

ПАНЧЕНКО АРТЁМ ЮРЬЕВИЧ

**УСТОЙЧИВОСТЬ И ТЕПЛОВЫЕ ЭФФЕКТЫ В
КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ ПРИ БОЛЬШИХ
ДЕФОРМАЦИЯХ**

Специальность: 01.02.04 — механика деформируемого твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург — 2018

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Научный руководитель: **Кривцов Антон Мирославович**,
член-корреспондент РАН,
доктор физико-математических наук,
заведующий кафедрой «Теоретическая механика»

Официальные оппоненты: **Волков Александр Евгеньевич**,
доктор физико-математических наук,
ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский
государственный университет»
профессор кафедры «Теории упругости»

Корчуганов Александр Вячеславович,
кандидат физико-математических наук,
ФГБУН Институт физики прочности и
материаловедения СО РАН
научный сотрудник лаборатории
компьютерного конструирования материалов

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Институт
проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН

Защита состоится “_____” _____ 2018 г. в _____. ____ на заседании
диссертационного совета Д002.075.01 при Институте проблем машиноведения
РАН по адресу: 199178, Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., д. 61.

С диссертацией можно ознакомиться в ОНТИ Федерального государственного
бюджетного учреждения науки Институт проблем машиноведения Российской
академии наук и на сайте института по адресу <http://www.ipme.ru>

Автореферат разослан “_____” _____ 2018 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д002.075.01
доктор технических наук,
профессор

Владимир Васильевич Дубаренко

Актуальность темы.

Развитие технологических методов создания искусственных наноразмерных структур, таких как фуллерены, нанотрубки, нановолокна, графен, наноалмазы и т.п., приводит к необходимости описывать и проводить предсказательное моделирование поведения таких структур при различных термомеханических воздействиях. Важным методом, позволяющим детально изучить процессы на микро- и наноуровне, является метод молекулярной динамики. Круг задач, которые удается описать с помощью данного метода, ограничен прежде всего размером моделируемой системы, в особенности это справедливо для *ab initio* методов. Для решения этой проблемы применяются эмпирические потенциалы взаимодействия, уменьшающие вычислительную сложность алгоритмов, и моделирование континуальными методами отдельных областей системы, в которых не нарушается сплошность материала. Для применения методов сплошной среды в этом качестве необходимо составить уравнения состояния дискретной системы и определить условия нарушения сплошности или изменения структуры материала. На данном масштабном уровне монокристаллические элементы наноструктуры являются практически бездефектными, в связи с этим актуальным является исследование термомеханических свойств идеальных кристаллических структур, проведенное в данной работе. Отсутствие дефектов в монокристаллах существенно увеличивает их прочность, а устойчивость структуры может нарушаться до достижения критических напряжений вдоль пути деформирования, вследствие произвольных малых флуктуаций.

В настоящей работе проводится апробация и уточнение уравнения состояния и выражения для вычисления термомеханических напряжений в дискретной системе, частицы которой взаимодействуют посредством парного силового потенциала, что позволяет не только предсказывать поведение кристаллов и использовать аналитические методы для описания сред с микроструктурой, но и может применяться для определения параметров потенциалов. Применение метода молекулярной динамики для определения областей устойчивости в пространстве деформаций дало возможность сравнить полученные области с результатами аналитических расчетов и исследовать двухфазные состояния материала после потери устойчивости.

Таким образом, определение и предсказание термомеханических параметров материалов с дискретной структурой, а также границ устойчивости материала и параметров двухфазных состояний являются актуальными задачами механики деформируемого твердого тела.

Методика исследований. Исследования в данной диссертационной работе проводятся методами механики сплошной среды и методом молекулярной динамики. Движение частиц описывается законами классической механики. Определение макроскопических параметров системы проводится с использованием выражений, являющихся дискретными аналогами уравнений механики сплошной среды. Объектом исследования является идеальная кристаллическая решетка, в двумерном случае — треугольная и квадратная, в трехмерном — гранецентрированная и объемноцентрированная кубические решетки. Взаимодействие между частицами описывается парными силовыми потенциалами. Проводится сравнение результатов молекулярно-

динамического моделирования с аналитическими выражениями, полученными путем перехода с помощью длинноволнового приближения от дискретной системы к эквивалентному континууму и использования методов механики сплошной среды.

Цель работы. Целью данной работы является уточнение и получение области применимости аналитических выражений, связывающих макроскопические параметры сплошной среды (коэффициента Грюнайзена и области устойчивости кристаллической структуры) с параметрами межчастичного взаимодействия.

Научную новизну работы составляют следующие **результаты, выносимые на защиту**:

1. Методом динамики частиц определены области устойчивости треугольной решетки в пространстве конечных деформаций при парном силовом взаимодействии. Показано, что области устойчивости кристаллической решетки соответствуют областям сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентной сплошной среды.
2. Исследована микроструктура неоднородных состояний после потери устойчивости треугольной решетки, в том числе, при структурном переходе из треугольной в квадратную решетку. Выявлены механизмы релаксации энергии при структурном переходе.
3. Получены уточненные коэффициенты тензорного уравнения состояния Ми-Грюнайзена. Выяснена их зависимость от параметров моделирования, температуры и деформаций в устойчивых точках пространства конечных деформаций.

Достоверность полученных результатов. Достоверность полученных результатов достигается путем сравнения с экспериментальными данными, использованием апробированных методик моделирования, сравнения с аналитическими оценками для случаев, допускающих аналитическое исследование. Полученные в работе области устойчивости идеальной кристаллической решетки при парном силовом взаимодействии полностью соответствуют аналитически определенным областям сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентного континуума в пространстве деформаций. Двухфазные состояния, образующиеся после потери устойчивости, хорошо согласуются с оценками теории фазовых переходов. Полученное в работе уравнение состояния основано на широко используемом в механике деформируемого твердого тела уравнении состояния Ми-Грюнайзена. Показано соответствие функции Грюнайзена, полученной из макропараметров атомарной системы, аналитической оценке в широком интервале температур и напряженно-деформированных состояний.

Практическая значимость работы. Результаты данной работы могут быть использованы для идентификации параметров аналитических моделей в рамках механики деформируемого твердого тела и разработки эмпирических моделей, описывающих поведение дискретных систем. Сравнение полученных результатов с экспериментальными данными позволяет

оценить предполагаемые результаты молекулярно-динамического моделирования и определить применимость модели для описания системы, а в случае достаточной точности модели определить параметры потенциалов. Результаты работы могут быть использованы в пакетах прикладных программ, включающих в себя определение и задание граничных условий в теплофизических процессах, как дополнение выражений, позволяющих адаптировать элементы сплошной среды, описываемых континуальными уравнениями, с дискретной системой. Сравнение областей устойчивости кристаллической решетки при парном силовом взаимодействии и областей устойчивости реальных кристаллов позволяет упростить определение параметров потенциала (в частности в методе погруженного атома) для описания структурных переходов из плотноупакованной гранецентрированной кубической в объемноцентрированную кубическую решетку. Таким образом, результаты представленной работы могут быть использованы в разработке и создании оригинальных композитных материалов, обладающими высокими эксплуатационными характеристиками в широком диапазоне температур.

