

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

На правах рукописи

ПАНЧЕНКО АРТЁМ ЮРЬЕВИЧ

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

Специальность: 01.02.04 — механика деформируемого твёрдого тела

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
Чл.-корр. РАН., д.ф.-м.н., А.М. Кривцов

Санкт-Петербург — 2018

Оглавление

Введение	4
1 Обзор методов исследования устойчивости и описания термомеханических процессов в конденсированных средах	15
1.1 Методы вычисления макроскопических параметров для системы взаимодействующих частиц	15
1.2 Используемые потенциалы взаимодействия	21
1.3 Условия сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентного континуума	25
1.4 Уравнения состояния простых кристаллических решёток	29
2 Устойчивость кристаллических структур	31
2.1 Расположение координационных сфер	33
2.2 Поджатие связей	34
2.3 Энергия системы	36
2.4 Релаксация энергии	37
2.5 Алгоритм исследования устойчивости методом молекулярной динамики	40
2.6 Области устойчивости треугольной решетки	42
2.7 Физический смысл границ областей устойчивости треугольной решетки	48
2.8 Релаксация структуры после потери устойчивости	52
2.9 Трёхмерные кристаллические структуры	64
2.10 Физический смысл границ областей устойчивости ГЦК решетки	66
2.11 Выводы	69
3 Уравнение состояния идеальных кристаллов	70
3.1 Исследование термодинамических параметров двумерных кристаллических структур	72

3.2	Зависимость компонент тензора $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle$ от параметров моделирования	75
3.3	Корреляционный тензор	83
3.4	Детерминированная задача определение корреляций перемещений частиц в идеальной решетке	85
3.5	Выводы	88
	Заключение	89
	Список литературы	91

Введение

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. Примене-

ние 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.

Научная новизна

Новизну работы составляют следующие **положения, 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 деформи-

руемого 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. Жещув, 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).

Структура и объем работы

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

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 // Nanosyst. Phys. Chem. Math. – 2011. – V. 2. – №. 3. – P. 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 // Nanosyst. Phys. Chem. Math. – 2011. – V. 2. – №. 2. – P. 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), Monreal, 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.

Законы термодинамики легко могут быть получены из принципов статистической механики, неполным выражение которых они являются, но сами они являются, пожалуй, несколько слепым проводником в наших поисках этих законов.

Гиббс

Обзор литературы

Статистическая механика сформулированная в начале 20 века Гиббсом [67] позволила связать микроскопические характеристики материалов с макроскопическими термодинамическими параметрами. Дальнейшее развитие статистического подхода для неравновесных процессов было выполнено Боголюбовым [7] в 1946г. Через 10 лет благодаря развитию вычислительной техники стал развиваться альтернативный подход – численное интегрирование уравнений движения для отдельных частиц. Первые работы посвященные методу динамики частиц были направлены на исследование неравновесных процессов и продемонстрировали одно из основных преимуществ метода – естественное описание структурных изменений, Баррон в 1955 году исследовал фазовые переходы в гелии [43], Олдер и Вейнрайт в 1957 году получили фазовую диаграмму системы твердых сфер [37]. Можно выделить два параметра определяющих поведение системы частиц: структура материала и потенциал взаимодействия, в следствии чего было опубликовано множество работ по вычислению термодинамических и механических параметров виртуальных материалов. Одним из направлений развития метода динамики частиц было усложнение потенциалов взаимодействия от парных центральных к многочастичным. Следует выделить работу Руффа 1977г. [100] в которой были получена формула для коэффициента теплового расширения материала Морзе, и исследована зависимость упругих модулей от температуры. Коэффициент теплового расширения для Ne, Ar, Kr, and Xe при использовании потенциала Леннарда-Джонса и сравнение с сомосогласованной фонной теорией в [93], с учетом дефектов [48]. В работе Шаха

[104] проведено исследование структуры и фазовых переходов материала Морзе в широком диапазоне давлений и температур, было показано, что радиус обрезания потенциала существенно влияет на устойчивость структуры материала. Температурная зависимость коэффициента теплового расширения для ионных кристаллов (модель твердых ионов, оболочечная модель) определена в работе [112]. В работе [45] выполнено сравнение коэффициента теплового расширения для различных парных потенциалов без учета притяжения частиц. Тепловое расширения титана при использовании потенциала погруженного атома было вычислено в работе [77], кремния и германия в [107]. Сравнение коэффициентов теплового расширения MgO при высоком давлении для shell model (SM)(парный) и breathing shell model (BSM)(не центральный) проведено в [105]. Расчет теплового расширения ZnSe для потенциала Терзофа в [40].

