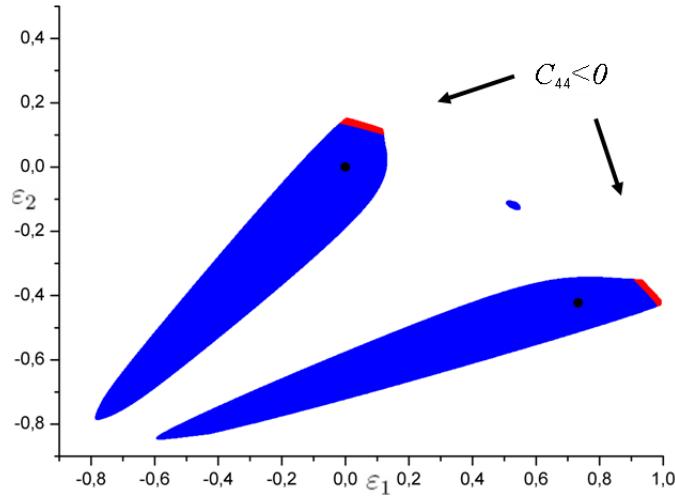


Рис. 13: Области устойчивости и знак C_{44}

но наложить сдвиг на малый угол θ_{21} , который описывает отклонение оси 2 от вертикали в сторону уменьшения угла между осями 1 и 2. Соответствующий модуль сдвига будем называть G_1 . Во-вторых, необходимо наложить сдвиг на малый угол θ_{12} , который описывает отклонение оси 1 от горизонтали в сторону уменьшения угла между осями 1 и 2 (получим модуль сдвига G_2). На самом деле задача симметрична. Можно в качестве отсчетной конфигурации выбрать вертикальную ориентацию треугольной решетки и рассмотреть сдвиг на угол θ_{21} . А можно выбрать горизонтальную ориентацию и рассмотреть уже сдвиг на угол θ_{12} , ведь в этом случае происходит поворот системы координат на 90° .

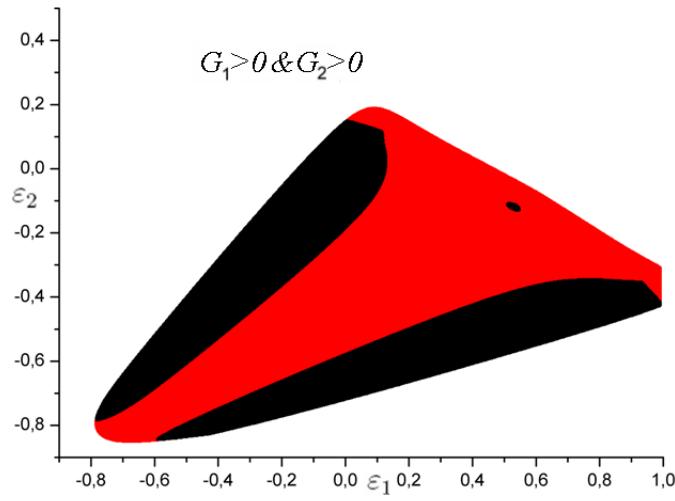


Рис. 14: Модули сдвига G_1 и G_2 положительные

На рис. 14 показано, в какой зоне модули сдвига G_1 и G_2 будут положительным. Красным цветом выделена зона положительности этих модулей, черным — обла-

сти устойчивости. С точки зрения границ областей устойчивости это требование эквивалентно положительности C_{12} и C_{21} соответственно. Отметим один важный факт. Согласно [28], потеря устойчивости ГЦК решетки при гидростатическом сжатии связана с обращением в ноль модуля сдвига. У нас модуль сдвига G_1 меняет знак примерно в точке $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = -0.7831$, а потеря устойчивости происходит при $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = -0.7835$. Видим, что и в треугольной решетке потеря устойчивости при гидростатическом сжатии связана со знаком модуля сдвига.

В линейной теории упругости важную роль играет модуль Юнга, который также должен быть положительным. В актуальной конфигурации треугольная решетка анизотропна, поэтому будем иметь два модуля Юнга. Будем считать, что диагональные компоненты тензоров напряжений и деформаций связаны следующим соотношением:

$$\begin{aligned}\sigma_1 &= \tilde{C}_{11}\varepsilon_1 + \tilde{C}_{12}\varepsilon_2, \\ \sigma_2 &= \tilde{C}_{21}\varepsilon_1 + \tilde{C}_{22}\varepsilon_2.\end{aligned}\tag{38}$$

Подчеркнем, что коэффициенты \tilde{C}_{ij} в принципе не равны соответствующим компонентам тензора жесткости. Наложим сначала дополнительную малую деформацию $\delta\varepsilon_1$. Тогда по изменению компонент тензора напряжений найдем коэффициенты \tilde{C}_{11} и \tilde{C}_{21}

$$\tilde{C}_{11} = \frac{\delta\sigma_1}{\delta\varepsilon_1}, \quad \tilde{C}_{21} = \frac{\delta\sigma_2}{\delta\varepsilon_1}.\tag{39}$$

Аналогично получим:

$$\tilde{C}_{12} = \frac{\delta\sigma_1}{\delta\varepsilon_2}, \quad \tilde{C}_{22} = \frac{\delta\sigma_2}{\delta\varepsilon_2}.\tag{40}$$

Во-первых, можно потребовать, чтобы \tilde{C}_{11} и \tilde{C}_{22} были положительными. Получим рис. 15. Красным цветом выделена зона положительности этих коэффициентов, черным — области устойчивости. Оказывается, что это равносильно положительности C_{11} и C_{22} из тензора жесткости.

Теперь перепишем уравнения (38) относительно деформаций:

$$\begin{aligned}\varepsilon_1 &= \frac{\tilde{C}_{22}}{\tilde{C}_{11}\tilde{C}_{22} - \tilde{C}_{12}\tilde{C}_{21}}\sigma_1 - \frac{\tilde{C}_{12}}{\tilde{C}_{11}\tilde{C}_{22} - \tilde{C}_{12}\tilde{C}_{21}}\sigma_2, \\ \varepsilon_2 &= \frac{\tilde{C}_{11}}{\tilde{C}_{11}\tilde{C}_{22} - \tilde{C}_{12}\tilde{C}_{21}}\sigma_2 - \frac{\tilde{C}_{21}}{\tilde{C}_{11}\tilde{C}_{22} - \tilde{C}_{12}\tilde{C}_{21}}\sigma_1.\end{aligned}\tag{41}$$

По определению [13] модулями Юнга при растяжении вдоль осей 1 и 2 будут соответственно:

$$\begin{aligned}E_1 &= \frac{\tilde{C}_{11}\tilde{C}_{22} - \tilde{C}_{12}\tilde{C}_{21}}{\tilde{C}_{22}}, \\ E_2 &= \frac{\tilde{C}_{11}\tilde{C}_{22} - \tilde{C}_{12}\tilde{C}_{21}}{\tilde{C}_{11}}.\end{aligned}\tag{42}$$

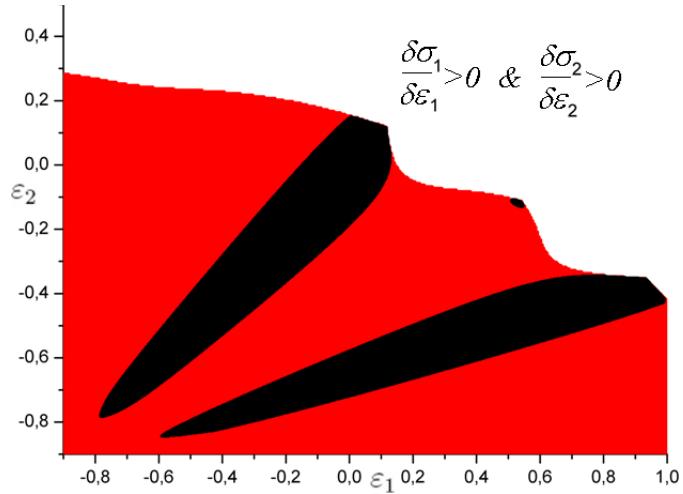


Рис. 15: Коэффициенты \tilde{C}_{11} и \tilde{C}_{22} положительные

На рис. 16 показано, к чему приводит требование положительности модулей Юнга. Красным цветом выделена зона положительности этих модулей, черным — области устойчивости. С точки зрения границ областей устойчивости, это в точности соответствует условию (35). Может показаться, что промежуточная область устойчивости находится в зоне отрицательности модулей Юнга, но это не так.

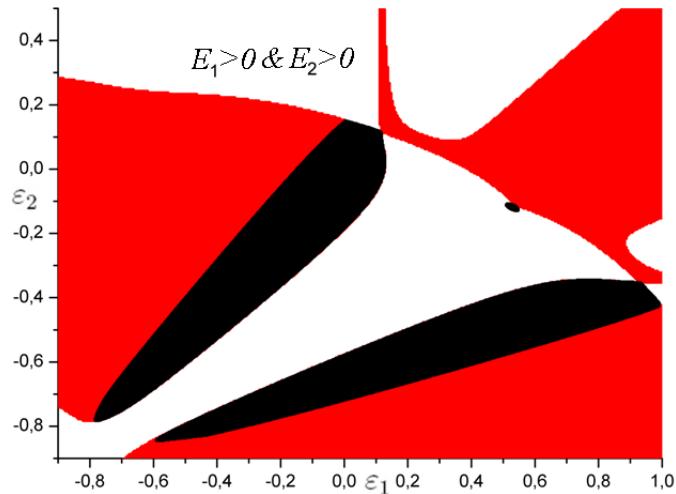


Рис. 16: Модули Юнга E_1 и E_2 положительные

Таким образом, удается объяснить смысл границ областей устойчивости, причем не только в терминах компонент тензора жесткости, входящего в критерий, но и с помощью фундаментальных понятий из линейной теории упругости. При этом однозначно решается вопрос как с потерей устойчивости при гидростатическом сжатии, так и с промежуточной областью устойчивости.

3.4 Молекулярно-динамическое моделирование

Для проверки полученных результатов воспользуемся методом динамики частиц. Материал представляется в виде совокупности частиц, взаимодействующих друг с другом посредством потенциала обеспечивающим отталкивание частиц приближении и притяжение при удалении друг от друга. Для описания механических свойств плотноупакованных структур, к которым относится и треугольная решетка, используются парные силовые потенциалы, к примеру, Морзе или Леннарда-Джонса, зависящие только от расстояния между атомами. В случае неплотноупакованных структур, например, при описании графена, этот подход не позволяет получить устойчивую модель. Поэтому рассматривается либо многочастичное [21], либо моментное [8] взаимодействие, что приемлемо для теоретических работ, но значительно усложняет процедуру численного моделирования.

Сначала задается геометрия структуры, то есть координаты каждой точки, входящей в модель. Потом выбирается закон взаимодействия, в общем случае и с внешними полями. В данной работе требовалось задать лишь потенциал (1). Нужно еще задать начальное распределение скоростей, так как далее будет решаться задача Коши для радиус-векторов, определяющих положение частиц.

Уравнения движения записываются в виде:

$$m\ddot{\underline{r}}_k = \sum_{n=1}^N f(|\underline{r}_k - \underline{r}_n|) \frac{\underline{r}_k - \underline{r}_n}{|\underline{r}_k - \underline{r}_n|}, \quad (43)$$

где m — масса частицы, \underline{r}_k — радиус-вектор k -ой частицы, N — число частиц, $f(r) = -\Pi'(r)$ — сила взаимодействия.

Таким образом, требуется, задавшись видом потенциала, решить задачу Коши для уравнений (43) с учетом начального распределения частиц и их скоростей. Основной проблемой оказывается большое количество уравнений и нелинейность правых частей. Одним из наиболее распространенных методов решения является алгоритм Верле [30], позволяющий рассчитать положение точки по двум ее предыдущим положениям. Существует также метод “Leapfrog”, впервые использованный в молекулярной динамике Виньярдом [25]. Этот метод аналогичен алгоритму Верле, но позволяет, благодаря использованию метода центральных разностей, на каждом шаге получать и координаты, и скорости точек (это удобно, чтобы на

каждом шаге отслеживать кинетическую энергию системы):

$$\begin{aligned}\underline{v}\left(t + \frac{1}{2}\tau\right) &= \underline{v}\left(t - \frac{1}{2}\tau\right) + \underline{w}(t)\tau, \\ \underline{r}(t + \tau) &= \underline{r}(t) - \underline{v}\left(t + \frac{1}{2}\tau\right)\tau, \\ \underline{v}(t) &= \frac{1}{2} \left(\underline{v}\left(t + \frac{1}{2}\tau\right) - \underline{v}\left(t - \frac{1}{2}\tau\right) \right),\end{aligned}\quad (44)$$

где $\underline{w}(t)$ — ускорение частицы, которое вычисляется при подстановке рассчитанных значений $\underline{r}(t)$ в правую часть (43).