Апробация работы. Результаты работы докладывались на семинарах Института проблем машиноведения РАН (Санкт-Петербург), кафедры Теоретическая механика СПбПУ, Института гидродинамики им. Лаврентьева (Новосибирск), Физического факультета университета г. Севилья (Испания), а также на всероссийских и международных конференциях: Advanced Problems in Mechanics (г. Санкт-Петербург, 2012, 2013, 2014, 2015, 2016), Международная научная конференция по механике Шестые Поляховские чтения (г. Санкт-Петербург, 2012), 8th European Solid Mechanics Conference (Австрия, г. Грац, 2012), European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes (Испания, г. Севилья, 2013), Euromech 2014 Colloquium 563 (Италия, г. Чистерна-Ди-Латина, 2014), Advances in Micromechanics of Materials (Польша, г. Жешув, 2014), «Физическая мезомеханика многоуровневых систем, Моделирование, эксперимент, приложения» (г. Томск, 2014), XI Всероссийский съезд по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики (г. Казань, 2015), 24th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (Канада, г. Монреаль, 2016).

Исследования автора на различных этапах работы поддерживались: соглашением о предоставлении субсидии № 14.575.21.0146 от 26.09.2017, уникальный идентификатор ПНИ: RFMEFI57517X0146 (глава 2); грантами президента РФ (исполнитель МК-4873.2014.1, исполнитель МК-1820.2017.1), РФФИ (руководитель 12-01-31297-мол_а, исполнитель 13-01-12076-офи_м, 14-01-00802-а, 14-01-31487-мол_а) (глава 3).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 20 работ, в том числе 7 статей в изданиях из перечня ВАК. Список публикаций приведен в конце автореферата.

Структура и объем работы. Работа состоит из введения, трех глав и заключения. Работа содержит 104 страниц, 55 рисунков, список литературы содержит 119 наименований.

Во введении дана общая характеристика работы, обоснована актуальность, приведен обзор литературы, изложена методика исследования, пе-

речислены основные результаты, выносимые на защиту.

В **первой главе** приведены выражения эквивалентных термомеханических характеристик через микропараметры дискретной системы, описаны методы записи уравнений состояния и аналитических условий сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентного континуума. Обсуждаются методы вычисления коэффициента Грюнайзена для записи уравнения состояния и необходимость прямого моделирования для уточнения этих выражений. В данной главе описан вывод условий сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентного континуума для идеальных двумерных и трехмерных структур, которые во второй главе сопоставляются с условиями устойчивости, полученными прямым моделированием методом молекулярной динамики.

В **параграфах 1.1 и 1.2** представлены выражения (1), используемые для вычисления эквивалентных термомеханических макрохарактеристик дискретной среды: тензора напряжений Коши $\boldsymbol{\tau}$, удельной потенциальной U и удельной кинетической \tilde{K} энергии.

$$U = \frac{1}{2N} \sum_k \langle \Pi_k \rangle, \quad \tilde{K} = \frac{1}{2N} \sum_n m \langle v_n^2 \rangle, \quad \boldsymbol{\tau} = \frac{1}{2V} \sum_k \langle \mathbf{A}_k \rangle \langle \mathbf{F}_k \rangle, \quad (1)$$

где N — количество частиц, Π — силовой парный потенциал, $\langle \rangle$ — обозначение осреднения, которое проводится по пространству, затем по ансамблю, m — масса частиц, v_n — модуль вектора скорости частицы, вычисленной относительно центра масс системы, V — объем элементарной ячейки рассматриваемой решетки, \mathbf{A}_k — вектор, соединяющий отсчетную частицу и частицу с номером k в актуальной конфигурации, \mathbf{F}_k — сила, действующая на отсчетную частицу. При парном силовом взаимодействии $\mathbf{F}_k = \frac{\Pi'_k}{A_k} \mathbf{A}_k$, где $\Pi'_k = \Pi'(A_k)$, суммирование по повторяющемуся индексу не ведется. В работе используется потенциал Морзе (2), параметр αa позволяет изменять ширину потенциальной ямы и удовлетворить двум безразмерным механическим параметрам простой плотноупакованной решетки.

$$\Pi_k = D \left[e^{2\alpha(a-A_k)} - 2e^{\alpha(a-A_k)} \right], \quad (2)$$

В **параграфе 1.3** приведено описание условия сильной эллиптичности уравнений равновесия (3) (достаточное условие устойчивости) эквивалентного континуума, полученного в [2], которые в данной диссертационной работе сравниваются с областями устойчивости определенными методом молекулярной динамики в пространстве конечных деформаций.

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{E} \sum_k \frac{\Pi'_k}{A_k} \mathbf{A}_k \mathbf{A}_k + \sum_k \frac{1}{A_k^2} \left(\Pi''_k - \frac{\Pi'_k}{a_k} \right) \mathbf{A}_k \mathbf{A}_k \mathbf{A}_k \mathbf{A}_k \right) \cdot \cdot \mathbf{k} \mathbf{k} \quad (3)$$

$$\begin{cases} \text{tr } \mathbf{D} > 0 \\ \det \mathbf{D} > 0 \end{cases},$$

Здесь \mathbf{E} — единичный тензор, \mathbf{k} — произвольный волновой вектор.

В параграфе 1.4 представлены асимптотически точные выражения [1] для вычисления тензора напряжений Коши (4) и внутренней энергии (5) при наличии теплового движения, полученные Кузькиным В.А. и Кривцовым А.М.; движение частиц разделено на «быстрое» (тепловое) и «медленное» («холодное»), соответствующие величины обозначены символами $\tilde{}$ и $\hat{}$. Далее в диссертационной работе методом молекулярной динамики проводится уточнение коэффициентов уравнения и области их применимости.

$$\begin{aligned} \tilde{\tau} = & \frac{1}{4V} \sum_k \left(\frac{\Pi_k'''}{\widehat{A}_k^3} - 3 \frac{\Pi_k''}{\widehat{A}_k^4} + 3 \frac{\Pi_k'}{\widehat{A}_k^5} \right) \widehat{\mathbf{A}}_k \widehat{\mathbf{A}}_k \widehat{\mathbf{A}}_k \widehat{\mathbf{A}}_k \cdot \cdot \langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle + \\ & + 2 \left(\frac{\Pi_k''}{\widehat{A}_k^2} - \frac{\Pi_k'}{\widehat{A}_k^3} \right) \widehat{\mathbf{A}}_k \mathbf{E} \widehat{\mathbf{A}}_k \cdot \cdot \langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle + \left(\frac{\Pi_k''}{\widehat{A}_k^2} - \frac{\Pi_k'}{\widehat{A}_k^3} \right) \widehat{\mathbf{A}}_k \widehat{\mathbf{A}}_k \mathbf{E} \cdot \cdot \langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle \end{aligned} \quad (4)$$

$$\tilde{U} = \frac{1}{2} \sum_k \left(\frac{\Pi_k''}{\widehat{A}_k^2} - \frac{\Pi_k'}{\widehat{A}_k^3} \right) \widehat{\mathbf{A}}_k \widehat{\mathbf{A}}_k \cdot \cdot \langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle + \frac{\Pi_k'}{\widehat{A}_k} \mathbf{E} \cdot \cdot \langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle \quad (5)$$

где $A_k = |\mathbf{A}_k|$, $\mathbf{A}_k = \widehat{\mathbf{A}}_k + \tilde{\mathbf{A}}_k$, причем $\widehat{\mathbf{A}}_k = \langle \mathbf{A}_k \rangle$ в состоянии термодинамического равновесия.