Получение уравнений состояния для молекулярно динамической системы на основе методов статистической физики и в частности свободной энергии Гельмгольца было выполнено для парных центральных потенциалов, ограничиваясь только ближайшими соседями в работе [70]. Самосогласованная фононная теория позволила получить хорошее согласие с расчетами вплоть до точки плавления. Для ГЦК с парным центральным взаимодействием свободная энергия Гельмгольца вычислена в работе [90]. В работе [113] показана линейная зависимость между коэффициентом Грюнайзена и производной модуля объемного сжатия по давлению при учете взаимодействия с первой координационной сферой.

Теоретическая прочность одна из важнейших и фундаментальных свойств твердых тел поскольку она определяет локальную неустойчивость в кристалле. Локальное нарушение структуры, как показано в работе [1] оказывает существенное влияние на течение жидкости в наноканалах. В работе [119] устойчивость двумерной решетки для потенциала Ми определяется их анализа тензора жесткости. Однако отмечается возможность волновой неустойчивости. В работах Юмено [110] показана необходимость исследовать не только локаль-

ную, но и глобальную неустойчивость связанную с коллективным движением атомов. Определено влияние температуры и дефектов на локальную и глобальную неустойчивость, критическое сдвиговое напряжение линейно зависит от температуры, в отличии от критической деформации. Условием устойчивости является положительная определённость матрицы Гесса [109]. В работе [13] методом молекулярной динамики с многочастичным потенциалом межатомного взаимодействия, полученным в рамках модели погруженного атома, проведено исследование влияния толщины пленки и температуры на фазовую стабильность ОЦК-циркония в бесконечных пленках с различной кристаллографической ориентацией. В работах Псахье [32] для модели погруженного атома показано образование областей с локальным изменением структуры в условиях динамического нагружения и тепловых флуктуаций. В работе [81] исследовано зарождение дефектов в кристаллитах железа, ванадия и меди при высокоэнергетических воздействиях.

1 Обзор методов исследования устойчивости и описания термомеханических процессов в конденсированных средах

1.1 Методы вычисления макроскопических параметров для системы взаимодействующих частиц

Введем выражения связывающие микроскопические параметры материала и параметры эквивалентной сплошной среды.

Потенциальная и удельная потенциальная энергия вычисляется по определению:

$$U = \frac{1}{2} \sum_k \Pi_k, \quad E_p = \frac{1}{N} U, \quad (1)$$

где Π — выбранный потенциал взаимодействия, A_k — модуль вектора, соединяющего центры пары частиц, N — количество частиц в системе.

Кинетическая и удельная кинетическая энергия определяется скоростями частиц относительно центра масс системы:

$$\tilde{E}_{\text{kin}} = \frac{1}{2} \sum_n m v_n^2, \quad \tilde{K} = \frac{1}{N} \tilde{E}_{\text{kin}}, \quad (2)$$

где m — масса частиц, v_n — модуль вектора скорости относительно центра масс системы частиц.

Тогда температура вводится, как мера средней кинетической энергии:

$$\tilde{T} = \frac{2\tilde{K}}{3k_b}, \quad (3)$$

где k_b — постоянная Больцмана.

Выражение для тензора напряжений Коши и тензора напряжений Пиолы дискретной системы при отсутствии теплового движения было получено в [23],

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{1}{2V} \sum_k \mathbf{A}_k \mathbf{F}_k, \quad (4)$$

$$\mathbf{P} = \frac{1}{2V^0} \sum_k \mathbf{a}_k \mathbf{F}_k, \quad (5)$$

и было показано, что $\boldsymbol{\tau}$ соответствует тензору напряжений Коши, а \mathbf{P} соответствует тензору напряжений Пиолы в эквивалентной сплошной среде, V^0 и V — объем системы в отсчетной и актуальной конфигурации.