При молекулярно-динамическом расчете основная часть времени уходит на вычисление сил взаимодействия между каждой парой частиц. На рис. 1 показан потенциал, используемый при расчетах. Видим, что уже на расстоянии, вдвое превышающем равновесное, взаимодействием между частицами можно пренебречь. Поэтому обычно потенциал полагается равным нулю начиная с некоторого расстояния a_{cut} , которое называется радиусом обрезания. Более того, можно уменьшить количество расчетов расстояний между частицами, если разбить пространство на ячейки со стороной a_{cut} . В таком случае, совершенно естественно провести распараллеливание вычислений, при котором каждый процессор проводит вычисление внутри своей области и на ее границе, потом процессоры обмениваются информацией о пограничной области. Вводить радиус обрезания можно по-разному [10], сохраняя или не сохраняя непрерывность самого потенциала, его первой и второй производной. В некоторых задачах сохранение непрерывности производной принципиально, потому что в противном случае вычислительная ошибка, связанная с работой с разрывными функциями, может внести существенное количество энергии в систему и тем самым разрушить ее.

В нашей теории не описываются краевые эффекты. Чтобы избежать из влияния при молекулярно-динамическом моделировании, можно либо использовать большое число частиц, либо поставить периодические граничные условия в системе (43). С точки зрения производительности периодические условия намного выгоднее. Если задается радиус обрезания, то линейный размер объекта исследования должен быть как минимум в два раза больше, чем a_{cut} . Затем частицы из приграничного слоя толщиной a_{cut} копируются на противоположную границу, что создает дополнительные слои из так называемых виртуальных частиц. Силы, приложенные к виртуальной частице, действуют и на оригинал. Иногда такие граничные условия могут стабилизировать неустойчивую структуру. Впрочем, недостаточное количество частиц при альтернативном подходе может привести к разрушению исходного образца, а определить, какое количество частиц является достаточным, если речь идет о больших деформациях, часто невозможно.

При аналитическом исследовании устойчивости конкретные значения массы частиц m , равновесного расстояния a и глубины потенциальной ямы D не влияли на очертания областей устойчивости, без ограничения общности их можно было принять единичными. При молекулярно-динамическом расчете от этих величин зависят параметры моделирования. В данной работе были использованы следующие значения: $m = 7 \cdot 10^{-26}$ кг, $a = 1 \text{ \AA}$, $D = 10^{-20} \text{ Дж} = 0.062 \text{ эВ}$. Масса частиц примерно соответствует кальцию (гранецентрированная кубическая решетка) или скандию (гексагональная плотноупакованная решетка). При моделировании использовалось 900 частиц.

В качестве микроскопического масштаба времени можно взять период колебаний частицы массы m на пружине жесткостью $c = \Pi''(a)$:

$$T_0 = 2\pi \sqrt{\frac{m}{c}}.$$

Поскольку в данной работе исследуется сильное сжатие образца (до 20% от исходного линейного размера), был взят более мелкий шаг по времени, а именно $2 \cdot 10^{-4} T_0$. Расчет заканчивался после 300000 шагов или по достижении уровня энергии, превышающего заданный на первом шаге в 1000 раз. Начальная энергия соответствует температуре $0.1K$.

Итак, в данной работе при молекулярно-динамическом моделировании строилась треугольная решетка в деформированном состоянии и ставились периодические граничные условия. Частицам, взаимодействующим посредством потенциала Морзе (1), придавались малые начальные скорости. Затем решалась задача Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (43). Если далее наблюдались ограниченные по амплитуде колебания кинетической энергии вокруг половины заданного на первом шаге уровня, то делался вывод об устойчивости. Если наблюдался резкий рост кинетической энергии, то деформированная конфигурация признавалась неустойчивой, поскольку возрастание кинетической энергии означает, что все большее количество частиц приобретает скорость, сравнимую со скоростью диссоциации. Рост мог происходить не сразу, а по прошествии вплоть до 100000 шагов. На рис. 20 приведена зависимость средней кинетической энергии за 300000 шагов (или за то число шагов, которое потребовалось, чтобы начальная энергия была превышена в 1000 раз) от задаваемых деформаций.

В работе использовались параллельные вычисления. Для построения области устойчивости в пространстве деформаций были выбраны 10000 точек, которые были поделены между 44 процессорами.

На рис. 17 приведена начальная конфигурация, соответствующая неустойчивой точке $\varepsilon_1 = 0.506$, $\varepsilon_2 = -0.108$ в двумерном пространстве деформаций.

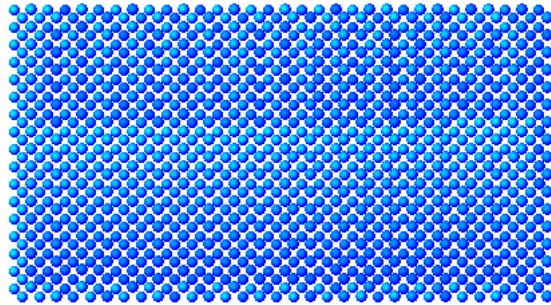


Рис. 17: Начальная деформированная конфигурация

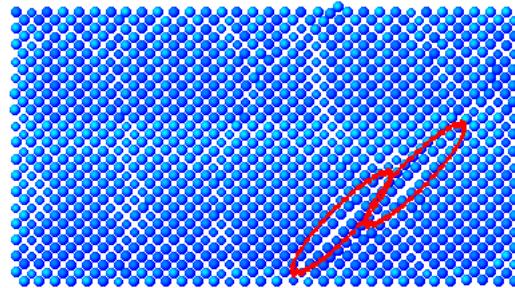


Рис. 18: Неустойчивая конфигурация $\varepsilon_1 = 0.506$, $\varepsilon_2 = -0.108$ через 100000 шагов интегрирования

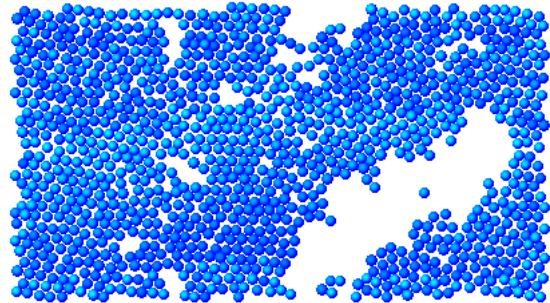


Рис. 19: Неустойчивая конфигурация $\varepsilon_1 = 0.506$, $\varepsilon_2 = -0.108$ через 300000 шагов интегрирования

На рис. 18 и 19 показано, что произойдет с системой через 100000 и 300000 шагов. Явно видно образование вакансий, трещин и т.п. На рис. 18 красным выделены области зарождения трещин. Деформация $\varepsilon_1 = 0.506$, $\varepsilon_2 = -0.108$ близка к промежуточной устойчивой. При этом длина сторон элементарной ячейки примерно равны расстоянию разрыва связи.

На рис. 21 показаны точки, в которых наблюдались колебания энергии и точки, полученные аналитически. Наблюдается хорошее совпадение областей, за исключением окрестности сжатия более, чем на 70%. Сделать какой-нибудь вывод о поведении системы в пограничной области также затруднительно. При молекулярно-

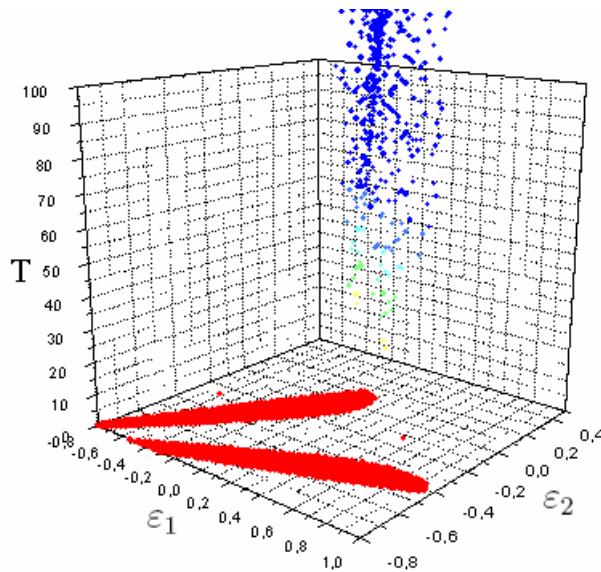


Рис. 20: Результаты молекулярно-динамического моделирования

динамическом моделировании сжатия приходится на каждом шаге просчитывать много больше взаимодействий, чем в районе отсчетной конфигурации и растяжения. Все 10000 задач, максимум по 300000 шагов в каждой, считались около недели на 44 процессорах. Даже если допустить, что программу для решения системы уравнений движения можно оптимизировать, временные затраты не соизмеримы с аналитическим способом, который позволяет получить области устойчивости за несколько секунд.

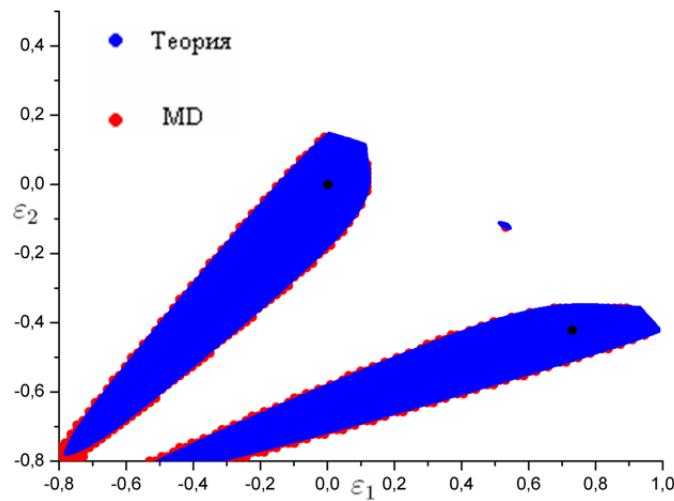


Рис. 21: Сравнение с теорией

На рис. 22 красным цветом выделены зоны в которых потеря устойчивости происходила в течение первых 20 шагов, оранжевым — от 20 до 100 шагов, желтым — до 500, зеленым — до 1000, голубым — до 2000, синим — до 20 тысяч,

фиолетовым — до 200 тысяч шагов. Области устойчивости выделены черным. Видим, что в районе промежуточной области и вблизи границ потеря устойчивости происходит намного позже, чем в других местах. Отдельный расчет показал, эта промежуточная область достаточно точно совпадает с построенной аналитически.

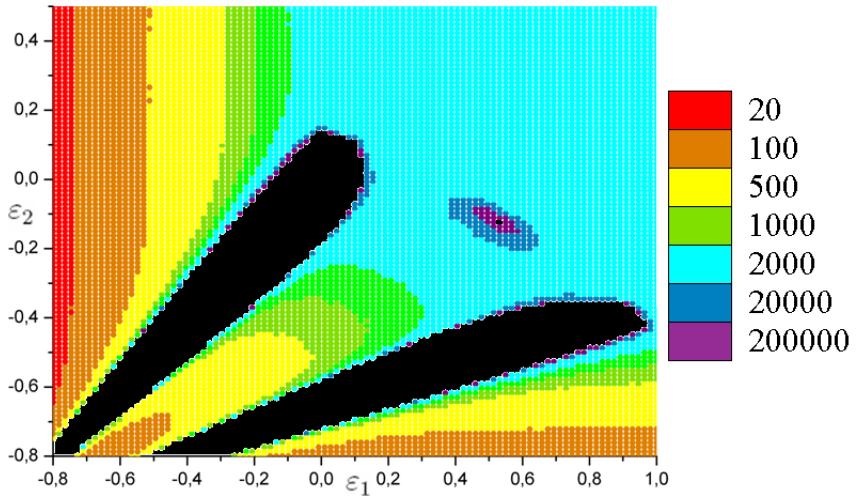


Рис. 22: Время расчета до потери устойчивости

3.5 Выводы

Рассмотрено деформирование двумерной треугольной решетки без учета сдвига (рис. 2). На основании критерия устойчивости (30, 31) построены области устойчивости (рис. 4). Форма и количество областей определяются шириной потенциальной ямы (рис. 7). Область вблизи отсчетной конфигурации похожа на область, полученную в [17] для решетки графена также без учета сдвига. Характерной частью как решетки графена, так и треугольной решетки, является шестиугольник (рис. 2), но у графена отсутствует центральный атом. На рис. 8 представлены границы областей в терминах компонент тензора жесткости ${}^4\underline{C}$. Дополнительное исследование показало, что все границы областей можно объяснить положительностью модулей Юнга и модуля сдвига [13] (рис. 14, 16). Потеря устойчивости при гидростатическом сжатии связана с обращением в ноль модуля сдвига, что согласуется с результатами, полученными для ГЦК решетки в [28]. Результаты молекулярно-динамического моделирования практически полностью совпали с теоретическим анализом (рис. 21). Таким образом, критерий устойчивости, используемый в данной работе, не приводит к парадоксальным результатам и может быть применен для исследования более сложных видов деформирования. Поэтому

далее мы не будем столь подробно останавливаться на интерпретации границ зон устойчивости и всевозможных проверках результатов.