Вторая глава посвящена исследованию устойчивости простых кристаллических решеток. Приводится алгоритм определения устойчивости кристаллической структуры методом молекулярной динамики. Изучено поведение тензора жесткости и упругих характеристик кристаллической решетки в пространстве конечных деформаций. Исследовано поведение кристалла после потери устойчивости и переход к двухфазной структуре материала.

В параграфах 2.1–2.4 приведены результаты вспомогательных расчетов, позволяющие выбрать радиус обрезания потенциала ($\Pi(A_k > a_{\text{cut}}) = 0$), положение ненапряженной решетки в пространстве деформаций при учете взаимодействия с более чем одной координационной сферой, оценить энергию ненапряженного состояния и оценить время, за которое происходит перераспределение начальной кинетической энергии в тепловую часть потенциальной энергии.

В параграфе 2.5 приведено описание моделируемой системы. Устойчивость каждой точки в пространстве деформаций исследуется независимо, до начала расчета на образец накладывается однородная деформация, таким образом мы разделяем устойчивость структуры кристалла при конечной деформации и влияние скоростных и усталостных характеристик нагружения. Начало координат в пространстве деформаций соответствует ненапряженной решетке. Размер образца выбирается для каждого деформированного состояния, так чтобы после наложения однородной деформации система была больше $3a_{\text{cut}}$ вдоль декартовых осей. Для треугольной и квадратной решетки ось абсцисс направлена вдоль связи, для гранецентрированной кубической (ГЦК) вдоль оси кубической симметрии. По всем напряжениям используются периодические граничные условия. Частицы взаимодействуют посредством парного центрального потенциала Морзе, уравнения движения частиц интегрируются методом Верле. Шаг по времени для каждой деформации

рассчитывается отдельно, как $0.01T_0$, где T_0 — период колебания пары частиц с максимальной жесткостью связи при данной деформации. Средняя кинетическая энергия приходящаяся на частицу в начальный момент времени составляет $1 \cdot 10^{-5}D$ (D — глубина потенциальной ямы). Далее происходит перераспределение энергии и поскольку система консервативна, кинетическая энергия может превзойти начальный уровень только при наличии неоднородного состояния с меньшей потенциальной энергией, таким образом, критерием устойчивости было выбрано $\tilde{K} < (1 + \varepsilon) \tilde{K}^0$. Параметр $\varepsilon = 10^{-5}$ компенсирует возможную вычислительную погрешность чисел с двойной точностью.

В параграфе 2.6 построены области устойчивости треугольной решетки в пространстве конечных деформаций. При наличии только осевых деформаций получаем три области устойчивости соответствующие областям сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентной сплошной среды (рис.1), частицы взаимодействуют посредством потенциала Морзе ($\alpha a = 6$), в недеформированной решетке учитывается взаимодействие 3 координационных сфер.

Две большие области соответствуют двум ориентациям треугольной решетки, маленькая область — устойчивая деформированная квадратная решетка (рис.2 переходы «в» и «а»).

Кроме того, исследовано влияние параметра отвечающего за ширину потенциальной ямы (αa), показано, что он практически не влияет на вид областей устойчивости треугольной решетки, но при его увеличении существенно увеличивается область устойчивости квадратной решетки, принимая форму эллипса, а при уменьшении квадратная решетка становится полностью неустойчивой. Изменение радиуса обрезания (a_{cut}), также оказывает существенное влияние только на область устойчивости квадратной решетки. При учете взаимодействия только с первой координационной сферой область устойчивости квадратной решетки существенно больше, и принимает вид трапеции, переход от двух к учету трех координационных сфер не изменяет вид области, немного ее смещая в вдоль линии гидростатического растяжения треугольной решетки. Если частицы могут выходить из плоскости решетки, то треугольная решетка становится неустойчивой при произвольно малом сжатии. Приведенные на рис.2 переходы «б» и «г» создают дополнительные области устойчивости при учете сдвига.

В параграфе 2.7 исследован мгновенный тензор жесткости и мгновенные упругие модули треугольной и квадратной решетки в пространстве деформаций. Компоненты тензора жесткости определялись по формуле (6) путем наложения малой дополнительной деформации на конечную, с целью увеличения точности использовался метод центральных разностей, шаг малой деформации был выбран $\Delta\varepsilon_{kl} = 10^{-5}$.

$$\frac{\Delta\tau_{ij}}{\Delta\varepsilon_{kl}} = C_{ijkl} \quad (6)$$

Было получено, что внешние границы областей устойчивости треугольной решетки соответствуют обращению в ноль модулей сдвига, внутренние границы — обращению в ноль модулей Юнга, при гидростатическом растя-

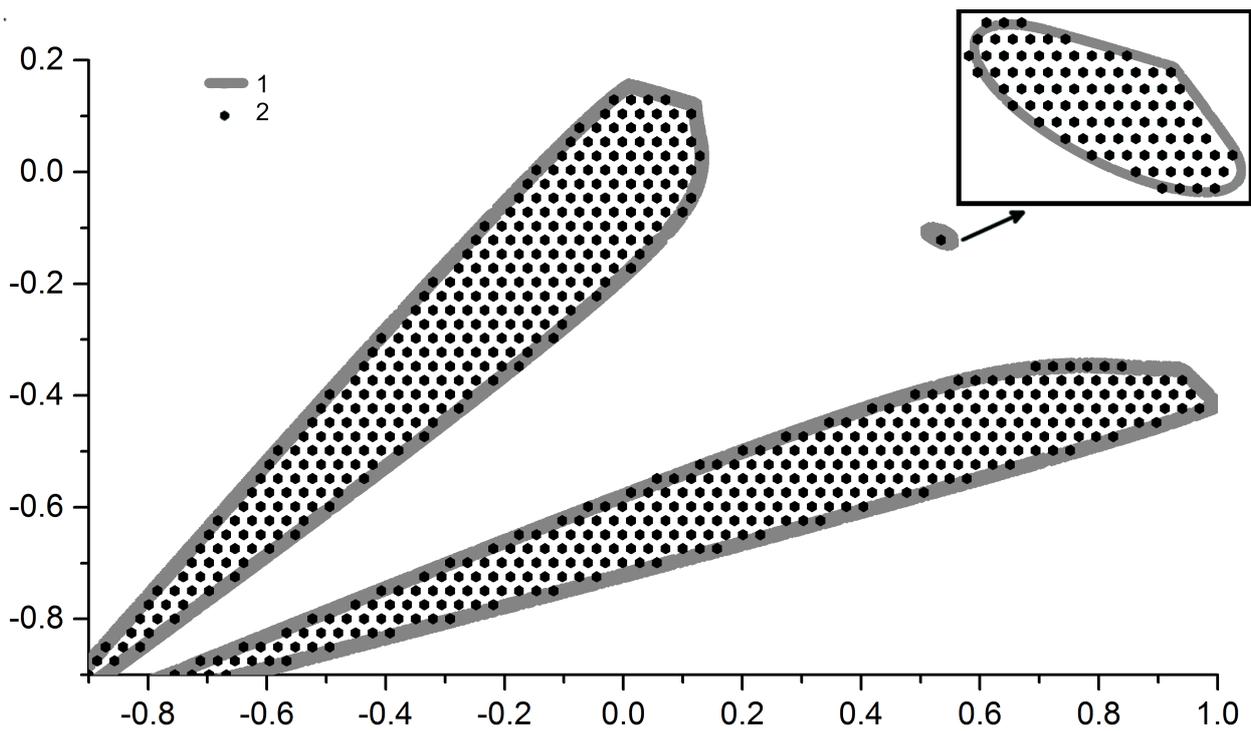


Рис. 1: Области устойчивости треугольной решетки при осевых деформациях. Номером 1 (серая линия) обозначена граница области сильной эллиптичности уравнений равновесия, номером 2 (черные точки) – устойчивые точки, полученные молекулярнодинамическим моделированием.