Задача определения тензора напряжений в дискретной системе при тепловом движении существенно сложнее, что привело к появлению различных подходов для расчета давления и тензора напряжений. Классическим считается выражение, полученное Р.Клазиусом [49] на основе теоремы о вириале, и обобщение выражения Клаузиуса, выполненное Д.Цайем [108].

$$PV = \frac{2}{3} \langle \tilde{E}_{\text{kin}} \rangle_t + \frac{1}{6} \sum_k \langle \mathbf{A}_k \mathbf{F}_k \rangle_t. \quad (6)$$

где $\langle \quad \rangle_t$ — осреднение по времени.

Видим, что при отсутствии движения (6) полностью совпадает со следом тензора (4). Данное выражение использовалось во многих классических работах [38, 76, 61] по моделированию методом молекулярной динамики и встроено

в пакеты моделирования, в частности LAMMPS, GROMACS и другие. Существенным вопросом, обсуждавшимся во многих работах, является вид выражения (6) для систем с периодическими граничными условиями, поскольку изначально выражение записано для образца с жесткими стенками. В работе [89] показано, что для системы с периодическими граничными условиями необходимо дополнительное слагаемое в правой части вида $-3V \frac{\delta U}{\delta V}$, отвечающее изменению положения образов частиц при изменении объема. Вид этого слагаемого был определён Х.Беккером [44] для систем с парным потенциалом взаимодействия и А.Томсоном [106] для систем с многочастичным взаимодействием. В этих работах было показано, что в отличие от классического определения, где в сумме учитываются взаимодействия только тех частиц, что находятся внутри выбранного объема, нужно учитывать и взаимодействия с «образами» частиц, появляющимися в следствии периодических граничных условий.

Следующим широко используемым подходом является метод, разработанный Дж.Ирвином и Дж.Криквудом [78] с использованием уравнения Лиувилля для вычисления локально равновесного тензора напряжений в неравновесных задачах. Строгое математическое обоснование приводятся в работе В.Нолла [84]. Практическому применению данных выражений препятствовали ряд сложностей: 1) необходимо проводить усреднение по ансамблю; 2) использование в формулах бесконечных рядов для учета вклада потенциального взаимодействия; 3) необходимость аппроксимировать функцию Дирака. Все они были преодолены в работе Р.Харди [73], который предложил использовать в выражении (7) сглаживающую функцию $\psi(\mathbf{R} - \mathbf{R}_n)$, имеющую максимум в точки вычисления тензора напряжений \mathbf{R} и нормированную на объем всей системы, коэффициенты B_{ij} определяют находится ли связь ij внутри выбранного объёма, данная сглаживающая функция заменила функцию Дирака в выражениях Ирвина и Кирквуда.

$$PV = \frac{2}{3} \sum_n \langle mv_n^2 \psi(\mathbf{R} - \mathbf{R}_n) \rangle_t + \frac{1}{6} \sum_k \langle \mathbf{A}_k \mathbf{F}_k B_{ij} \rangle_t. \quad (7)$$

При вычисления среднего давления во всей системе формула Харди приводится к классическому выражению Клаузиуса и Цая.

Выражение для тензора напряжений, используемое в данной работе, получено В.Кузькиным и А.Кривцовым [24] и имеет ряд отличий от (6). Для сравнения приведем вывод обоих уравнений. Для получения вириальной формулы, следуя работам [76] и [9], преобразуем выражение для кинетической энергии:

$$\begin{aligned}
\tilde{E}_{\text{kin}} &= \frac{1}{2} \sum_n m v_n^2 = \frac{1}{2} \sum_n \frac{d\mathbf{R}_n}{dt} \cdot \mathbf{p}_n = \\
&= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \sum_n \mathbf{R}_n \cdot \mathbf{p}_n - \frac{1}{2} \sum_n \mathbf{R}_n \cdot \frac{d\mathbf{p}_n}{dt} = \\
&= \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \sum_n \mathbf{R}_n \cdot \mathbf{p}_n - \frac{1}{2} \sum_n \mathbf{R}_n \cdot \mathbf{F}_n,
\end{aligned} \tag{8}$$

где \mathbf{p}_n — импульс частицы, \mathbf{F}_n — суммарная сила действующая на частицу.