4 Устойчивость треугольной решетки при растяжении и сжатии в ортогональных направлениях с учетом сдвига

4.1 Геометрия

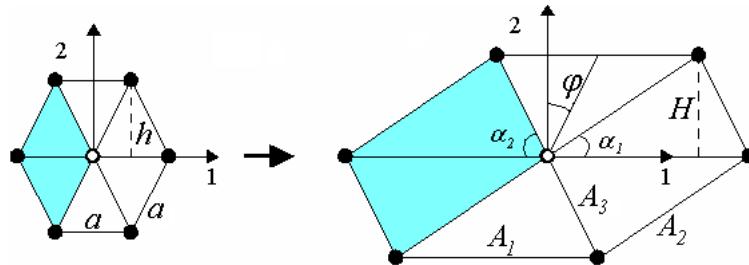


Рис. 23: Отсчетная и актуальная конфигурация

На рис. 23 изображена характерная часть треугольной решетки до и после деформации. Выделены оси, вдоль которых осуществляется жесткое нагружение и отмечен угол сдвига. Отмечены основные размеры. До деформации углы $\alpha_1 = \alpha_2 = 60^\circ$. Очевидно, что достаточно рассмотреть углы $0 \leq \varphi \leq 30^\circ$, поскольку изучается жесткое нагружение материала без пластических эффектов и порядок деформирования не важен.

В этом случае волновой вектор \underline{K} также содержит две компоненты, так что неравенства (29) остаются в силе.

Введем ортонормированный базис так, чтобы векторы \underline{e}_1 был сонаправлен с осью 1, а \underline{e}_2 — с осью 2. Тогда векторы $\underline{n}_k = \underline{A}_k/A_k$ могут быть представлены в виде:

$$\begin{aligned} \underline{n}_1 &= \underline{e}_1, & \underline{n}_2 &= \underline{e}_1 \cos \alpha_1 + \underline{e}_2 \sin \alpha_1, & \underline{n}_3 &= -\underline{e}_1 \cos \alpha_2 + \underline{e}_2 \sin \alpha_2, \\ \underline{n}_4 &= \underline{e}_2, & \underline{n}_5 &= \underline{e}_1 \cos \beta_1 + \underline{e}_2 \sin \beta_1, & \underline{n}_6 &= -\underline{e}_1 \cos \beta_2 + \underline{e}_2 \sin \beta_2, \\ \underline{n}_{-k} &= -\underline{n}_k. \end{aligned} \quad (45)$$

Здесь, как и в 26 выписаны единичные радиус-векторы для двух координационных сфер.

Соответствующие длины связей (на рис. 23 показана первая координационная сфера) зависят от деформаций следующим образом:

$$\begin{aligned}
A_1 &= a(1 + \varepsilon_1), \quad H = h(1 + \varepsilon_2), \quad A_2 = \sqrt{\left(\frac{A_1}{2} + H \tan \varphi\right)^2 + H^2}, \\
A_3 &= \sqrt{\left(\frac{A_1}{2} - H \tan \varphi\right)^2 + H^2}, \quad A_4 = \frac{2H}{\cos \varphi}, \\
A_5 &= \sqrt{\left(\frac{3A_1}{2} + H \tan \varphi\right)^2 + H^2}, \quad A_6 = \sqrt{\left(\frac{3A_1}{2} - H \tan \varphi\right)^2 + H^2}, \\
A_{-k} &= -A_k, \quad \sin \alpha_1 = \frac{H}{A_2}, \quad \sin \alpha_1 = \frac{H}{A_3}, \quad \sin \beta_1 = \frac{H}{A_5}, \quad \sin \beta_2 = \frac{H}{A_6}.
\end{aligned} \tag{46}$$

Вычислим компоненты тензора жесткости ${}^4\underline{\underline{C}}$, подставив (45) и (46) в (22) и (5):

$$\begin{aligned}
C_{11} &= A_6^2(\mathcal{A}_6 + (C_6 - \mathcal{A}_6) \cos^2 \beta_2) \cos^2 \beta_2 + A_5^2(\mathcal{A}_5 + (C_5 - \mathcal{A}_5) \cos^2 \beta_1) \cos^2 \beta_1 \\
&+ A_4^2(\mathcal{A}_4 + (C_4 - \mathcal{A}_4) \sin^2 \varphi) \sin^2 \varphi + A_3^2(\mathcal{A}_3 + (C_3 - \mathcal{A}_3) \cos^2 \alpha_2) \cos^2 \alpha_2 \\
&+ A_2^2(\mathcal{A}_2 + (C_2 - \mathcal{A}_2) \cos^2 \alpha_1) \cos^2 \alpha_1 + A_1^2 C_1, \\
C_{12} &= A_6^2(\mathcal{A}_6 + (C_6 - \mathcal{A}_6) \cos^2 \beta_2) \sin^2 \beta_2 + A_5^2(\mathcal{A}_5 + (C_5 - \mathcal{A}_5) \cos^2 \beta_1) \sin^2 \beta_1 \\
&+ A_4^2(\mathcal{A}_4 + (C_4 - \mathcal{A}_4) \sin^2 \varphi) \cos^2 \varphi + A_3^2(\mathcal{A}_3 + (C_3 - \mathcal{A}_3) \cos^2 \alpha_2) \sin^2 \alpha_2 \\
&+ A_2^2(\mathcal{A}_2 + (C_2 - \mathcal{A}_2) \cos^2 \alpha_1) \sin^2 \alpha_1, \\
C_{21} &= A_6^2(\mathcal{A}_6 + (C_6 - \mathcal{A}_6) \sin^2 \beta_2) \cos^2 \beta_2 + A_5^2(\mathcal{A}_5 + (C_5 - \mathcal{A}_5) \sin^2 \beta_1) \cos^2 \beta_1 \\
&+ A_4^2(\mathcal{A}_4 + (C_4 - \mathcal{A}_4) \cos^2 \varphi) \sin^2 \varphi + A_3^2(\mathcal{A}_3 + (C_3 - \mathcal{A}_3) \sin^2 \alpha_2) \cos^2 \alpha_2 \\
&+ A_2^2(\mathcal{A}_2 + (C_2 - \mathcal{A}_2) \sin^2 \alpha_1) \cos^2 \alpha_1 + A_1^2 \mathcal{A}_1, \\
C_{22} &= A_6^2(\mathcal{A}_6 + (C_6 - \mathcal{A}_6) \sin^2 \beta_2) \sin^2 \beta_2 + A_5^2(\mathcal{A}_5 + (C_5 - \mathcal{A}_5) \sin^2 \beta_1) \sin^2 \beta_1 \\
&+ A_4^2(\mathcal{A}_4 + (C_4 - \mathcal{A}_4) \cos^2 \varphi) \cos^2 \varphi + A_3^2(\mathcal{A}_3 + (C_3 - \mathcal{A}_3) \sin^2 \alpha_2) \sin^2 \alpha_2 \\
&+ A_2^2(\mathcal{A}_2 + (C_2 - \mathcal{A}_2) \sin^2 \alpha_1) \sin^2 \alpha_1, \\
C_{14} &= -A_6^2(\mathcal{A}_6 + (C_6 - \mathcal{A}_6) \cos^2 \beta_2) \cos \beta_2 \sin \beta_2 + A_5^2(\mathcal{A}_5 + (C_5 - \mathcal{A}_5) \cos^2 \beta_1) \cos \beta_1 \sin \beta_1 \\
&+ A_4^2(\mathcal{A}_4 + (C_4 - \mathcal{A}_4) \sin^2 \varphi) \sin \varphi \cos \varphi - A_3^2(\mathcal{A}_3 + (C_3 - \mathcal{A}_3) \cos^2 \alpha_2) \cos \alpha_2 \sin \alpha_2 \\
&+ A_2^2(\mathcal{A}_2 + (C_2 - \mathcal{A}_2) \cos^2 \alpha_1) \cos \alpha_1 \sin \alpha_1, \\
C_{41} &= -A_6^2(C_6 - \mathcal{A}_6) \cos \beta_2^3 \sin \beta_2 + A_5^2(C_5 - \mathcal{A}_5) \cos^3 \beta_1 \sin \beta_1 + A_4^2(C_4 - \mathcal{A}_4) \sin^3 \varphi \cos \varphi \\
&- A_3^2(C_3 - \mathcal{A}_3) \cos^3 \alpha_2 \sin \alpha_2 + A_2^2(C_2 - \mathcal{A}_2) \cos^3 \alpha_1 \sin \alpha_1,
\end{aligned} \tag{47}$$

$$\begin{aligned}
C_{24} &= -A_6^2(\mathcal{A}_6 + (C_6 - \mathcal{A}_6)\sin^2\beta_2)\cos\beta_2\sin\beta_2 + A_5^2(\mathcal{A}_5 + (C_5 - \mathcal{A}_5)\sin^2\beta_1)\cos\beta_1\sin\beta_1 \\
&\quad + A_4^2(\mathcal{A}_4 + (C_4 - \mathcal{A}_4)\cos^2\varphi)\sin\varphi\cos\varphi - A_3^2(\mathcal{A}_3 + (C_3 - \mathcal{A}_3)\sin^2\alpha_2)\cos\alpha_2\sin\alpha_2 \\
&\quad + A_2^2(\mathcal{A}_2 + (C_2 - \mathcal{A}_2)\sin^2\alpha_1)\cos\alpha_1\sin\alpha_1, \\
C_{42} &= -A_6^2(C_6 - \mathcal{A}_6)\cos\beta_2\sin^3\beta_2 + A_5^2(C_5 - \mathcal{A}_5)\cos\beta_1\sin^3\beta_1 + A_4^2(C_4 - \mathcal{A}_4)\sin\varphi\cos^3\varphi \\
&\quad - A_3^2(C_3 - \mathcal{A}_3)\cos\alpha_2\sin^3\alpha_2 + A_2^2(C_2 - \mathcal{A}_2)\cos\alpha_1\sin^3\alpha_1, \\
C_{44} &= A_6^2(C_6 - \mathcal{A}_6)\cos^2\beta_2\sin^2\beta_2 + A_5^2(C_5 - \mathcal{A}_5)\cos^2\beta_1\sin^2\beta_1 + A_4^2(C_4 - \mathcal{A}_4)\sin^2\varphi\cos^2\varphi \\
&\quad + A_3^2(C_3 - \mathcal{A}_3)\cos^2\alpha_2\sin^2\alpha_2 + A_2^2(C_2 - \mathcal{A}_2)\cos^2\alpha_1\sin^2\alpha_1.
\end{aligned}$$

4.2 Условия устойчивости

Неравенства (29) имеют вид:

$$\begin{aligned}
\text{tr } \underline{\underline{D}} > 0 &\Leftrightarrow T_{11}K_1^2 + T_{12}K_1K_2 + T_{22}K_2^2 > 0, \\
\det \underline{\underline{D}} > 0 &\Leftrightarrow AK_1^4 + BK_1^2K_2^2 + CK_2^4 + DK_1^3K_2 + EK_1K_2^3 > 0.
\end{aligned} \tag{48}$$

Правая часть неравенства (48₁) является квадратичной формой, так что условием ее положительной определенности будет:

$$T_{11} > 0, \quad 4T_{11}T_{22} - T_{12}^2 > 0, \tag{49}$$

где

$$T_{11} = C_{11} + C_{21}, \quad T_{12} = C_{14} + C_{24}, \quad T_{22} = C_{12} + C_{22}. \tag{50}$$

Коэффициенты неравенства (48₂) определяются формулами:

$$\begin{aligned}
A &= C_{11}C_{21} - C_{41}^2, \quad B = C_{14}C_{24} + C_{11}C_{22} + C_{12}C_{21} - 2C_{41}C_{42} - C_{44}^2, \\
C &= C_{12}C_{22} - C_{42}^2, \quad D = C_{11}C_{24} - 2C_{41}C_{44} + C_{14}C_{21}, \\
E &= C_{12}C_{24} + C_{14}C_{22} - 2C_{42}C_{44}.
\end{aligned} \tag{51}$$

Правая часть неравенства (48₂) является формой четвертой степени, для которой не существует критерия положительной определенности в виде неравенств для коэффициентов. Прежде чем приступить к полному исследованию неравенства (48₂) нужно учесть, что K_1 и K_2 могут быть равны нулю. В этом случае получаем два важных условия:

$$A > 0, \quad C > 0, \tag{52}$$

которые сразу позволяют сузить область начальных деформаций $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varphi$.

Предлагается два способа решения задачи.

- Для каждой точки из трехмерного пространства начальных деформаций $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varphi$ составить неравенство (48₂), а потом проверить его смысл при разных K_1 и K_2 . Кроме того, ввиду однородности и четной степени уравнения достаточно рассмотреть волновые числа из диапазона $-1 \leq K_1 \leq 1$ и $0 \leq K_2 \leq 1$. Таким образом, потребуется меньшее число переборов параметров. Будем далее называть такой способ методом Монте-Карло.
- Ввиду того, что рассматриваются только вещественные волновые векторы \underline{K} , можно разделить неравенство (48₂) на K_2^4 . Получим задачу о том, при каких коэффициентах уравнение четвертой степени не имеет вещественных корней.

Поговорим подробнее о пункте 2. Левую часть неравенства (48₂) запишем в виде:

$$AX^4 + DX^3 + BX^2 + EX + C, \quad X = \frac{K_1}{K_2}. \quad (53)$$

График функции, стоящей в левой части (53), представляет собой кривую, на бесконечности уходящую в положительную область, так как, согласно (52), $A > 0$. Поэтому задача сводится к нахождению минимумов этой функции и требованиям, чтобы сама функция в точках минимума была положительной.