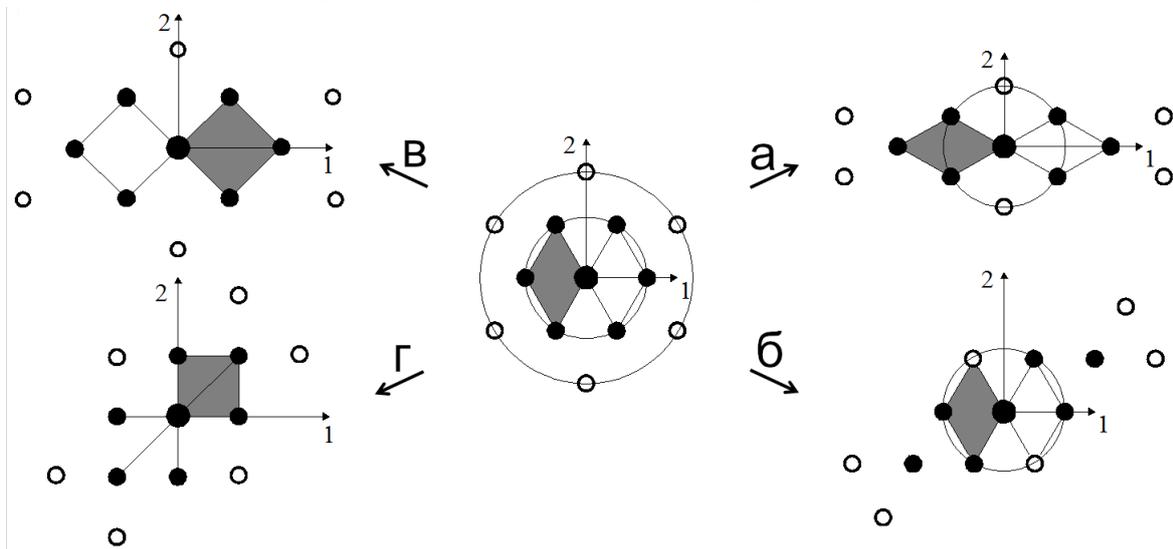


Рис. 2: Переход между устойчивыми структурами двумерной решетки [2]. Цветом точек обозначены координационные сферы: 1 – черный, 2 – белый. Переходы: а – к вертикальной ориентации треугольной решетки, б – получение треугольной решетки при сдвиге, в – к квадратной решетке, г – к квадратной решетке при сдвиге.

жении на границе отрицателен модуль объемного сжатия.

В параграфе 2.8 исследована структура решетки после потери устойчивости и релаксации к новому равновесному положению. Поскольку система является консервативной, то потеря устойчивости сопровождается нагревом образца. Поэтому далее была проведена релаксация системы к новому устойчивому состоянию и затем медленное охлаждение путем введения диссипативного коэффициента. Расчеты показали, что $500T_0$ достаточно для формирования новой равновесной микроструктуры. После этого образец медленно «охлаждался», с помощью диссипативной силы с коэффициентом диссипации ν , который зависит от средней кинетической энергии:

$$\nu = \nu_0 \left(\nu_A - \frac{\nu_B E_k^2}{E_k^2 + \nu_C} \right), \quad (7)$$

где параметр $\nu_0 = 2\sqrt{mC}$ — критический коэффициент затухания, C — жесткость связи между частицами и $\nu_A = 0.3$, $\nu_B = 0.255$, $\nu_C = 0.01D$ — некоторые константы, выбранные таким образом, чтобы минимизировать время охлаждения и в то же время обеспечить достаточную подвижность частиц для структурной перегруппировки. Когда значение средней кинетической энергии на частицу становится меньше $D \cdot 10^{-3}$, скорости частиц уменьшаются в десять раз каждые $50T_0$, так как при этом значении кинетической энергии структура материала остается неизменной. Предполагается, что процесс формирования новой структуры завершился, когда значение средней кинетической энергии становится меньше $D \cdot 10^{-4}$ в пределах $50T_0$. В данном случае, в начальный момент времени, на систему были наложены дополнительные «неоднородные» возмущения: в центре образца выбирается круг в четверть площади образца; частицам внутри этого круга, задается случайная скорость со средней кинетической энергией, приходящейся на частицу, равная $0.1D$. Были рассмотрены точки в пространстве деформаций вдоль прямой соединяющей ненапряженную треугольную решетку и устойчивую квадратную решетку, в которых нарушается устойчивость решетки. Вид микроструктуры после релаксации определяется случайным начальным распределением скоростей, однако интегральные характеристики, такие как энергия, доля различных фаз будут изменяться в незначительных пределах. На рис. 3 показаны энергия системы до релаксации неустойчивости (пунктир) и после. Соответствующие микроструктуры, отмеченные точками А, Б, В показаны на рис. 4, 5 и 6, соответственно.

Как видно из рис. 4 домены с различными ориентациями треугольной решетки разделены микротрещинами или тонкими слоями квадратной фазы, также можно наблюдать дислокации. С ростом деформации доля квадратной решетки растет (рис. 5), а количество и размер зерен с треугольной решеткой уменьшаются, образуя фактически аморфную структуру. Таким образом, изменяется механизм релаксации энергии с преобладания двойникования на фазовый переход с увеличением доли новой фазы. В точке В (рис. 6) мы видим зерна квадратной фазы, разделенные тонкими слоями треугольной решетки, образованные частичными дислокациями.

В параграфе 2.9 приведена, полученная область устойчивости границентрированной кубической (ГЦК) решетки при деформировании вдоль осей