Усредним полученное выражение по времени и заметим, что в рассматриваемых нами стационарных состояниях системы слагаемое $\frac{d}{dt} \sum_n \langle \mathbf{R}_n \cdot \mathbf{p}_n \rangle_t$ обращается в ноль [9],[76].

$$\langle \tilde{E}_{\text{kin}} \rangle_t = -\frac{1}{2} \sum_n \langle \mathbf{R}_n \cdot \mathbf{F}_n \rangle_t. \tag{9}$$

Выразим из вириальной функции $-\frac{1}{2} \sum_n \langle \mathbf{R}_n \cdot \mathbf{F}_n \rangle_t$ слагаемое отвечающие за взаимодействие между частицами и слагаемое отвечающие за взаимодействие со стенками, предположим, что внешнее давление равномерно распределено по поверхности.

$$\langle \tilde{E}_{\text{kin}} \rangle_t = \frac{1}{2} P \oint_S \mathbf{r} \mathbf{S} - \frac{1}{2} \sum_n \langle \mathbf{R}_n \cdot \mathbf{F}_n \rangle_t, \tag{10}$$

где $\mathbf{S} = \mathbf{n} dS$, dS — элемент поверхности ограничивающей частицы, \mathbf{n} — нормаль к элементу поверхности, P — внешнее давление.

Используя теорему Гаусса, получим:

$$\langle \tilde{E}_{\text{kin}} \rangle_t = \frac{3}{2} PV - \frac{1}{2} \sum_n \langle \mathbf{R}_n \cdot \mathbf{F}_n \rangle_t. \tag{11}$$

Перепишем сумму $\sum_n \mathbf{R}_n \cdot \mathbf{F}_n$, удвоив и разделив полную силу на сумму по отдельным взаимодействиям: $\sum_n \mathbf{R}_n \cdot \mathbf{F}_n = \frac{1}{2} \sum_k \mathbf{A}_k \cdot \mathbf{F}_k$

Окончательно вириальное давление определяется по формуле:

$$P = \frac{1}{3V} \left(2 \langle \tilde{E}_{\text{kin}} \rangle_t + \frac{1}{2} \sum_k \langle \mathbf{A}_k \cdot \mathbf{F}_k \rangle_t \right). \quad (12)$$

Приведём вывод выражения для тензора напряжений, выполненный В.Кузькиным [24]. Запишем уравнение движения для некоторой отчетной частицы среды, поскольку рассматривается однородная система с периодическими граничными условиями все частицы эквивалентны и выбор частицы произволен:

$$m \dot{v}_n = \sum_k \mathbf{F}_k. \quad (13)$$

Разделим движение на «быстро» осциллирующую компоненту и «медленное» движение к равновесному состоянию. Уравнение движения для «медленной» компоненты запишется в виде [6]:

$$m \langle \dot{v}_n \rangle_t = \sum_k \langle \mathbf{F}_k \rangle_t. \quad (14)$$

Используя длинноволновое приближение [47]:

$$\mathbf{A}_k = \mathbf{R}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_k) - \mathbf{R}(\mathbf{r}) \approx \mathbf{a}_k \cdot \overset{\circ}{\nabla} \mathbf{R} = \mathbf{R} \overset{\circ}{\nabla} \cdot \mathbf{a}_k, \quad (15)$$

где $\mathbf{R} \overset{\circ}{\nabla}$ — деформационный градиент, \mathbf{a}_k — вектор между частицами в отчетной конфигурации, \mathbf{A}_k — вектор между частицами в актуальной конфигурации, $\mathbf{R}(\mathbf{r})$ — радиус-вектор частицы в актуальной конфигурации, имевшей радиус-вектор \mathbf{r} в отчетной конфигурации. Таким образом мы предполагаем, что физические величины мало меняются на расстояниях порядка межатомных, и используя длинноволновое приближение переходим от дискретного рассмотрения к непрерывным производным и уравнениям сплошной среды.

$$\langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r}) \rangle_t - \langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r} - \mathbf{a}_k) \rangle_t \approx \mathbf{a}_k \cdot \overset{\circ}{\nabla} \langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r}) \rangle_t. \quad (16)$$

Разделим силу на две составляющих, используя третий закон Ньютона и (16) $\langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r}) \rangle_t = \frac{1}{2} (\langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r}) \rangle_t - \langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r} - \mathbf{a}_k) \rangle_t) \approx \frac{1}{2} \mathbf{a}_k \cdot \overset{\circ}{\nabla} \langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r}) \rangle_t$, подставим в (14):

$$m \langle \dot{v}_n \rangle_t \approx \frac{1}{2} \sum_k \mathbf{a}_k \cdot \overset{\circ}{\nabla} \langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r}) \rangle_t = \overset{\circ}{\nabla} \cdot \left(\frac{1}{2} \sum_k \mathbf{a}_k \langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r}) \rangle_t \right). \quad (17)$$