Рассмотрим производную функции, стоящей в левой части (53), и приравняем ее к нулю:

$$4AX^3 + 3DX^2 + 2BX + E = 0. \quad (54)$$

Имеем кубическое уравнение, которое может иметь либо один, либо три вещественных корня. Вещественные корни уравнения (54) отвечают стационарным точкам функции (53). Уравнение (54) будем решать по формуле Кардано для каждой точки из трехмерного пространства начальных деформаций $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varphi$.

К сожалению, при численном решении возникает проблема отделения комплексных корней от вещественных. Поэтому для построения области устойчивости предлагается использовать метод Монте-Карло, и исследовать уравнения четвертой степени. Для уменьшения временных затрат методом Монте-Карло можно пользоваться для уточнения границ области.

На рис. 24 изображена область устойчивости. Частицы взаимодействуют посредством потенциала Морзе (1). Она симметрична относительно плоскости $\varphi = 0$ и повторяется с периодом $\varphi = 60^\circ$.

Видим, что метод Монте-Карло действительно добавляет к решению несколько точек, которые выделены красным на рис. 24. Кроме двух больших областей, соответствующих двум вариантам ориентации треугольной решетки, имеются две

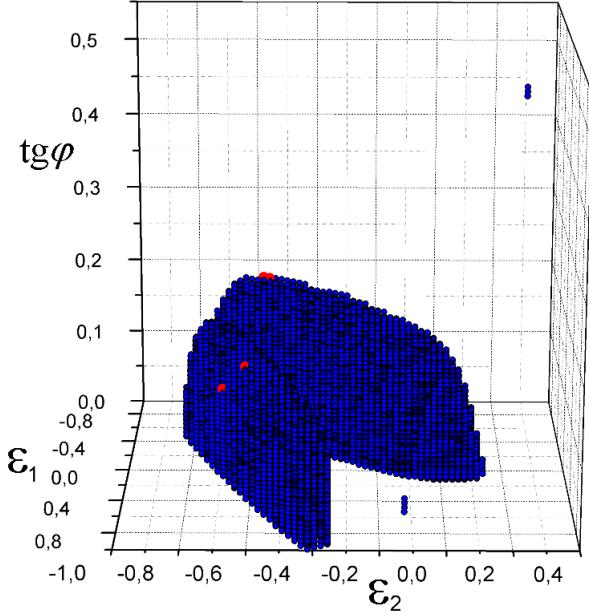


Рис. 24: Области устойчивости при растяжении, сжатии и сдвиге

дополнительные области: при $\varphi \approx 0$ и $\varphi \approx 26^\circ$. Они отвечают квадратным решеткам (рис. 25).

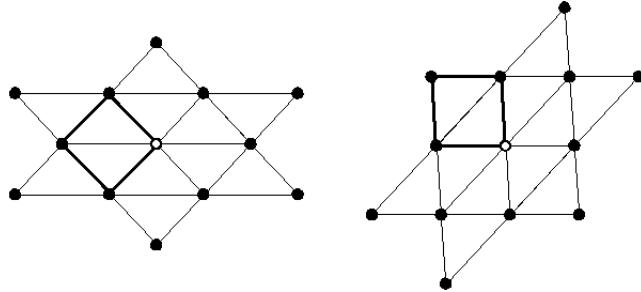


Рис. 25: Квадратные конфигурации при $\varphi \approx 0$ и $\varphi \approx 26^\circ$

Рассмотрим чистый сдвиг. Компоненты тензора напряжений Коши с учетом двух координационных сфер имеют вид:

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= -\frac{A_6 F_6 \cos^2 \beta_2 + A_5 F_5 \cos^2 \beta_1 + A_4 F_4 \sin^2 \varphi + A_3 F_3 \cos^2 \alpha_2 + A_2 F_2 \cos^2 \alpha_1 + A_1 F_1}{2V}, \\ \sigma_{22} &= -\frac{A_6 F_6 \sin^2 \beta_2 + A_5 F_5 \sin^2 \beta_1 + A_4 F_4 \cos^2 \varphi + A_3 F_3 \sin^2 \alpha_2 + A_2 F_2 \sin^2 \alpha_1}{2V}, \\ \sigma_{12} = \tau &= -\frac{-A_6 F_6 \sin 2\beta_2 + A_5 F_5 \sin 2\beta_1 + A_4 F_4 \sin 2\varphi - A_3 F_3 \sin 2\alpha_2 + A_2 F_2 \sin 2\alpha_1}{4V}. \end{aligned} \quad (55)$$

Если подставить (1) и (46) в (55) при $\sigma_{11} = \sigma_{22} = 0$, то получится диаграмма нагружения, изображенная на рис. 26.

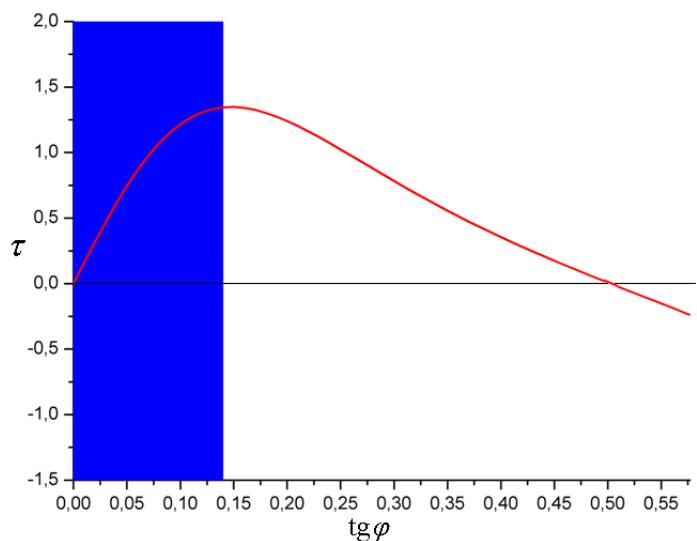


Рис. 26: Чистый сдвиг

Видим, что как только кривая становится ниспадающей, происходит потеря устойчивости. Дополнительных проверок границ областей устойчивости не проводилось ввиду того, что задача в целом аналогична рассмотренной в предыдущей части, а более или менее качественное молекулярно-динамическое моделирование занимает неоправданно много времени.

5 Устойчивость ГЦК решетки при растяжении и сжатии в ортогональных направлениях

5.1 Геометрия

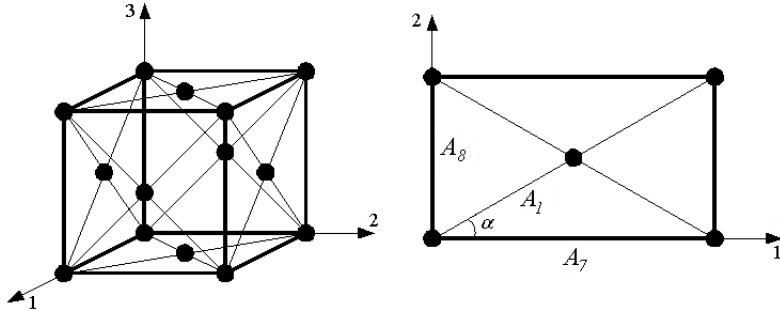


Рис. 27: ГЦК решетка

На рис. 27 изображена характерная часть гранецентрированной кубической решетки до деформации и одна грань после деформации. Выделены оси, вдоль которых осуществляется жесткое нагружение. Отмечены основные размеры. До деформации угол $\alpha = 45^\circ$.

Введем ортонормированный базис так, чтобы векторы e_1 был сонаправлен с осью 1, e_2 — с осью 2, а e_3 — с осью 3. Тогда векторы $n_k = \underline{A}_k / A_k$ могут быть представлены в виде:

$$\begin{aligned} n_1 &= e_1 \cos \alpha + e_2 \sin \alpha, & n_2 &= -e_1 \cos \alpha + e_2 \sin \alpha, \\ n_3 &= e_1 \cos \beta + e_3 \sin \beta, & n_4 &= -e_1 \cos \beta + e_3 \sin \beta, \\ n_5 &= e_3 \cos \gamma + e_2 \sin \gamma, & n_6 &= -e_3 \cos \gamma + e_2 \sin \gamma, \\ n_7 &= e_1, & n_8 &= e_2, & n_9 &= e_3, & n_{-k} &= -n_k. \end{aligned} \tag{56}$$

Здесь выписаны единичные радиус-векторы для двух координационных сфер ($k = 1 - 6$, $k = 7 - 9$).

Соответствующие длины связей зависят от деформаций следующим образом:

$$\begin{aligned} A_7 &= a\sqrt{2}(1 + \varepsilon_1), & A_8 &= a\sqrt{2}(1 + \varepsilon_2), & A_9 &= a\sqrt{2}(1 + \varepsilon_3), \\ A_1 = A_2 &= \frac{\sqrt{A_7^2 + A_8^2}}{2}, & A_3 = A_4 &= \frac{\sqrt{A_7^2 + A_9^2}}{2}, & A_5 = A_6 &= \frac{\sqrt{A_8^2 + A_9^2}}{2}, \\ \sin \alpha &= \frac{A_8}{\sqrt{A_7^2 + A_8^2}}, & \sin \beta &= \frac{A_9}{\sqrt{A_7^2 + A_9^2}}, & \sin \gamma &= \frac{A_8}{\sqrt{A_8^2 + A_9^2}}. \end{aligned} \tag{57}$$

При расчете использовались три координационные сферы, поскольку если в двумерной задаче радиус второй координационной сферы в отсчетной конфигурации равен $\sqrt{3}a$, то в ГЦК решетке он составляет лишь $\sqrt{2}a$, а расстояние до

атомов, лежащих на третьей сфере, равно $\sqrt{3}a$. Дополнительное исследование показало, что очертания области устойчивости перестают изменяться только при учете трех сфер и более. Радиус-векторы третьей координационной сферы вычисляются по формулам:

$$\begin{aligned}\underline{A}_{10} &= \underline{A}_7 + \underline{A}_5, & \underline{A}_{11} &= \underline{A}_7 - \underline{A}_5, & \underline{A}_{12} &= \underline{A}_7 + \underline{A}_6, & \underline{A}_{13} &= \underline{A}_7 - \underline{A}_6, \\ \underline{A}_{14} &= \underline{A}_8 + \underline{A}_3, & \underline{A}_{15} &= \underline{A}_8 - \underline{A}_3, & \underline{A}_{16} &= \underline{A}_8 + \underline{A}_4, & \underline{A}_{17} &= \underline{A}_8 - \underline{A}_4, \\ \underline{A}_{18} &= \underline{A}_9 + \underline{A}_1, & \underline{A}_{19} &= \underline{A}_9 - \underline{A}_1, & \underline{A}_{20} &= \underline{A}_9 + \underline{A}_2, & \underline{A}_{21} &= \underline{A}_9 - \underline{A}_2.\end{aligned}\quad (58)$$

Поскольку векторы \underline{A}_7 и \underline{A}_5 , \underline{A}_7 и \underline{A}_6 , \underline{A}_8 и \underline{A}_3 , \underline{A}_8 и \underline{A}_4 , \underline{A}_9 и \underline{A}_1 , \underline{A}_9 и \underline{A}_2 попарно ортогональны, то длины связей вычисляются как:

$$\begin{aligned}A_{10} = A_{11} = A_{12} = A_{13} &= \frac{\sqrt{4A_7^2 + A_8^2 + A_9^2}}{2}, \\ A_{14} = A_{15} = A_{16} = A_{17} &= \frac{\sqrt{A_7^2 + 4A_8^2 + A_9^2}}{2}, \\ A_{18} = A_{19} = A_{20} = A_{21} &= \frac{\sqrt{A_7^2 + A_8^2 + 4A_9^2}}{2}.\end{aligned}\quad (59)$$