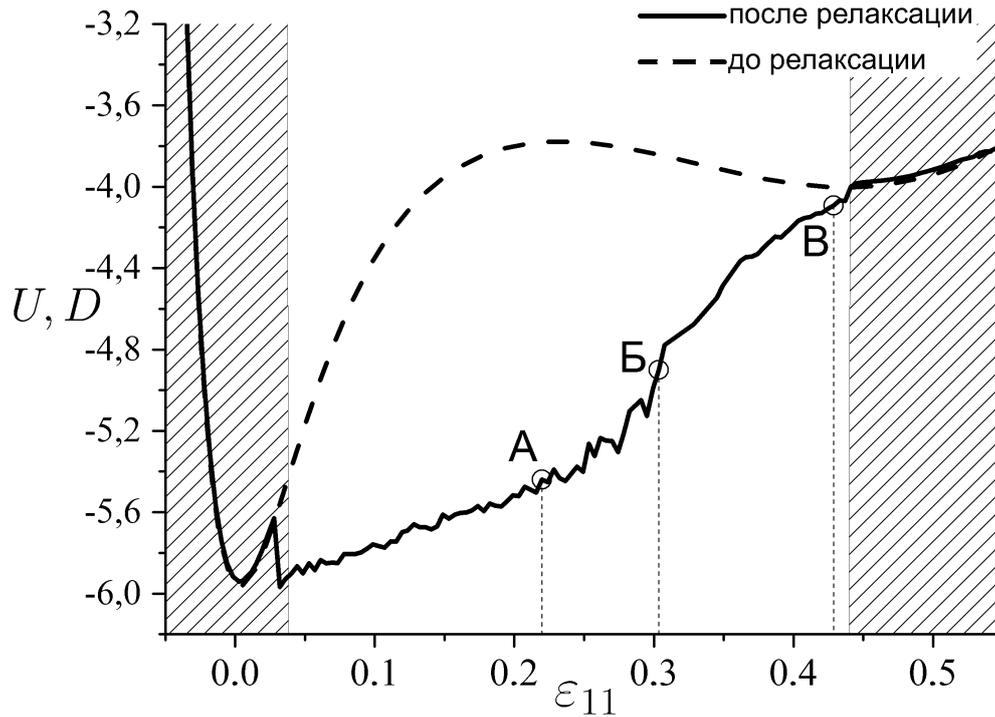


Рис. 3: Фазовый переход из треугольной в квадратную решетку. Потенциальная энергия до (пунктир) и после (жирная) релаксации. Зоны сильной эллиптичности заштрихованы. Потенциал Морзе, $\alpha a = 20$.

кубической симметрии, она представляет собой вытянутое трехгранное тело, которое при сжатии соединяется с тремя областями (в силу симметрии) устойчивой сжатой объемноцентрированной кубической (ОЦК) решетки. И в **параграфе 2.10** показаны области в пространстве деформаций, в которых упругие модули отрицательны.

В **главе 3** методом молекулярной динамики исследуются тензорные свойства уравнения состояния Ми-Грюнайзена в двумерных телах с кристаллической структурой. Аналитически показано, что тензорная функция Грюнайзена существенно зависит от соотношения собственных чисел тензора деформационной температуры, который в данной работе определяется численно.

В **параграфе 3.1** вводится величина, называемая тензором деформационной температуры $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle$, который позволяет получить уравнение состояния и вычислить значение внутренней энергии (5) и тензора тепловых напряжений (4).

Вычисляется средний тензор деформационной температуры $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle$, характеризующий деформирование связи в следствии теплового движения для треугольной и квадратной решеток. Показано, что декартовы оси, выбранные вдоль и перпендикулярно связи являются собственными векторами тензора. Все компоненты тензора $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle$ быстро (в течении нескольких периодов T_0) приходят к равновесному значению, на которое накладываются высокочастотный шум и среднеквадратичное отклонение составляет 1.4%. Отношение диагональных компонент:

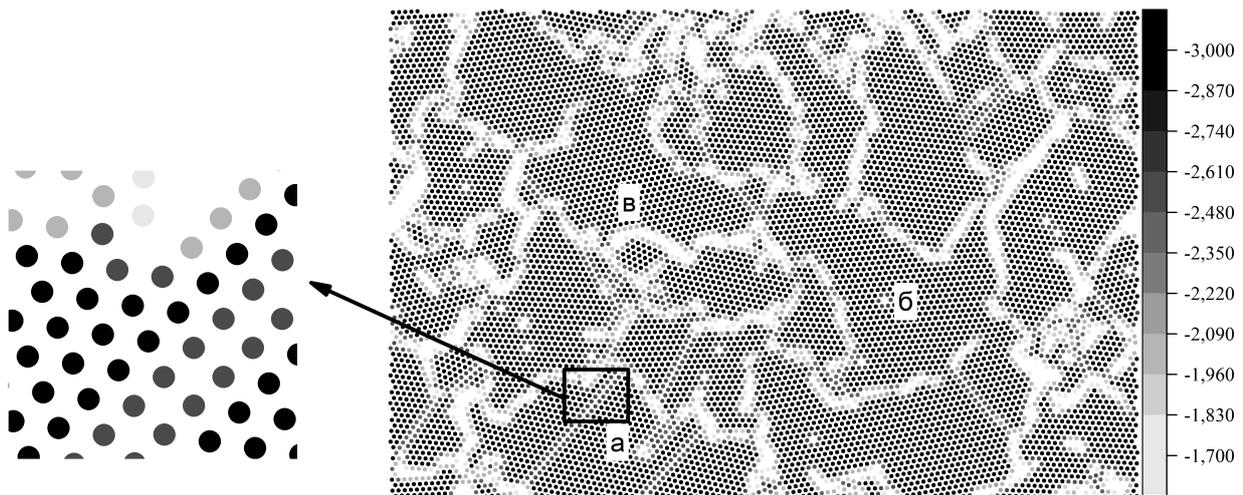


Рис. 4: Микроструктура неустойчивой точки А (см. рис. 3). Потенциал Морзе, $\alpha a = 20$. (а) Треугольная решетка, разделенная тонкими слоями квадратной, (б) вакансии, (в) микротрещины.

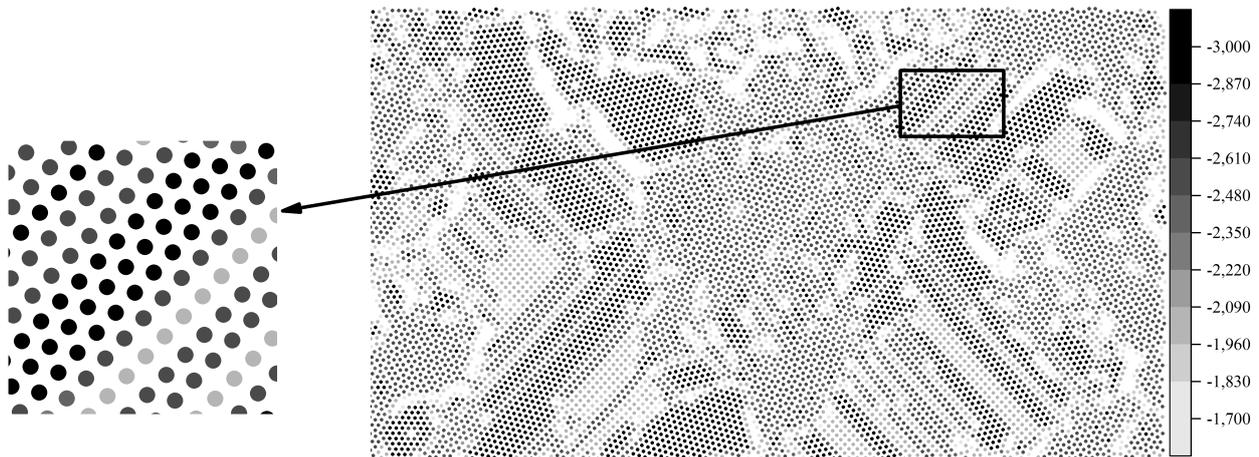


Рис. 5: Двухфазная микроструктура неустойчивой точки Б (см. рис. 3). Потенциал Морзе, $\alpha a = 20$. Появление зон с аморфной структурой.