Сравним выражение (17) с уравнением баланса сплошной среды в форме Пиола [28]. Таким образом, дискретный аналог тензора Пиола определяется выражением:

$$\mathbf{P} = \frac{1}{2V^0} \sum_k \mathbf{a}_k \langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r}) \rangle_t. \quad (18)$$

Для вывода выражения для тензора Коши запишем уравнение (16) в актуальной конфигурации:

$$\langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r}) \rangle_t - \langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r} - \mathbf{a}_k) \rangle_t \approx \mathbf{A}_k \cdot \nabla \langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r}) \rangle_t. \quad (19)$$

Подставляя в (14), разделим обе части на актуальный объем и преобразуя производные, получим:

$$\begin{aligned} \frac{m}{V} \langle \dot{v}_n \rangle_t &\approx \frac{1}{2V} \sum_k \mathbf{A}_k \cdot \nabla \langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r}) \rangle_t = \\ &= \nabla \cdot \left(\frac{1}{2V} \sum_k \mathbf{A}_k \langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r}) \rangle_t \right) - \sum_k \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{A}_k}{2V} \right) \langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r}) \rangle_t. \end{aligned} \quad (20)$$

С учетом (15) последнее слагаемое можно переписать в следующем виде, и в силу тождества Пиола [28] $\left(\nabla \cdot \left(\frac{V^0}{V} \mathbf{R} \overset{\circ}{\nabla} \right) \equiv 0 \right)$ будет равно нулю:

$$\sum_k \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{A}_k}{2V} \right) \langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r}) \rangle_t = \frac{V^0}{2} \sum_k \nabla \cdot \left(\frac{V^0}{V} \mathbf{R} \overset{\circ}{\nabla} \right) \mathbf{a}_k \langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r}) \rangle_t = 0. \quad (21)$$

Из требования эквивалентности уравнения движения (20) уравнению движения сплошной среды получим окончательное выражение тензора напряжений Коши.

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{1}{2V} \sum_k \mathbf{A}_k \langle \mathbf{F}_k(\mathbf{r}) \rangle_t. \quad (22)$$

Выражения (12) и (22) имеют одинаковую форму, отличие состоит в методе усреднения: в вириальном выражении усредняются произведения $\langle \mathbf{A}_k \mathbf{F}_k \rangle_t$, а в (22) каждое из слагаемых необходимо усреднять по отдельности, что приводит к ряду недостатков данного выражения — невозможность его использования в системе с часто меняющимися связями и существенный расход оперативной памяти компьютера для усреднения каждой связи в отдельности, с другой стороны, данное выражение более строгое и можно рассчитывать на большую точность.

1.2 Используемые потенциалы взаимодействия

В данной работе проводится исследование ансамблей частиц взаимодействующих посредством парных центральных потенциалов. Как следует из названия данные потенциалы должны зависеть только от модуля расстояние между частицами $\Pi(A_k)$, сила, действующая между частицами определяется как первая производная от потенциала (23), будем называть жесткостью связи вторую производную (23).

$$\begin{aligned} \Pi_k &= \Pi(A_k) = -\frac{\partial \Pi(A_k)}{\partial A_k} = -\Pi'(A_k), \\ F_k &= F(A_k) = -\frac{\partial \Pi(A_k)}{\partial A_k} = -\Pi'(A_k), \\ C_k &= C(A_k) = \frac{\partial^2 \Pi(A_k)}{\partial A_k^2} = \Pi''(A_k). \end{aligned} \tag{23}$$

Расстояние на котором обращается в ноль сила взаимодействия и жесткость связи обозначим как a и b , и будем называть равновесным расстоянием и расстоянием разрыва связи соответственно.