Вычислим компоненты тензора жесткости ${}^4\underline{\underline{C}}$, подставив (56)–(59) в (22) и (5):

$$\begin{aligned}C_{11} &= 4 \left(\mathcal{A}_{18} + \frac{(C_{18} - \mathcal{A}_{18})A_1^2 \cos^2 \alpha}{A_1^2 + A_9^2} \right) A_1^2 \cos^2 \alpha + 4 \left(\mathcal{A}_{14} + \frac{(C_{14} - \mathcal{A}_{14})A_3^2 \cos^2 \beta}{A_3^2 + A_8^2} \right) A_3^2 \cos^2 \beta \\ &\quad + 4 \left(\mathcal{A}_{10} + \frac{(C_{10} - \mathcal{A}_{10})A_7^2}{A_7^2 + A_5^2} \right) A_7^2 + C_7 A_7^2 + 2(\mathcal{A}_3 + (C_3 - \mathcal{A}_3) \cos^2 \beta) A_3^2 \cos^2 \beta \\ &\quad + 2(\mathcal{A}_1 + (C_1 - \mathcal{A}_1) \cos^2 \alpha) A_1^2 \cos^2 \alpha, \\ C_{12} &= 4 \left(\mathcal{A}_{18} + \frac{(C_{18} - \mathcal{A}_{18})A_1^2 \cos^2 \alpha}{A_1^2 + A_9^2} \right) A_1^2 \sin^2 \alpha + 4 \left(\mathcal{A}_{14} + \frac{(C_{14} - \mathcal{A}_{14})A_3^2 \cos^2 \beta}{A_3^2 + A_8^2} \right) A_8^2 \\ &\quad + 4 \left(\mathcal{A}_{10} + \frac{(C_{10} - \mathcal{A}_{10})A_7^2}{A_7^2 + A_5^2} \right) A_5^2 \sin^2 \gamma + \mathcal{A}_8 A_8^2 + 2\mathcal{A}_5 A_5^2 \sin^2 \gamma \\ &\quad + 2(\mathcal{A}_1 + (C_1 - \mathcal{A}_1) \cos^2 \alpha) A_1^2 \sin^2 \alpha, \\ C_{13} &= 4 \left(\mathcal{A}_{18} + \frac{(C_{18} - \mathcal{A}_{18})A_1^2 \cos^2 \alpha}{A_1^2 + A_9^2} \right) A_9^2 + 4 \left(\mathcal{A}_{14} + \frac{(C_{14} - \mathcal{A}_{14})A_3^2 \cos^2 \beta}{A_3^2 + A_8^2} \right) A_3^2 \sin^2 \beta \\ &\quad + 4 \left(\mathcal{A}_{10} + \frac{(C_{10} - \mathcal{A}_{10})A_7^2}{A_7^2 + A_5^2} \right) A_5^2 \cos^2 \gamma + \mathcal{A}_9 A_9^2 + 2\mathcal{A}_5 A_5^2 \cos^2 \gamma \\ &\quad + 2(\mathcal{A}_3 + (C_3 - \mathcal{A}_3) \cos^2 \beta) A_3^2 \sin^2 \beta, \\ C_{21} &= 4 \left(\mathcal{A}_{18} + \frac{(C_{18} - \mathcal{A}_{18})A_1^2 \sin^2 \alpha}{A_1^2 + A_9^2} \right) A_1^2 \cos^2 \alpha + 4 \left(\mathcal{A}_{14} + \frac{(C_{14} - \mathcal{A}_{14})A_8^2}{A_3^2 + A_8^2} \right) A_3^2 \cos^2 \beta \\ &\quad + 4 \left(\mathcal{A}_{10} + \frac{(C_{10} - \mathcal{A}_{10})A_5^2 \sin^2 \gamma}{A_7^2 + A_5^2} \right) A_7^2 + \mathcal{A}_7 A_7^2 + 2\mathcal{A}_3 A_3^2 \cos^2 \beta \\ &\quad + 2(\mathcal{A}_1 + (C_1 - \mathcal{A}_1) \sin^2 \alpha) A_1^2 \cos^2 \alpha,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_{22} &= 4 \left(\mathcal{A}_{18} + \frac{(C_{18} - \mathcal{A}_{18})A_1^2 \sin^2 \alpha}{A_1^2 + A_9^2} \right) A_1^2 \sin^2 \alpha + 4 \left(\mathcal{A}_{14} + \frac{(C_{14} - \mathcal{A}_{14})A_8^2}{A_3^2 + A_8^2} \right) A_8^2 \\
&\quad + 4 \left(\mathcal{A}_{10} + \frac{(C_{10} - \mathcal{A}_{10})A_5^2 \sin^2 \gamma}{A_7^2 + A_5^2} \right) A_5^2 \sin^2 \gamma + C_8 A_8^2 + 2(\mathcal{A}_5 + (C_5 - \mathcal{A}_5) \sin^2 \gamma) A_5^2 \sin^2 \gamma \\
&\quad + 2(\mathcal{A}_1 + (C_1 - \mathcal{A}_1) \sin^2 \alpha) A_1^2 \sin^2 \alpha, \\
C_{23} &= 4 \left(\mathcal{A}_{18} + \frac{(C_{18} - \mathcal{A}_{18})A_1^2 \sin^2 \alpha}{A_1^2 + A_9^2} \right) A_9^2 + 4 \left(\mathcal{A}_{14} + \frac{(C_{14} - \mathcal{A}_{14})A_8^2}{A_3^2 + A_8^2} \right) A_3^2 \sin^2 \beta \\
&\quad + 4 \left(\mathcal{A}_{10} + \frac{(C_{10} - \mathcal{A}_{10})A_5^2 \sin^2 \gamma}{A_7^2 + A_5^2} \right) A_5^2 \cos^2 \gamma + \mathcal{A}_9 A_9^2 + 2(\mathcal{A}_5 + (C_5 - \mathcal{A}_5) \sin^2 \gamma) A_5^2 \cos^2 \gamma \\
&\quad + 2\mathcal{A}_3 A_3^2 \sin^2 \beta, \\
C_{31} &= 4 \left(\mathcal{A}_{18} + \frac{(C_{18} - \mathcal{A}_{18})A_9^2}{A_1^2 + A_9^2} \right) A_1^2 \cos^2 \alpha + 4 \left(\mathcal{A}_{14} + \frac{(C_{14} - \mathcal{A}_{14})A_3^2 \sin^2 \beta}{A_3^2 + A_8^2} \right) A_3^2 \cos^2 \beta \\
&\quad + 4 \left(\mathcal{A}_{10} + \frac{(C_{10} - \mathcal{A}_{10})A_5^2 \cos^2 \gamma}{A_7^2 + A_5^2} \right) A_7^2 + \mathcal{A}_7 A_7^2 + 2(\mathcal{A}_3 + (C_3 - \mathcal{A}_3) \sin^2 \beta) A_3^2 \cos^2 \beta \\
&\quad + 2\mathcal{A}_1 A_1^2 \cos^2 \alpha, \\
C_{32} &= 4 \left(\mathcal{A}_{18} + \frac{(C_{18} - \mathcal{A}_{18})A_9^2}{A_1^2 + A_9^2} \right) A_1^2 \sin^2 \alpha + 4 \left(\mathcal{A}_{14} + \frac{(C_{14} - \mathcal{A}_{14})A_3^2 \sin^2 \beta}{A_3^2 + A_8^2} \right) A_8^2 \\
&\quad + 4 \left(\mathcal{A}_{10} + \frac{(C_{10} - \mathcal{A}_{10})A_5^2 \cos^2 \gamma}{A_7^2 + A_5^2} \right) A_5^2 \sin^2 \gamma + \mathcal{A}_8 A_8^2 + 2(\mathcal{A}_5 + (C_5 - \mathcal{A}_5) \cos^2 \gamma) A_5^2 \sin^2 \gamma \\
&\quad + 2A_1^2 \mathcal{A}_1 \sin^2 \alpha, \\
C_{33} &= 4 \left(\mathcal{A}_{18} + \frac{(C_{18} - \mathcal{A}_{18})A_9^2}{A_1^2 + A_9^2} \right) A_9^2 + 4 \left(\mathcal{A}_{14} + \frac{(C_{14} - \mathcal{A}_{14})A_3^2 \sin^2 \beta}{A_3^2 + A_8^2} \right) A_3^2 \sin^2 \beta \\
&\quad + 4 \left(\mathcal{A}_{10} + \frac{(C_{10} - \mathcal{A}_{10})A_5^2 \cos^2 \gamma}{A_7^2 + A_5^2} \right) A_5^2 \cos^2 \gamma + C_9 A_9^2 + 2(\mathcal{A}_5 + (C_5 - \mathcal{A}_5) \cos^2 \gamma) A_5^2 \cos^2 \gamma \\
&\quad + 2(\mathcal{A}_3 + (C_3 - \mathcal{A}_3) \sin^2 \beta) A_3^2 \sin^2 \beta, \\
C_{44} &= \frac{4(C_{18} - \mathcal{A}_{18})A_1^2 \sin^2 \alpha A_9^2}{A_1^2 + A_9^2} + \frac{4(C_{14} - \mathcal{A}_{14})A_3^2 \sin^2 \beta A_8^2}{A_3^2 + A_8^2} + \frac{4(C_{10} - \mathcal{A}_{10})A_5^4 \cos^2 \gamma \sin^2 \gamma}{A_7^2 + A_5^2} \\
&\quad + 2(C_5 - \mathcal{A}_5)A_5^2 \sin^2 \gamma \cos^2 \gamma, \\
C_{55} &= \frac{4(C_{18} - \mathcal{A}_{18})A_1^2 \cos^2 \alpha A_9^2}{A_1^2 + A_9^2} + \frac{4(C_{14} - \mathcal{A}_{14})A_3^4 \cos^2 \beta \sin^2 \beta}{A_3^2 + A_8^2} + \frac{4(C_{10} - \mathcal{A}_{10})A_5^2 \cos^2 \gamma A_7^2}{A_7^2 + A_5^2} \\
&\quad + 2(C_3 - \mathcal{A}_3)A_3^2 \cos^2 \beta \sin^2 \beta, \\
C_{66} &= \frac{4(C_{18} - \mathcal{A}_{18})A_1^4 \cos^2 \alpha \sin^2 \alpha}{A_1^2 + A_9^2} + \frac{4(C_{14} - \mathcal{A}_{14})A_3^2 \cos^2 \beta A_8^2}{A_3^2 + A_8^2} + \frac{4(C_{10} - \mathcal{A}_{10})A_5^2 \sin^2 \gamma A_7^2}{A_7^2 + A_5^2} \\
&\quad + 2(C_1 - \mathcal{A}_1)A_1^2 \cos^2 \alpha \sin^2 \alpha.
\end{aligned} \tag{60}$$

Здесь совершен переход от четырех-индексной формы записи к двух-индексной по правилу: $11 = 1$, $22 = 2$, $33 = 3$, $23 = 32 = 4$, $13 = 31 = 5$, $12 = 21 = 6$ с учетом симметрии тензора жесткости.

5.2 Условия устойчивости

В трехмерной решетке условие (24) имеет вид

$$a\Omega^3 + b\Omega^2 + c\Omega + d = 0$$

$$a = 1, \quad b = -\text{tr } \underline{\underline{D}} = -I_1, \quad c = 1/2(\text{tr}^2 \underline{\underline{D}} - \text{tr} \underline{\underline{D}}^2) = I_2, \quad d = -\det \underline{\underline{D}} = -I_3, \quad (61)$$

где I_1, I_2, I_3 — инварианты тензора $\underline{\underline{D}} = {}^4\underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{K}}$.

Согласно (25), корни кубического уравнения (61) должны быть положительны. Это выполнится при:

$$\begin{aligned} d < 0, \quad b^2 - 3c > 0, \quad -b - \sqrt{b^2 - 3c} > 0 \\ \Updownarrow \\ d < 0, \quad b^2 - 3c \geq 0, \quad b < 0, \quad c > 0. \end{aligned} \quad (62)$$

Таким образом, условия устойчивости имеют вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} I_1 > 0, \\ I_2 > 0, \\ I_3 > 0, \\ I_1^2 - 3I_2 \geq 0. \end{array} \right. \quad (63)$$

Неравенство (63₁) представляет собой квадратичную форму с нулевыми коэффициентами при перекрестных членах:

$$F_{11}K_1^2 + F_{22}K_2^2 + F_{33}K_3^2 > 0, \quad (64)$$

где

$$F_{11} = C_{11} + C_{21} + C_{31}, \quad F_{22} = C_{12} + C_{22} + C_{32}, \quad F_{33} = C_{13} + C_{23} + C_{33}.$$

Неравенства (63₂) и (63₄) также являются квадратичным формами, но рассматриваются лишь в первом октанте:

$$\begin{aligned} S_{11}K_1^4 + S_{22}K_2^4 + S_{33}K_3^4 + S_{12}K_1^2K_2^2 + S_{13}K_1^2K_3^2 + S_{23}K_2^2K_3^2 &> 0, \\ Q_{11}K_1^4 + Q_{22}K_2^4 + Q_{33}K_3^4 + Q_{12}K_1^2K_2^2 + Q_{13}K_1^2K_3^2 + Q_{23}K_2^2K_3^2 &\geq 0, \end{aligned} \quad (65)$$