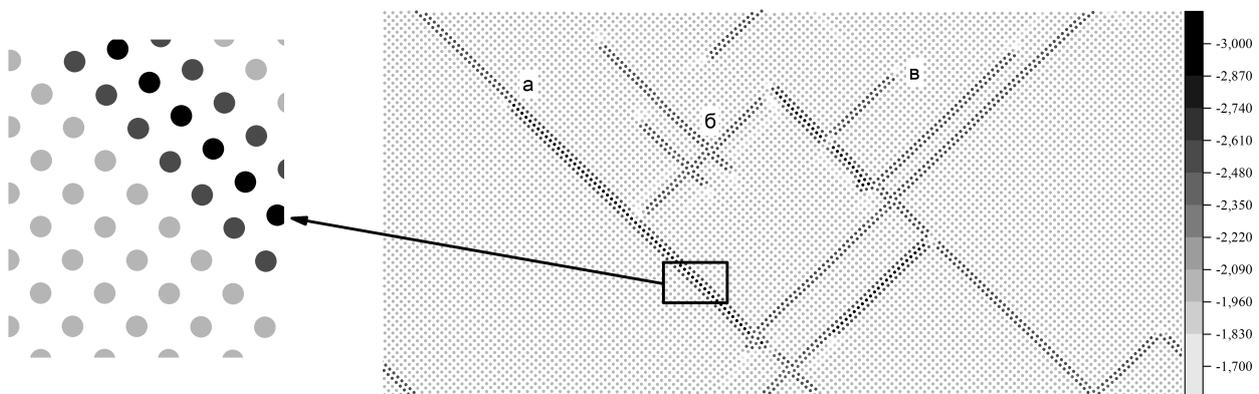


Рис. 6: Микроструктура неустойчивой точки В (см. рис. 3). Потенциал Морзе, $\alpha a = 20$. (а) Зерна квадратной фазы, разделенные полосами сдвига с треугольной структурой, (б) вакансии на пересечении двух полос сдвига, (в) вакансии на окончаниях полосах сдвига.

$$\Theta_0 = \frac{\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{yy}}{\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{xx}} = 1.435. \quad (8)$$

Тогда выражение для функции Грюнайзена можно привести к виду:

$$\Gamma = -\frac{1}{2N\hat{A}^2} \frac{\hat{A}^2 \hat{\Pi}''' + \Theta_0 \hat{A} \hat{\Pi}'' - \Theta_0 \hat{\Pi}'}{\hat{A} \hat{\Pi}'' + \Theta_0 \hat{\Pi}'} \sum_k \hat{\mathbf{A}}_k \hat{\mathbf{A}}_k, \quad (9)$$

где N — количество частиц на первой координационной сфере.

Величина Γ_e определяется непосредственно из формулы (10):

$$\Gamma_e = -\frac{V}{\tilde{U}} \tilde{\tau}, \quad (10)$$

В параграфе 3.2 исследовано влияние параметров моделирования на отношение Θ , и обнаружено, что на значение Θ не оказывают влияние ни размер системы, ни тип парных центральных потенциалов (рассматривались потенциал Морзе, гармонический потенциал и потенциал Леннард-Джонса), ни учет взаимодействия со следующими координационными сферами. Увеличение интенсивности теплового движения в 10 раз приводит, как показано на рис. 7, к незначительному росту Θ на 4.5%.

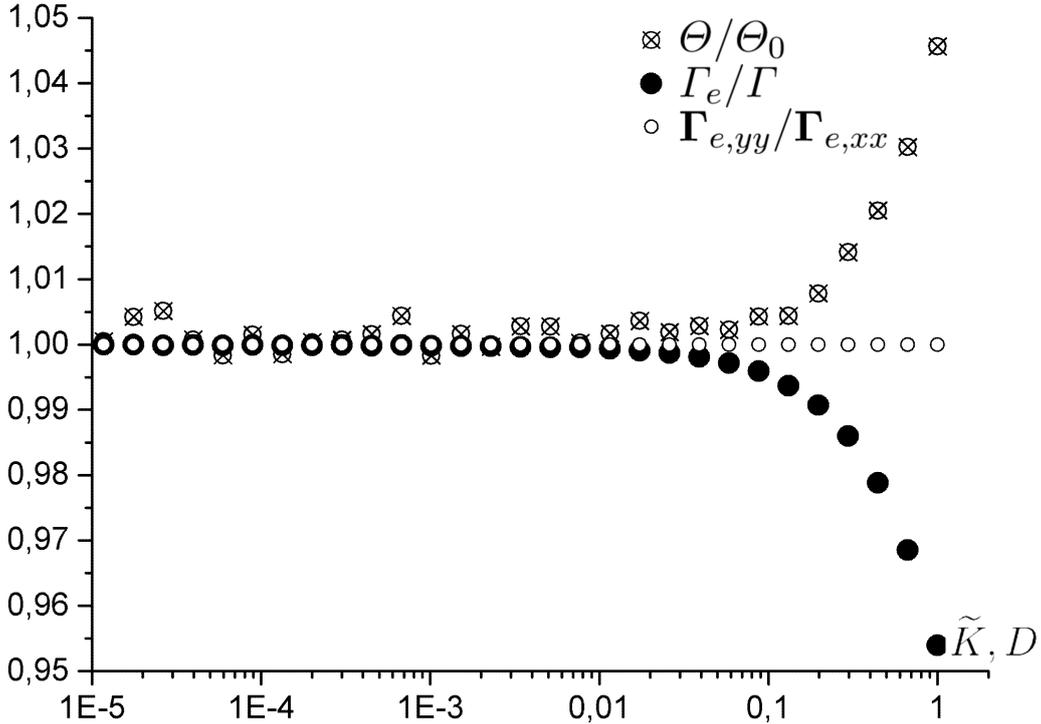


Рис. 7: Зависимость от средней кинетической энергии, приходящейся на частицу (в единицах D), в начальный момент времени отношений: \otimes — диагональных компонент деформационной температуры Θ (в единицах Θ_0), \bullet — шаровых частей функций Грюнайзена Γ_e (10) и Γ (9), \circ — диагональных компонент функции Грюнайзена Γ_e

Показано, что отклонение шаровой части Γ тензорной функции Грюнайзена (9) от Γ_e , полученной в ходе численного эксперимента, также не

превышает 4.5%; для уменьшения погрешности требуется учет следующих членов в разложении по деформационной температуре.

Установлено, что только при наличии конечной однородной деформации возникает ярко выраженное изменение соотношения диагональных компонент тензора деформационной температуры, и функции Грюнайзена. На рис. 8а и 8б приведены графики зависимости этих величин от ε_x для объемной деформации и деформации формоизменения; ε_x и ε_y — линейные части тензора деформаций Коши—Грина, оси x и y соответствуют направлениям вдоль связи с ближайшим соседом отсчетной частицы и перпендикулярно ей. Растяжение решетки вдоль гидростатической линии (рис. 8а) приводит к уменьшению коэффициента Θ , а потеря устойчивости равновесия происходит из-за продольной деформации связей, то есть их разрыва. При объемном сжатии наблюдается рост Θ в два раза при деформации на 80%. Это означает, что деформации в направлении, перпендикулярном связям, существенно превышают продольные деформации, т.е. имеет место сдвиговая форма потери устойчивости. Вместе с тем, в силу симметрии решетки функция Грюнайзена имеет шаровой вид.