Параболический или гармонический потенциал (24) является простейшим потенциалом с непрерывными производными и единственным минимумом. D — глубина потенциальной ямы, коэффициенты в (24) выбраны так, чтобы жесткость связи соответствовала жесткости потенциала Леннард-Джонса (25) при $A_k = a$. Благодаря своей простоте данный потенциал часто используется в аналитических вычислениях, поскольку позволяет получать точные решения для

ансамблей частиц. В молекулярной динамике потенциал может использоваться, если относительные смещения частиц малы, при некоторой модификации в качестве угловой пружины между частицами для описания длинных органических молекул.

$$\begin{aligned} \Pi_k &= \frac{36D}{a^2} (a - A_k)^2 - 1, \\ F_k &= \frac{72D}{a^2} (a - A_k), \quad C_k = \frac{72D}{a^2}. \end{aligned} \quad (24)$$

Потенциал Леннард-Джонса (25) был предложен в 1924 г. [86] и успешно применяется для описания взаимодействия Ван-Дер-Ваальса, в частности кристаллов благородных газов. Правая ветка $\left(\frac{a}{A_k}\right)^6$ соответствует взаимодействию двух диполей, левая $\left(\frac{a}{A_k}\right)^{12}$ аппроксимирует силу отталкивания при сжатии. Данный потенциал весьма прост с вычислительной точки зрения и благодаря четным степеням не требует извлечения корня $\sqrt{\mathbf{A}_k^2}$. Поскольку потенциал Леннард-Джонса является двухпараметрическим мы можем удовлетворить только одному макроскопическому параметру материала.

$$\begin{aligned} \Pi_k &= D \left[\left(\frac{a}{A_k}\right)^{12} - \left(\frac{a}{A_k}\right)^6 \right], \\ F_k &= \frac{12D}{a} \left[\left(\frac{a}{A_k}\right)^{13} - \left(\frac{a}{A_k}\right)^7 \right], \\ C_k &= \frac{12D}{a^2} \left[13 \left(\frac{a}{A_k}\right)^{14} - 7 \left(\frac{a}{A_k}\right)^8 \right]. \end{aligned} \quad (25)$$

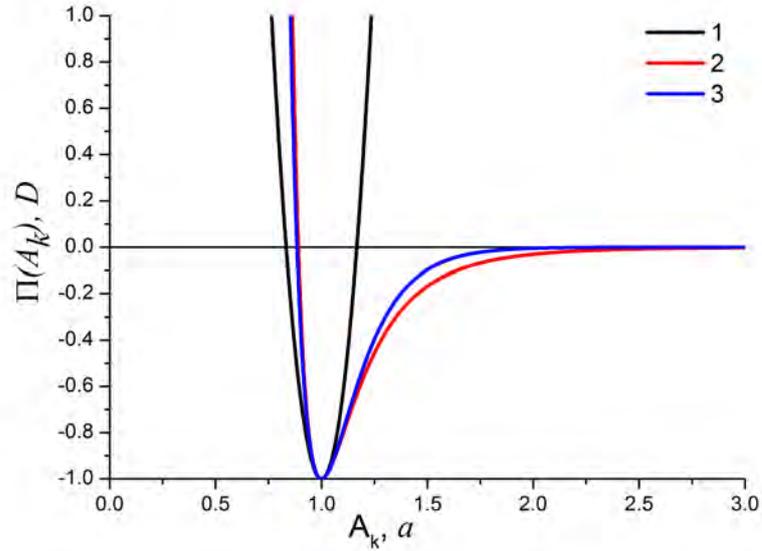
Дальнейшей модификацией (25) является потенциал Ми, где имеется 4 параметра включая независимые показатели степени у ветвей потенциала $\left(\frac{a}{A_k}\right)^m$, $\left(\frac{a}{A_k}\right)^n$.

Основным потенциалом используемым в данной работе является потенциал Морзе (26), предложенный в 1929 г. Данный потенциал является трехпараметрическим и позволяет выбрать два макроскопических параметра. Параметр αa позволяет контролировать ширину потенциальной ямы, а экспоненциальная форма потенциала удобна для получения аналитических решений. Одним