где

$$\begin{aligned}
S_{11} &= 0.5(C_{11}C_{31} + C_{21}C_{31} + C_{11}C_{21}), \\
S_{22} &= 0.5(C_{22}C_{32} + C_{12}C_{32} + C_{12}C_{22}), \\
S_{33} &= 0.5(C_{13}C_{33} + C_{23}C_{33} + C_{13}C_{23}), \\
S_{12} &= 0.5(C_{22}C_{31} + C_{11}C_{32} + C_{12}C_{31} + C_{21}C_{32} + C_{12}C_{21} + C_{11}C_{22} - C_{66}^2), \\
S_{13} &= 0.5(C_{13}C_{31} + C_{11}C_{23} - C_{55}^2 + C_{21}C_{33} + C_{23}C_{31} + C_{13}C_{21} + C_{11}C_{33}), \\
S_{23} &= 0.5(C_{13}C_{22} + C_{22}C_{33} + C_{23}C_{32} + C_{12}C_{23} + C_{13}C_{32} + C_{12}C_{33} - C_{44}^2), \\
Q_{11} &= 0.5(C_{11}^2 - C_{21}C_{31} - C_{11}C_{21} - C_{11}C_{31} + C_{21}^2 + C_{31}^2), \\
Q_{22} &= 0.5(-C_{12}C_{22} - C_{22}C_{32} + C_{22}^2 + C_{32}^2 - C_{12}C_{32} + C_{12}^2), \\
Q_{33} &= 0.5(C_{13}^2 + C_{23}^2 + C_{33}^2 - C_{23}C_{33} - C_{13}C_{23} - C_{13}C_{33}), \\
Q_{12} &= 0.5(-C_{11}C_{32} - C_{12}C_{21} - C_{12}C_{31} - C_{21}C_{32} - C_{22}C_{31} + 2C_{11}C_{12} \\
&\quad + 3C_{66}^2 + 2C_{21}C_{22} - C_{11}C_{22} + 2C_{31}C_{32}), \\
Q_{13} &= 0.5(-C_{13}C_{21} - C_{23}C_{31} + 2C_{31}C_{33} + 2C_{11}C_{13} + 3C_{55}^2 - C_{11}C_{23} \\
&\quad + 2C_{21}C_{23} - C_{13}C_{31} - C_{21}C_{33} - C_{11}C_{33}), \\
Q_{23} &= 0.5(-C_{12}C_{23} - C_{22}C_{33} + 2C_{22}C_{23} + 3C_{44}^2 - C_{13}C_{22} + 2C_{12}C_{13} \\
&\quad - C_{23}C_{32} + 2C_{32}C_{33} - C_{13}C_{32} - C_{12}C_{33}).
\end{aligned}$$

Неравенство (63₃) представляет собой форму третьей степени в первом октанте:

$$\begin{aligned}
&K_1^2(A_{XY}K_1^4 + 2B_{XY}K_1^2K_2^2 + C_{XY}K_2^4) + K_2^2(A_{YZ}K_2^4 + 2B_{YZ}K_2^2K_3^2 + C_{YZ}K_3^4) \\
&+ K_3^2(A_{XZ}K_1^4 + 2B_{XZ}K_1^2K_3^2 + C_{XZ}K_3^4) + D_{XYZ}K_1^2K_2^2K_3^2 > 0,
\end{aligned} \tag{66}$$

где

$$\begin{aligned}
A_{XY} &= C_{11}C_{21}C_{31}, \\
B_{XY} &= 0.5(-C_{66}^2C_{31} + C_{12}C_{21}C_{31} + C_{11}C_{21}C_{32} + C_{11}C_{22}C_{31}), \\
C_{XY} &= C_{12}C_{21}C_{32} + C_{12}C_{22}C_{31} + C_{11}C_{22}C_{32} - C_{66}^2C_{32}, \\
A_{XZ} &= C_{11}C_{21}C_{33} - C_{55}^2C_{21} + C_{13}C_{21}C_{31} + C_{11}C_{23}C_{31}, \\
B_{XZ} &= 0.5(-C_{55}^2C_{23} + C_{11}C_{23}C_{33} + C_{13}C_{21}C_{33} + C_{13}C_{23}C_{31}), \\
C_{XZ} &= C_{13}C_{23}C_{33}, \\
A_{YZ} &= C_{12}C_{22}C_{32}, \\
B_{YZ} &= 0.5(C_{12}C_{23}C_{32} + C_{13}C_{22}C_{32} + C_{12}C_{22}C_{33} - C_{12}C_{44}^2), \\
C_{YZ} &= C_{13}C_{22}C_{33} + C_{13}C_{23}C_{32} + C_{12}C_{23}C_{33} - C_{13}C_{44}^2,
\end{aligned}$$

$$D_{XYZ} = C_{12}C_{21}C_{33} + C_{13}C_{21}C_{32} + C_{13}C_{22}C_{31} - C_{66}^2C_{33} - C_{55}^2C_{22} \\ + C_{11}C_{23}C_{32} + 2C_{66}C_{55}C_{44} + C_{11}C_{22}C_{33} - C_{11}C_{44}^2 + C_{12}C_{23}C_{31}.$$

Критерий положительной определенности в виде неравенств для коэффициентов можно написать лишь для квадратичной формы (63₁).

Утверждение. Имеем однородное неравенство $P(x, y, z) > 0$ на положительном октанте. Можно сделать замену $z = 1 - x - y$, получить неоднородный многочлен $F(x, y)$ и исследовать его на положительность при $x > 0, y > 0, x + y < 1$.

Доказательство. Если $P(x, y, z)$ — однородный многочлен третьей степени, то $P(\lambda x, \lambda y, \lambda z) = \lambda^3 P(x, y, z)$, значит, если $P(x, y, z)$ положителен для какой-то точки (x, y, z) , то он положителен и для любой точки лучей $(\lambda x, \lambda y, \lambda z)$, при условии положительности λ . Если точка (x, y, z) лежит в первом октанте, уравнение $\lambda x + \lambda y + \lambda z = 1$ имеет единственное положительное решение $\lambda_* = \frac{1}{x+y+z}$. По предыдущему рассуждению $P(x, y, z) > 0 \Leftrightarrow P(\lambda_* x, \lambda_* y, \lambda_* z) > 0$, причем $\lambda_* z = 1 - \lambda_* x - \lambda_* y$. Значит, если сделать замену $\lambda_* z = 1 - \lambda_* x - \lambda_* y$, то $P(x, y, z) > 0$ при $x > 0, y > 0, z > 0 \Leftrightarrow F(\lambda_* x, \lambda_* y) > 0$ при $\lambda_* x > 0, \lambda_* y > 0, \lambda_* x + \lambda_* y < 1$.

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

Напишем достаточные условия, разбив (65), (66) на квадратичные формы в первых квадрантах. Условия (31) положительной определенности таких форм были получены в предыдущей части работы. Ясно, что часть устойчивых точек в трехмерном пространстве деформаций $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ мы потеряем, если ограничимся достаточными условиями. Поэтому будет применять метод Монте-Карло там, где, с одной стороны, достаточные условия показывают неустойчивость, с другой, слабое необходимое, вытекающее из (64), показывает устойчивость.

Теперь построим область устойчивости, подставив (60) и (1) в неравенства (64)–(66). Черным цветом выделена область, построенная по достаточным условиям, красным — добавочная область, полученная методом Монте-Карло. Максимальное гидростатическое сжатие составляет примерно 75%. В работе [28] рассчитанная потеря устойчивости ГЦК фазы наступает при меньших деформациях, что несомненно связано с выбором закона взаимодействия. В плоском случае этот эффект продемонстрирован при изменении лишь одного параметра потенциала (рис. 7). Потенциал Леннарда-Джонса (1) так же, как и в двумерной задаче, обеспечивает возможность неограниченного гидростатического сжатия материала, что представляется нефизичным.

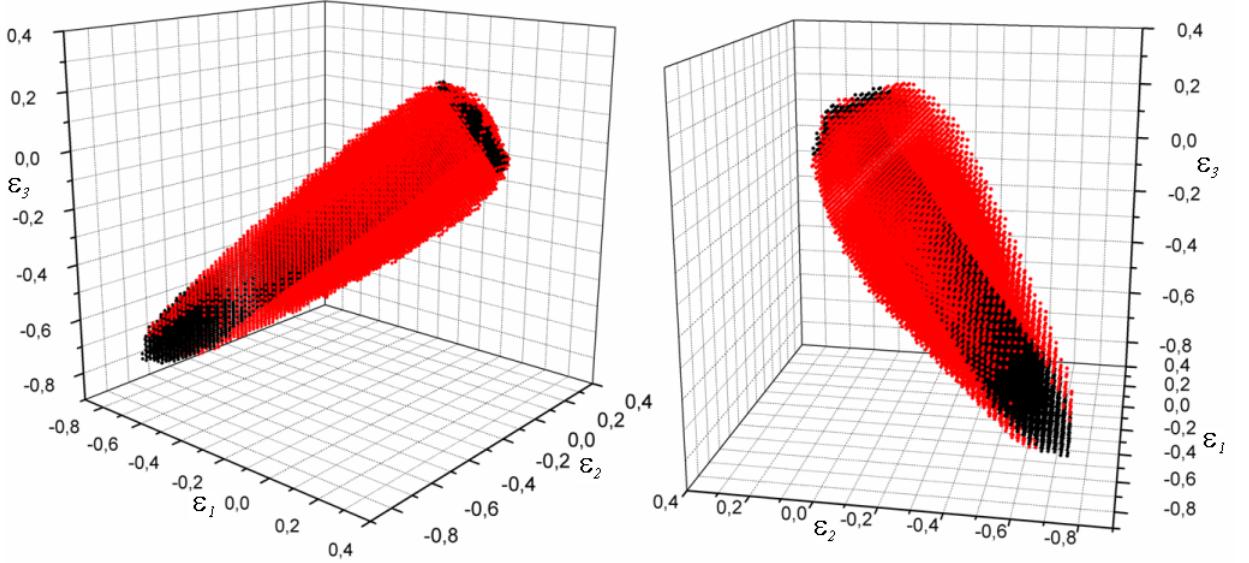


Рис. 28: Область устойчивости ГЦК решетки

5.3 Молекулярно-динамическое моделирование

Так же, как и при изучении треугольной решетки, для проверки полученных результатов было проведено молекулярно-динамическое моделирование. Для ускорения расчета применялся метод, при котором частица всегда “видит” только определенное число соседей. В отличие от двумерной задачи, расчет заканчиваем на 100000 шагов или по достижении уровня энергии, в 20 раз превышающего заданный на первом шаге, поскольку теоретически в пространстве деформаций была получена только одна область и отсутствуют такие спорные точки, как промежуточная квадратная конфигурация в треугольной решетке.

В данной работе были использованы следующие значения параметров: $m = 10^{-26}$ кг, $a = 1 \text{ \AA}$, $D = 10^{-20} \text{ Дж} = 0.062 \text{ эВ}$. Масса частиц примерно соответствует водороду или литию (гранецентрированная кубическая решетка). При моделировании использовалось около 27000 частиц. Радиус обрезания $a_{cut} = 1.8a$, чтобы учесть три координационные сферы. Начальная кинетическая энергия соответствует температуре $0.1K$.

На рис. 29 красным выделена теоретическая область устойчивости, зеленым обозначены точки, полученные при молекулярно-динамическом моделировании. Сделать какой-нибудь вывод о поведении системы в пограничной области затруднительно, так как в пространстве деформаций было рассмотрено всего 10^3 точек, тогда как аналитическая область построена по 100^3 точкам.

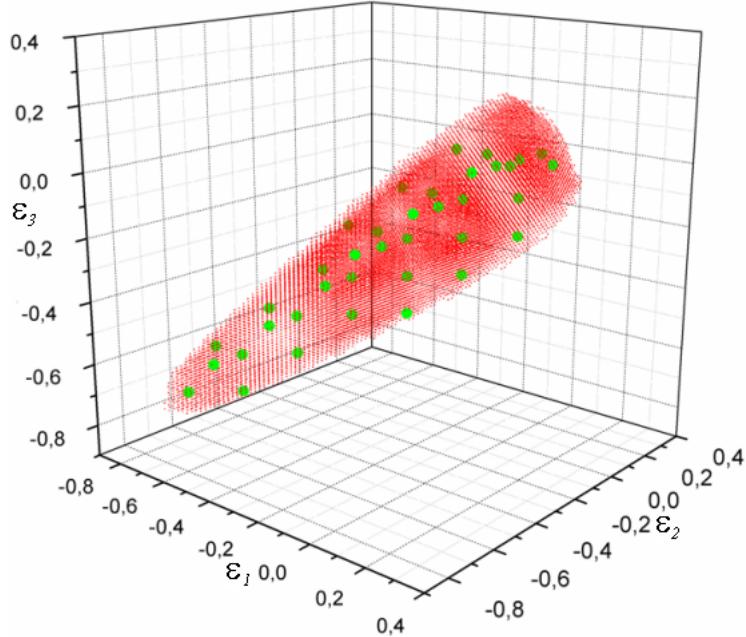


Рис. 29: Результаты молекулярно-динамического моделирования

6 Заключение

В данной работе проведено исследование устойчивости двумерной треугольной решетки при произвольной однородной деформации и гранецентрированной кубической решетки при растяжении и сжатии в ортогональных направлениях. Рассматриваются конечные деформации. Во введении указаны различия между континуальным и дискретным подходом к описанию нелинейного поведения материалов, обоснован выбор дискретного подхода и конкретного потенциала взаимодействия (рис. 1), описаны основные результаты, полученные предыдущими исследователями.

В первой части работы представлен алгоритм поиска областей устойчивости в пространстве деформаций, из волнового уравнения (22) получен критерий устойчивости.