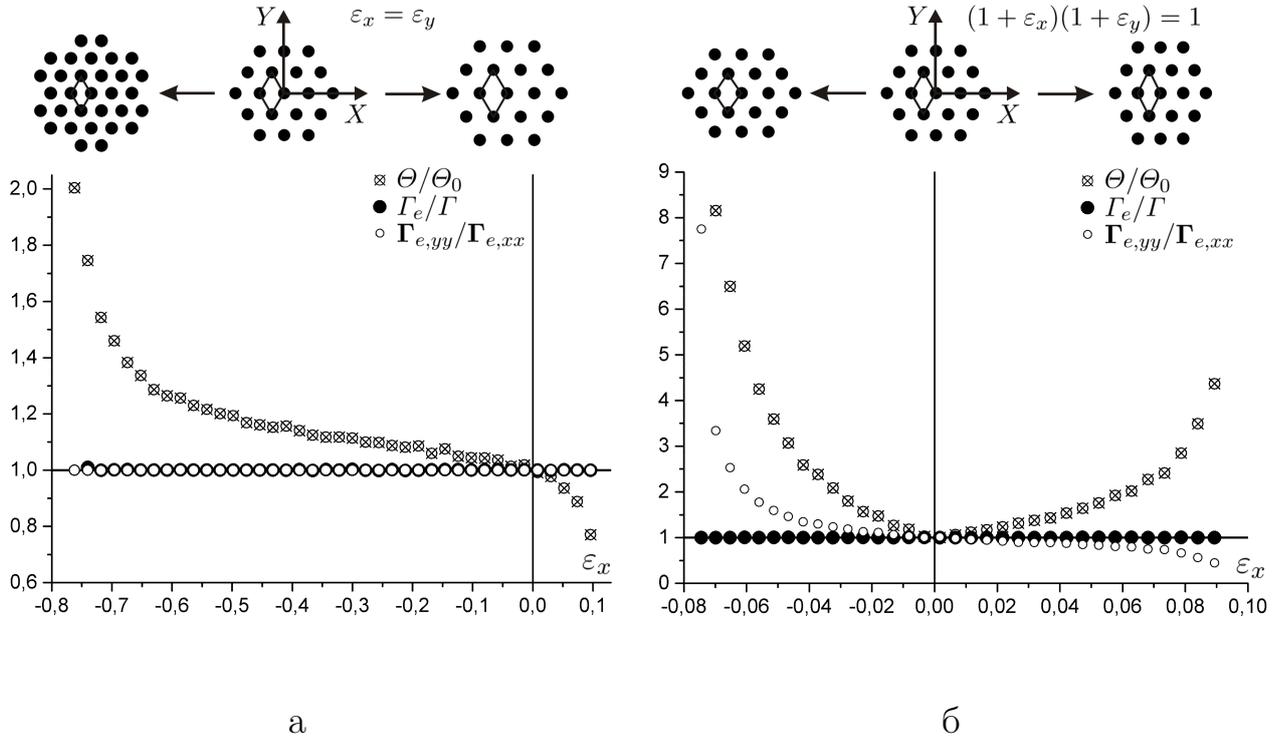


Рис. 8: Зависимость от объемной деформации отношений (а) и деформации формоизменения (б): \otimes — диагональных компонент деформационной температуры Θ (в единицах Θ_0), \bullet — шаровых частей функций Грюнайзена Γ_e (10) и Γ (9), \circ — диагональных компонент функции Грюнайзена Γ_e . Над графиком показаны направления главных осей тензора деформации, структура решетки относительно недеформированной конфигурации (в центре), элементарная ячейка и связь между компонентами тензора деформации.

При приближении к границам области устойчивости в пространстве деформаций вдоль линии постоянного объема (рис. 8б) величина Θ быстро возрастает, что также говорит о сдвиговом характере потери устойчивости.

Кроме того, отношение диагональных компонент функции Грюнайзена существенно зависит не только от девиатора тензора деформации, но и от того, какая граница области устойчивости рассматривается, что наглядно демонстрирует необходимость использования уравнения состояния Ми-Грюнайзена в тензорном виде.

В области устойчивости, соответствующей квадратной решетке, значение Θ существенно выше 1.45 и находится в диапазоне от 3.05 до 14.45.

В параграфе 3.3 и 3.4 вводится ковариационный тензор. Тензор деформационной температуры $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle$ можно переписать в терминах перемещений \mathbf{u}_k и \mathbf{u} :

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_k &= \mathbf{a}_k + \mathbf{u}_k - \mathbf{u} \\ \tilde{\mathbf{A}}_k &= \tilde{\mathbf{u}}_k - \tilde{\mathbf{u}} \end{aligned} \quad (11)$$

Тогда тензор $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle$ будет равен удвоенной разности тензоров ковариации ($\tilde{\xi}_k = \tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}}_k$) и дисперсии ($\tilde{\xi} = \tilde{\mathbf{u}}\tilde{\mathbf{u}}$) перемещений:

$$\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle = 2\langle \tilde{\xi} \rangle - 2\langle \tilde{\xi}_k \rangle \quad (12)$$

В состоянии термодинамического равновесия дисперсия перемещений является шаровым тензором и асимптотически растет со временем, распространяясь в виде волны от отсчетного атома. Ковариации являются диагональным тензором (в выбранной системе координат) и медленно убывают с расстоянием. При этом, со временем, растет среднеквадратичное отклонение значений корреляции и дисперсии перемещений в кристалле ($> 25\%$). Таким образом, хотя отношение следа тензора ковариаций к следу тензора дисперсий можно измерить экспериментально анализируя рассеяние нейтронов, использование тензора деформационной температуры $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle$ выглядит более предпочтительным.

В заключении сформулированы основные результаты работы.

1. Определены области устойчивости двумерной треугольной решетки и трехмерной гранецентрированной кубической в пространстве конечных деформаций при парном силовом взаимодействии методом молекулярной динамики. Для треугольной решетки получены три области устойчивости, соответствующие двум ориентациям треугольной решётки и устойчивой квадратной решетки. Для ГЦК получена единая область устойчивости, соединяющая устойчивую ГЦК решетку и деформированную устойчивую ОЦК.
2. Показано, что области устойчивости кристаллической решетки соответствуют областям сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентного континуума и аналитические выражения позволяют предсказывать области устойчивости кристаллической структуры с высокой точностью.
3. Исследована микроструктура неоднородных состояний после потери устойчивости треугольной решетки и при структурном переходе из тре-

угольной в квадратную решетку. Выявлены механизмы релаксации энергии при структурном переходе. Двухфазные состояния, возникающие на линии постоянного объема, приводят к формированию системы зерен с различными ориентациями треугольной решетки. Переход из треугольной решетки в квадратную приводит к зарождению слоев новой фазы.

4. Получены уточненные коэффициенты тензорного уравнения состояния Ми-Грюнайзена. Определены компоненты тензора деформационной температуры, что позволяет перейти к аналитическим выражениям для тензора термических напряжений, тепловой составляющей полной энергии и коэффициента Грюнайзена, погрешность которых меньше 1%.
5. Показано, что отношение диагональных компонент тензора деформационной температуры не зависит от размера образца, формы парного центрального потенциала взаимодействия, слабо (менее, чем на 10%) растет с температурой. При этом отношение диагональных компонент тензора деформационной температуры существенно зависит от деформаций, и быстро растет при приближении к границам области устойчивости, однако при гидростатическом растяжении уменьшается, приближаясь к единице. При отклонении от линии гидростатического нагружения уменьшается симметрия решетки, что приводит к не шаровому виду тензорной функции Грюнайзена.

Публикации по теме исследования

а) Публикации в изданиях, входящих в перечень ВАК:

1. Панченко А.Ю., Подольская Е.А., Кривцов А.М. Анализ уравнения состояния и определение функции Грюнайзена двумерных кристаллических решеток / А.Ю. Панченко, Е.А. Подольская, А.М. Кривцов // Доклады академии наук. – 2017. – Т. 473. – №. 2. – С. 159–162.
2. Podolskaya E. A., Panchenko A. Yu., Freidin A.B., Krivtsov A.M. Loss of ellipticity and structural transformations in planar simple crystal lattices / E.A. Podolskaya, A.Yu. Panchenko, A.B. Freidin, A.M. Krivtsov // Acta Mechanica. – 2016. – V. 227. – I. 1. – P. 185-201.
3. Podolskaya E. A., Krivtsov A. M., Panchenko A. Yu. Stability and Structural Transitions in Crystal Lattices / E. A. Podolskaya, A. M. Krivtsov, A. Yu. Panchenko // Surface Effects in Solid Mechanics. Advanced Structured Materials. № 30. – Springer Berlin Heidelberg, 2013. – P. 123–133.
4. Подольская Е. А., Кривцов А. М., Панченко А. Ю. Исследование устойчивости и структурного перехода в ГЦК-решетке при больших деформациях / Е. А. Подольская, А. М. Кривцов, А. Ю. Панченко // Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 1. Математика. Механика. Астрономия. – 2012. – №. 3. – С. 123–128.
5. Подольская Е. А., Кривцов А. М., Панченко А. Ю., Ткачев П. В. Устойчивость идеальной бесконечной двумерной кристаллической решетки / Е. А. Подольская, А. М. Кривцов, А. Ю. Панченко, П. В. Ткачев // Доклады Академии наук. – 2012. – Т. 442. – №. 6. – С. 755–758.

6. Podolskaya E. A., Panchenko A. Yu., Bukovskaya K. S. Influence of shear strain on stability of 2D triangular lattice / E. A. Podolskaya, A. Yu. Panchenko, K. S. Bukovskaya // Наносистемы: физика, химия, математика. – 2011. – Т. 2. – №. 3. – С. 60–64.
7. Podolskaya E. A., Panchenko A. Yu., Krivtsov A. M. Stability of 2D triangular lattice under finite biaxial strain / E. A. Podolskaya, A. Yu. Panchenko, A. M. Krivtsov // Наносистемы: физика, химия, математика. – 2011. – Т. 2. – №. 2. – С. 84–90

б) Другие публикации:

1. Panchenko A. Yu., Krivtsov A. M. Analysis of Mie-Gruneisen equation of state for two-dimensional crystal lattices / A. Yu. Panchenko, A. M. Krivtsov // 24th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM 2016), Montreal, Kanada. – 2016.
2. Podolskaya E. A., Panchenko A. Yu., Krivtsov A. M. On stability of planar square lattice / E. A. Podolskaya, A. Yu. Panchenko, A. M. Krivtsov // Advanced Seminar Generalized Continua as Models for Materials with Multi-scale Effects or under Multi-field Actions. Edited by Holm Altenbach and Samuel Forest. Magdeburg, Germany, 2015.
3. Podolskaya E. A., Panchenko A. Yu., Freidin A. B., Krivtsov A.M. Loss of ellipticity and structural transformations in planar simple crystal lattices. №483. // Book of abstracts of 9th European Solid Mechanics Conference (ESMC 2015), Leganes-Madrid, Spain. – 2015.
4. Berinskii I. E., Panchenko A. Yu., Podolskaya E. A. Modeling of elastic properties of molybdenum disulfide using a torque interaction potential. P. 49-50 // I.E. Berinskii, A.Yu. Panchenko, E.A. Podolskaya // Proceedings of XXXIX International Summer School–Conference «Advanced Problems in Mechanics», St. Petersburg. – 2015. – P. 124.
5. Podolskaya E. A., Panchenko A. Yu., Freidin A.B., Krivtsov A.M. Loss of ellipticity and structural transformations in planar simple crystal lattices / E.A. Podolskaya, A.Yu. Panchenko, A.B. Freidin, A.M. Krivtsov // Book of abstracts of Advances in Micromechanics of Materials, Rzeszow, Poland. – 2014.
6. Panchenko A. Yu., Kuzkin V. A., Krivtsov A. M. Analytical and numerical investigation of thermal expansion in crystal lattices / A. Yu. Panchenko, V. A. Kuzkin, A. M. Krivtsov // Book of abstracts of Advances in Micromechanics of Materials, Rzeszow, Poland. – 2014.
7. Panchenko A. Yu. On stability of 2D lattices under finite strain within moment interaction approach using molecular dynamics / A. Yu. Panchenko // Book of abstracts of EUROMECH-Colloquium 563, Cisterna di Latina, Italy. – 2014.

8. Panchenko A. Yu., Podolskaya E. A., Krivtsov A. M. MD modeling of structural transitions in solids with FCC and BCC crystal lattice with defects at nonzero temperature / A. Yu. Panchenko, E. A. Podolskaya, A. M. Krivtsov // CD-ROM Book of abstracts of European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes «EUROMAT 2013», Seville, Spain. – 2013.
9. Podolskaya E. A., Krivtsov A. M., Panchenko A. Yu. Stability and Structural Transitions in Crystal Lattices / E. A. Podolskaya, A. M. Krivtsov, A. Yu. Panchenko // CD-ROM Book of abstracts of 8th European Solid Mechanics Conference, Graz, Austria. – 2012.
10. Podolskaya E. A., Krivtsov A. M., Panchenko A. Yu. Structural transitions in 2D and 3D ideal crystal lattices / E. A. Podolskaya, A. M. Krivtsov, A. Yu. Panchenko // Book of abstracts of XL Summer School–Conference «Advanced Problems in Mechanics», St. Petersburg. – 2012. – P. 70.
11. Подольская Е. А., Кривцов А. М., Панченко А. Ю. Исследование устойчивости и фазового перехода в ГЦК решетке при больших деформациях / Е. А. Подольская, А. М. Кривцов, А. Ю. Панченко // Тезисы докладов Международной научной конференции по механике «Шестые Поляховские чтения», Санкт-Петербург. – 2012. – С. 241–242.
12. Podolskaya E. A., Panchenko A. Yu., Bukovskaya K. S. Influence of shear strain on stability of 2D triangular lattice / E. A. Podolskaya, A. Yu. Panchenko, K. S. Bukovskaya // Proceedings of XXXIX International Summer School–Conference «Advanced Problems in Mechanics», St. Petersburg. – 2011. – P. 358–363.
13. Podolskaya E. A., Panchenko A. Yu., Krivtsov A. M. Stability of 2D triangular lattice under finite biaxial strain / E. A. Podolskaya, A. Yu. Panchenko, A. M. Krivtsov // Proceedings of XXXIX International Summer School–Conference «Advanced Problems in Mechanics», St. Petersburg. – 2011. – P. 350–357.