Во второй части работы исследуется однородное деформирование треугольной решетки без учета сдвига (рис. 2). На основании критерия устойчивости (30, 31) построены области устойчивости (рис. 4), пояснено, что форма и количество областей определяются шириной потенциальной ямы (рис. 7). Приведена интерпретация границ областей устойчивости как в терминах коэффициентов уравнения (22), так и при помощи понятий модуля Юнга и модуля сдвига, которые не могут быть отрицательными в реально существующем материале. Замечено, что альтернативный способ получения областей устойчивости (требование положительности

модуля Юнга и модуля сдвига) дает полностью идентичный результат (рис. 14, 16). Потеря устойчивости при гидростатическом сжатии оказывается связанной с обращением в ноль модуля сдвига, что согласуется с результатами, полученными для ГЦК решетки в [28]. Был также построен ряд диаграмм одноосного нагружения, на которых четко видно, что, как только зависимость напряжения от деформации становится убывающей, происходит выход из области устойчивости (11). Отметим, что все исследование сводится к алгебраическим преобразованиям и в этой задаче результат можно получить буквально “на кончике пера” (критерием устойчивости является положительная определенность двух квадратичных форм, коэффициенты которых однозначно определяются начальными деформациями), что редко встречается в нелинейных задачах, особенно в континуальной механике.

Для дополнительной проверки достоверности полученных результатов был проведен вычислительный эксперимент. Строилась треугольная решетка в деформированном состоянии, частицам придавались малые случайные скорости. Если далее наблюдались ограниченные по амплитуде колебания кинетической энергии около половины заданного на первом шаге уровня, то делался вывод об устойчивости. Если наблюдался резкий рост кинетической энергии, то деформированная конфигурация признавалась неустойчивой, так как возрастание кинетической означает, что все большее количество частиц приобретает скорость, сравнимую со скоростью диссоциации. Результаты молекулярно-динамического моделирования практически полностью совпали с теоретическим анализом (рис. 21). Кроме того, установлена зависимость числа шагов интегрирования до потери устойчивости от начальной деформации (рис. 22). Временные затраты на такой способ исследования устойчивости несопоставимо больше, чем аналитический метод.

В третьей части в модель деформирования треугольной решетки добавляется сдвиг. Одна из квадратичных форм (48_2) становится однородной функцией четвертой степени, для которой не существует критерия положительности в виде неравенств для коэффициентов. Тем не менее, задачу удается решить (рис. 24). В качестве проверки была построена диаграмма чистого сдвига, которая меняет знак монотонности при выходе из области устойчивости (рис. 26).

В четвертой части работы исследуется ГЦК решетка. В трехмерном случае критерий устойчивости представляет собой положительность четырех однородных функций (63), лишь одна из которых есть квадратичная форма. Комбинация системы достаточных условий и простого перебора с учетом однородности функций позволяет достаточно быстро построить область устойчивости (рис. 28). Результаты молекулярно-динамического моделирования не противоречат этому выводу (рис. 29).

Отметим основные моменты, которые могут быть полезны при дальнейших или аналогичных исследованиях:

1. Вещественность скоростей распространения волн является необходимым, но не достаточным условием устойчивости.
2. Число рассматриваемых координационных сфер может повлиять на результат. В случае потенциалов Леннарда-Джонса и Морзе с параметром $\theta = 6$ число координационных сфер в плоской задаче должно быть не менее двух, в трехмерной — не менее трех. При изучении структур, отличных от рассмотренных в настоящей работе, и при использовании других потенциалов требуется провести дополнительное исследование.
3. При исследовании положительности однородного многочлена высокой степени на положительном ортанте следует по возможности разбить его на квадратичные формы, а методом перебора пользоваться там, где эти формы отрицательно-определенны, причем для ускорения и увеличения качества перебора нужно иметь в виду утверждение, приведенное в главе 5.
4. Для вычислительного эксперимента желательно выбирать такую глубину потенциальной ямы, чтобы жесткости связи при максимальном интересующем сжатии были порядка единицы, иначе может накопиться вычислительная ошибка.

В качестве направления дальнейших исследований перспективным представляется учет сдвигов в трехмерной задаче, поскольку именно со сдвигом связан фазовый переход гранецентрированной в объемноцентрированную кубическую решетку, например, в железе. После этого можно будет сделать вывод о том, какой потенциал лучше описывает этот фазовый переход и подобрать его параметры для различных металлов. Таким образом будет решена задача, аналогичная заданию удельной потенциальной энергии деформации в континуальной механике. Далее, можно модифицировать критерий устойчивости для случая сложных решеток (например, решетка титана при нормальных условиях — гексагональная плотноупакованная), а также для моментного или многочастичного взаимодействия (неплотноупакованные структуры, например, графен). Кроме того, интерес представляет введение в модель диссипации. Даже малая диссипация, внешняя или внутренняя, принципиально меняет уравнения движения и их решение. В работе автора [14] на примере системы двух однородных дисков, центры которых соединены безынерционным недеформируемым стержнем, показано, как введение в один диск внутренней диссипации, обусловленной изменением во времени поля

объемных (массовых) сил и сил инерции, приводит к перераспределению кинетического момента и, следовательно, к переходу к другому режиму движения, который невозможен в консервативной системе.

В заключение отметим, что результаты данной работы могут быть использованы для построения критериев разрушения. Поскольку кристаллические структуры являются анизотропными и материал по-разному сопротивляется деформированию в различных направлениях, то классические оценки, например, по эквивалентным или максимальным касательным напряжениям невозможны.

Автор выражает благодарность П.В. Ткачеву за советы при постановке задачи, аспиранту кафедры Теоретической Механики СПбГПУ А.Ю. Панченко за помощь при численном моделировании, старшему научному сотруднику ПОМИ им. В.А. Стеклова РАН к.ф.-м.н. Н.Е. Мневу за консультацию по однородным многочленам высших степеней и заведующему кафедрой Теоретической Механики СПбГПУ д.ф.-м.н. А.М. Кривцову за ценные замечания и поддержку.

7 Приложение А. Охрана труда

Основные нагрузки при выполнении данной работы: интеллектуальные, эмоциональные, зрительные, и, в меньшей степени, слуховые. Вся работа проводилась за персональным компьютером и за письменным столом, натурные эксперименты отсутствовали. Организация работы должна проводиться в этом случае согласно СниП 2.2.2/2.41340-03. По природе действия вредные и опасные факторы подразделяются на следующие группы:

- физические факторы: температура, влажность и подвижность воздуха, неионизирующие электромагнитные излучения (ультрафиолетовое, видимое, инфракрасное, лазерное, микроволновое, радиочастотное, низкочастотное), статическое, электрические и магнитные поля, ионизирующие излучения, производственный шум, вибрация (локальная, общая), ультразвук, аэрозоли преимущественно фиброгенного действия (пыли), освещенность (отсутствие естественного освещения, недостаточная освещенность, повышенная ультрафиолетовая радиация);
- химические факторы, в том числе некоторые вещества биологической природы (антибиотики, витамины, гормоны, ферменты);
- биологические факторы: патогенные микроорганизмы, микроорганизмы продуценты, препараты, содержащие живые клетки и споры микроорганизмов, белковые препараты;
- факторы трудового процесса, характеризующие тяжесть физического труда: физическая динамическая нагрузка, масса поднимаемого и перемещаемого груза, стереотипные рабочие движения, статическая нагрузка, рабочая поза, наклоны корпуса, перемещение в пространстве;
- факторы трудового процесса, характеризующие напряженность труда: интеллектуальные, сенсорные, эмоциональные нагрузки, монотонность нагрузок, режим работы.

В помещении лаборатории или кафедры на сотрудника, работающего с вычислительной техникой, могут негативно действовать следующие факторы:

- повышенная и пониженная температура воздуха;
- чрезмерная запыленность и загазованность воздуха;
- повышенная и пониженная влажность воздуха;
- недостаточная освещенность рабочего места;
- превышающий допустимые нормы шум;
- повышенный уровень ионизирующего излучения;
- повышенный уровень электромагнитных полей;
- повышенный уровень статического электричества;

- опасность поражения электрическим током;
- блеклость экрана дисплея;
- длительное пребывание в сидячем положении;
- гиподинамия;
- повышенные интеллектуальные и психо-эмоциональные нагрузки;
- ненормированный рабочий день.

7.1 Требования к вентиляции, отоплению и кондиционированию воздуха

Микроклимат производственных помещений — это климат внутренней среды этих помещений, который определяется действующими на организм человека сочетаниями температуры, влажности и скорости движения воздуха. Допустимые микроклиматические условия — это такие сочетания параметров микроклимата, которые при длительном и систематическом воздействии на человека могут вызвать напряжение реакций терморегуляции и которые не выходят за пределы физиологических приспособительных возможностей. При этом не возникает нарушений в состоянии здоровья, не наблюдаются дискомфортные теплоощущения, ухудшающие самочувствие и понижение работоспособности. Оптимальные параметры микроклимата в производственных помещениях обеспечиваются системами кондиционирования воздуха, а допустимые параметры — обычными системами вентиляции и отопления. Помещение кафедры является помещением категории 1а, то есть выполняются работы с интенсивностью энерготрат $58\text{--}77 \text{ Вт}/\text{м}^3$. Для создания и автоматического поддержания в лаборатории независимо от наружных условий оптимальных значений температуры, влажности, чистоты и скорости движения воздуха, в холодное время года используется водяное отопление, в теплое время года применяется кондиционирование воздуха. Кондиционер представляет собой вентиляционную установку, которая с помощью приборов автоматического регулирования поддерживает в помещении заданные параметры воздушной среды. Также одежда персонала должна соответствовать температурному режиму в помещении. Отопление, вентиляция и кондиционирование должны осуществляться согласно СНиП 2.04.05-91:

1. В холодные периоды года температура воздуха, скорость его движения и относительная влажность воздуха должны соответственно составлять: $22\text{--}24^\circ\text{C}$; $0.1\text{ м}/\text{с}$; $40\text{--}60\%$; температура воздуха может колебаться в пределах от 21 до 25°C .
2. То же в теплые периоды года: $23\text{--}25^\circ\text{C}$; $0.1\text{--}0.2 \text{ м}/\text{с}$; $40\text{--}60\%$; температура

воздуха может колебаться в пределах от 22 до 26°C.

3. Воздух, поступающий в помещения с ЭВМ, должен быть отчищен от загрязнений, в том числе от пыли и микроорганизмов. Запыленность воздуха не должна превышать требований 12.1.005-91.

7.2 Требования к уровням шума

Шум — беспорядочное сочетание различных по силе и частоте звуков. Эквивалентный (по энергии) уровень звука (дБА) непостоянного шума - уровень звука постоянного широкополосного шума, который имеет такое же среднеквадратичное звуковое давление, что и данный непостоянный шум в течение определенного интервала времени. Предельно допустимый уровень (ПДУ) шума — это уровень фактора, который при ежедневной (кроме выходных дней) работе, но не более 40 часов в неделю в течение всего рабочего стажа, не должен вызывать заболеваний или отклонений в состоянии здоровья, обнаруживаемых современными методами исследований в процессе работы или в отдаленные сроки жизни настоящего и последующих поколений. Соблюдение ПДУ шума не исключает нарушения здоровья у сверхчувствительных лиц. В нашем помещении источником шумовых помех могут стать вентиляционные установки, кондиционеры и др. Длительное воздействие этих шумов отрицательно сказываются на эмоциональном состоянии персонала. Шум ухудшает условия труда оказывая вредное действие на организм человека. Работающие в условиях длительного шумового воздействия испытывают раздражительность, головные боли, головокружение, снижение памяти, повышенную утомляемость, понижение аппетита, боли в ушах и т. д. Такие нарушения в работе ряда органов и систем организма человека могут вызвать негативные изменения в эмоциональном состоянии человека вплоть до стрессовых. Под воздействием шума снижается концентрация внимания, нарушаются физиологические функции, появляется усталость в связи с повышенными энергетическими затратами и нервно-психическим напряжением, ухудшается речевая коммуникация. Все это снижает работоспособность человека и его производительность, качество и безопасность труда. Длительное воздействие интенсивного шума (выше 80 дБА) на слух человека приводит к его частичной или полной потере. Для того, чтобы добиться допустимого уровня шума рекомендуется применять звукопоглощающее покрытие стен. Защиту от шума следует выполнять в соответствии с СН 2.2.4/2.1.8.562-96.

7.3 Требования к естественному и искусственному освещению для помещений вычислительных комнат

Освещённость — плотность светового потока по поверхности, на которую он падает. Правильно спроектированное и выполненное производственное освещение улучшает условия зрительной работы, снижает утомляемость, способствует повышению производительности труда, благотворно влияет на производственную среду, оказывая положительное психологическое воздействие на работающего, повышает безопасность труда и снижает травматизм. Недостаточность освещения приводит к напряжению зрения, ослабляет внимание, приводит к наступлению преждевременной утомленности. Чрезмерно яркое освещение вызывает ослепление, раздражение и резь в глазах. Неправильное направление света на рабочем месте может создавать резкие тени, блики, дезориентировать работающего. Существует три вида освещения: естественное, искусственное и совмещенное (естественное и искусственное вместе). Естественное освещение — освещение помещений дневным светом, проникающим через световые проемы в наружных ограждающих конструкциях помещений. Естественное освещение характеризуется тем, что меняется в широких пределах в зависимости от времени дня, времени года, характера области и ряда других факторов. Искусственное освещение применяется при работе в темное время суток и днем, когда не удается обеспечить нормированные значения коэффициента естественного освещения (пасмурная погода, короткий световой день). Освещение, при котором недостаточное по нормам естественное освещение дополняется искусственным, называется совмещенным освещением. Искусственное освещение подразделяется на рабочее, аварийное, эвакуационное, охранное. Рабочее освещение, в свою очередь, может быть общим или комбинированным. Общее — освещение, при котором светильники размещаются в верхней зоне помещения равномерно или применительно к расположению оборудования. Комбинированное — освещение, при котором к общему добавляется местное освещение. Работа, выполняемая с использованием вычислительной техники, имеют следующие недостатки: вероятность появления прямой блесткости, ухудшенная контрастность между изображением и фоном, отражение экрана. Недостаточность освещения приводит к напряжению зрения, ослабляет внимание, приводит к наступлению преждевременной утомленности. Чрезмерно яркое освещение вызывает ослепление, раздражение и резь в глазах. Неправильное направление света на рабочем месте может создавать резкие тени, блики, дезориентировать работающего. Согласно СНиП 23-05-95 освещение в помещениях, где располагается вычислительная техника, должно быть смешанным: естественным и искусственным. При выполнении зрительной работы категории средней точности к. е. о. должен быть

не ниже 4%. Искусственное освещение в помещениях следует осуществлять в виде комбинированной системы освещения с использованием люминесцентных источников света в светильниках общего назначения. В качестве источников должны использоваться люминесцентные лампы типа ЛБ и ДРЛ с индексом цветопередачи ($R > 70$). В качестве светильников должны использоваться установки с преимущественно отраженным или рассеянным светораспределением (тип УСП-5-2x40, УСП-35-2x40, ЛВ003-2x40-002). Величина освещенности при искусственном освещении люминесцентными лампами должна быть в горизонтальной плоскости не ниже 300лк — для системы общего освещения и не ниже 750лк — для системы комбинированного освещения, причем с учетом работы категории высокой зрительной точности может быть увеличена до 1000лк. Для исключения бликов отражения на экранах от светильников общего назначения необходимо применять антибликовые сетки, специальные фильтры для экранов, защитные козырьки и т.п.

7.4 Пожарная безопасность при работе с вычислительной техникой

Пожарная безопасность — это состояние защищенности личности, имущества, общества и государства от пожаров. Пожар — это неконтролируемое горение, причиняющее материальный ущерб, вред жизни и здоровью граждан, интересам общества и государства. Определение категорий помещений осуществляется на стадии проектирования путем последовательной проверки принадлежности к категориям, установленным нормативными документами (НПБ 105-95). Причинами взрывов и пожаров часто являются электрооборудование и электрические сети. Опасность загорания в ЭВМ связана со значительным количеством плотно расположенных на монтажных платах и блоках: электронных узлов и схем, электрических и коммутационных кабелей, резисторов, конденсаторов, полупроводниковых диодов и транзисторов. Высокая плотность элементов в электронных схемах приводит к значительному повышению температуры отдельных узлов ($80 - 200^{\circ}\text{C}$), что может служить причиной воспламенения изоляционных материалов. В связи с этим в помещениях вычислительного центра должны быть предусмотрены возможные пути эвакуации персонала. Требования к количеству, размерам и размещению эвакуационных выходов, лестниц и лестничных клеток установлены СНиП 2.01.02-85, а именно:

1. Эвакуационные выходы должны располагаться рассредоточено. Минимальное расстояние l между наиболее удаленными один от другого эвакуационными выходами из помещения следует определять по формуле: $l = \sqrt{P}$, где

P — периметр помещения.

2. Ширина путей эвакуации в свету должна быть не менее 1м, дверей- не менее 0.8м.
3. Высота прохода на путях эвакуации должна быть не менее 2м.
4. Не допускается устройство винтовых лестниц, забежных ступеней, раздвижных и подъемных дверей и ворот, а также вращающихся дверей и турникетов.
5. Двери на путях эвакуации должны открываться по направлению выхода из здания.
6. Наружные эвакуационные двери зданий не должны иметь запоров, которые не могут быть открыты изнутри без ключа.

7.5 Требования электробезопасности

Для питания ЭВМ служит трехфазная электросеть с напряжением 380/220В и частотой 50Гц. Помещение, в котором располагался вычислительный центр, относится к помещениям без повышенной опасности (ГОСТ 12.1.013), поэтому защитное заземление не применялось (ГОСТ 12.1.030). При этом обслуживающий персонал должен допускаться до работы только после инструкции по технике безопасности. Изолирующие корпуса терминалов обеспечивают недоступность токоведущих частей, находящихся под напряжением.

7.6 Эргономические требования

Настоящий стандарт ГОСТ Р ИСО 9241-5-2009 устанавливает руководящие принципы, применяемые при формировании требований пользователей, а также при разработке проекта и установке оборудования рабочих станций, предназначенных для проведения офисных работ с применением видеодисплейных терминалов. Общие принципы и требования, установленные в настоящем стандарте, следует учитывать при разработке стандартов, устанавливающих требования к конструкции офисной мебели и оборудования рабочего места оператора. Под рабочим местом понимается зона, оснащенная необходимыми техническими средствами, в которой совершается трудовая деятельность исполнителя или группы исполнителей, совместно выполняющих одну работу или операцию. Конструкция рабочего места должна обеспечивать быстроту, безопасность, простоту и экономичность технического обслуживания в нормальных и аварийных условиях; полностью отвечать

функциональным требованиям и предполагаемым условиям эксплуатации. Конструкция рабочего стола должна обеспечивать оптимальное размещение на рабочей поверхности используемого оборудования с учетом его количества и конструктивных особенностей, характера выполняемой работы. Высота рабочей поверхности стола для взрослых пользователей должна регулироваться в пределах 680-800 мм; при отсутствии такой возможности высота рабочей поверхности стола должна составлять 725 мм. Конструкция рабочего стула (кресла) должна обеспечивать поддержание рациональной рабочей позы, позволять изменять позу с целью снижения статического напряжения мышц шейно-плечевой области и спины для предупреждения развития утомления. Тип рабочего стула (кресла) должен выбираться в зависимости от характера и продолжительности работы с учетом роста пользователя. Поверхность сиденья, спинки и других элементов стула (кресла) должна быть полумягкой, с нескользящим, неэлектризующимся и воздухонепроницаемым покрытием, обеспечивающим легкую очистку от загрязнений. Клавиатуру следует располагать на поверхности стола на расстоянии 100-300 мм от края, обращенного к пользователю, или на специальной, регулируемой по высоте рабочей поверхности, отделенной от основной столешницы.

7.7 Напряженность трудового процесса

Тяжесть трудового процесса в ходе работы над диссертацией можно отнести к оптимальному классу условий труда (легкая физическая нагрузка), основная нагрузка интеллектуальная, присутствует возможность гибкого графика работы, изменения рабочей позы. Классифицировать по степени напряженности выполняемую работу можно следующим образом: интеллектуальные нагрузки предполагают решение сложных задач с выбором по известным алгоритмам (напряженный труд 1-ой степени), а также эвристическую, творческую деятельность, требующую решения сложных задач при отсутствии алгоритма (напряженный труд 2-ой степени); большую часть времени работа проходит установленному графику с возможной его коррекцией по ходу деятельности (напряженный труд 1-ой степени); часто присутствует работа в условиях дефицита времени (напряженный труд 2-ой степени); сенсорные нагрузки (работа за экраном компьютера) присутствуют более четырех часов за рабочий день (напряженный труд 2-ой степени); фактическая продолжительность рабочего дня 8-9 часов (напряженность труда средней степени).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *И.Е. Беринский, Е.А. Иванова, А.М. Кривцов, Н.Ф. Морозов.* Применение моментного взаимодействия к построению устойчивой модели кристаллической решетки графена // Изв. РАН. МТТ. 2007. №5. С.6–16.
- [2] *М. Борн.* Динамика кристаллической решетки. – М., 1932.
- [3] *М. Борн, М. Гепнерт-Майер.* Теория твердого тела. – М.–Л., 1938.
- [4] *P.B. Гольдштейн, A.B. Ченцов.* Дискретно-континуальная модель нанотрубки // Изв. РАН. МТТ. 2005. №4. С. 57–74.
- [5] *Е.Л. Гурвич.* Условие Адамара в нелинейной теории упругости // Изв. АН СССР. МТТ. 1979. №1. С. 45–51.
- [6] *В.А. Еремеев, Л.М. Зубов.* Об устойчивости упругих тел с моментными напряжениями // Изв. РАН. МТТ. 1994. №3. С. 181–190.
- [7] *П.А. Жилин.* Векторы тензоры второго ранга в трехмерном пространстве. – СПб.: Нестор. 2001. 276 с.
- [8] *Е.А. Иванова, А.М. Кривцов, Н.Ф. Морозов.* Получение макроскопических соотношений упругости сложных кристаллических решеток с учетом моментных взаимодействий на микроуровне // Прикладная математика и механика. Т.71. Вып.4. 2007. С. 595–615.
- [9] Атомистика разрушения: Сб. статей 1983–1985 гг. Пер. с англ. / Сост. А. Ю. Ишлинский. – М.: Мир. 1987. 248 с.
- [10] *А.М. Кривцов.* Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. – М.: Физматлит. 2007. 304 с.
- [11] Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов // Под ред. А.М. Кривцова. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та. 2009. 144 с.
- [12] *А.И. Лурье.* Нелинейная теория упругости. – М.: Наука. 1980. 512 с.
- [13] *А.И. Лурье.* Теория упругости. – М.: Наука. 1970. 940 с.
- [14] *Е.А. Подольская, Б.А. Смольников.* Плоское эволюционное движение связки двух тел // Материалы лучших докладов XXXVIII Недели науки СПбГПУ.–СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2010. С. 124–126.

- [15] *E.A. Подольская, П.В. Ткачев, А.М. Кривцов.* Исследование устойчивости ГЦК решетки // XXXIX Неделя науки СПбГПУ: материалы международной научно-практической конференции. Ч. V. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та. 2010. С. 111–112.
- [16] *П.В. Ткачев, А.М. Кривцов.* Критерий устойчивости внутренней структуры материала // XXXIII Неделя науки СПбГПУ: материалы международной научно-практической конференции. Ч. V. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та. 2004. С. 4–6.
- [17] *П.Е. Товстик, Т.П. Товстик.* Модель двумерного графитового слоя // Вестник СПбГУ. Вып.3. 2009. С. 1–11.
- [18] *K. Трудсделл.* Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. – М.: Мир. 1975. 592 с.
- [19] *B.J. Alder, T.E. Wainwright.* Phase Transition for a Hard Sphere System // J. Chem. Phys. 1957. V.27. P. 1208–1209.
- [20] *M.P. Allen, A.K. Tildesley.* Computer Simulation of Liquids. – Oxford: Clarendon Press. 1987. 385 p.
- [21] *I.E. Berinskiy, A.M. Krivtsov, A.M. Kudarova.* Determination of macroscopic characteristics for graphene layer using angle-depending atomic interactions // Proc. of XXXVI Summer School “Advanced Problems in Mechanics”, St. Petersburg, Russia. 2008. P. 122–132.
- [22] *M. Born, K. Huang.* Dynamical Theory of Crystal Lattices. – Oxford: Clarendon Press. 1954. 420 p.
- [23] *T.J. Delph, J.A. Zimmerman.* Prediction of instabilities at the atomic scale // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2010. V.18. №4. 045008 (20pp).
- [24] *F. Ercolessi, M. Parrinello, E. Tosatti.* Simulation of gold in the glue model // Philosophical Magazine A. 1988. V.58. №1. P. 213–226.
- [25] *J.B. Gibson, A.N. Goland, M. Milgram, G.H. Vineyard.* Dynamics of Radiation Damage. // Phys.Rev. №120. 1960. P. 1229–1253.
- [26] *J. Hadamard.* Leçons sur la Propagation des Ondes et les Equations d’Hydrodynamique. Paris. 1903.

- [27] *R.W. Hockney, J.W. Eastwood.* Computer simulation using particles. – N.Y.: A.Hilger. 1988. 540 p.
- [28] *F. Milstein, D. Rasky.* Theoretical study of shear-modulus instabilities in the alkali metals under hydrostatic pressure // Phys. Rev. B. 1996. V.54. №10. P. 7016–7025.
- [29] *P.V. Tkachev.* Stability of particle triangle under compression // XXX Summer School “Advanced Problems in Mechanics”, St. Petersburg, Russia. June 27-July 6, 2002.
- [30] *L. Verlet.* Computer ‘experiments’ on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Phys. Rev. V. 159. 1967. P. 98–103.
- [31] *D.C. Wallace, J.L. Patrick.* Stability of crystal lattices // Phys. Rev. 1965. V.137. №1A. P. 152–160.
- [32] *J. Wang, J. Li, S. Yip, S. Phillpot, D. Wolf.* Mechanical instabilities of homogeneous crystals // Phys. Rev. 1995. V.52. №17B. P. 12627–12635
- [33] *J.A. Zimmerman, R.E. Jones, J.A. Templeton.* A material frame approach for evaluating continuum variables in atomistic simulations // J. Comp. Phys. 2010. V. 229. P. 2364–2389.