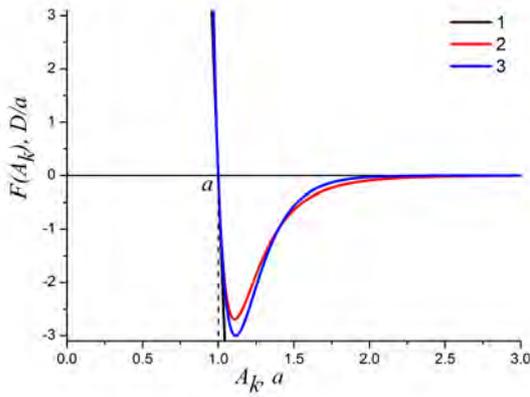
из важных отличий от потенциала Леннард-Джонса является отсутствие асимптоты $A_k = 0$, и хотя моделирование классическими методами при столь больших давлениях не корректно, потенциал Морзе позволяет получить физически обоснованные результаты.

$$\begin{aligned}
 \Pi_k &= D \left[e^{2\alpha(a-A_k)} - 2e^{\alpha(a-A_k)} \right], \\
 F_k &= 2D\alpha \left[e^{2\alpha(a-A_k)} - e^{\alpha(a-A_k)} \right], \\
 C_k &= 2D\alpha^2 \left[2e^{2\alpha(a-A_k)} - e^{\alpha(a-A_k)} \right].
 \end{aligned} \tag{26}$$

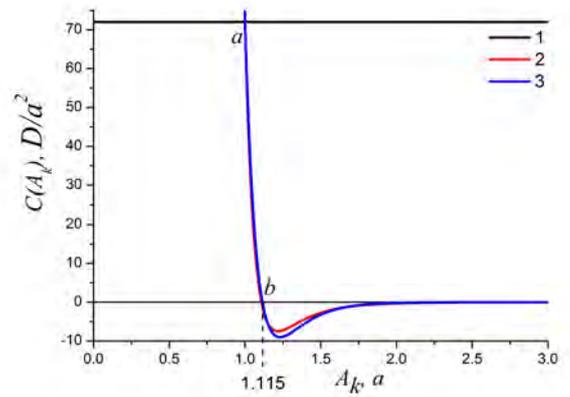
На рис.1 представлено сравнение трех описанных выше потенциалов, в данном случае для потенциала Морзе параметр $\alpha a = 6$, при этом отличия от потенциала Леннард-Джонса минимальны. Следует отметить, что при моделировании для ускорения расчетов используется так называемый радиус-обрезания a_{cut} т.е. то расстояние за пределами которого взаимодействием частиц пренебрегают. Данную величину следует рассматривать как некоторый дополнительный параметр потенциала (подробнее в параграфах 2.2-2.4), который существенно влияет на результаты расчетов. Следует отметить, что при рассмотрении систем где происходит активная перестройка внутренней структуры использование a_{cut} приводит к нарушению закона сохранения энергии, решением данной проблемы является использование сглаживающих функций [23], таких, чтобы $F(a_{\text{cut}}) = 0$.



a



б



в

Рис. 1: Зависимость потенциальной энергии Π (а), модуля силы F (б), жесткости связи пары частиц C (в) от расстояния между частицами A_k . 1 — параболический потенциал, 2 — Потенциал Леннард-Джонса, 3 — потенциал Морзе.

Для моделирования реальных кристаллических структур методом молекулярной динамики обычно применяются более сложные виды законов взаимодействия, многочастичные и моментные потенциалы. Далее потенциалы разделяются по виду описываемых взаимодействий. Для моделирования структур с ковалентным взаимодействием можно выделить многочастичные потенциалы Стиллингера-Вебера, Терсоффа-Бреннера и моментные потенциалы V-model,

для моделирования металлов широко применяется потенциал погруженного атома (EAM — emended atom method). Указанные потенциалы имеют множество разновидностей, применяемых в зависимости от точности и моделируемых процессов. Не смотря на большое количество специализированных потенциалов исследование свойств парных взаимодействий является актуальным поскольку подавляющее большинство потенциалов содержат парную составляющую. Металлическая связь обладает ненаправленностью и ненасыщенностью, как и взаимодействие Ван-дер-Ваальса, что объясняет общий вид потенциала погруженного атома (27) [51].

$$E = \frac{1}{2} \sum_k \Pi_k + \Phi \left(\sum_k \rho(A_k) \right). \quad (27)$$

В выражении для энергии частицы (27) первый член уравнения является парным потенциалом, а второй отвечает за многочастичность взаимодействия (функция Φ) с некоторым эффективным полем «электронной плотности» создаваемой соседними частицами (функция $\rho(A_k)$). Необходимость второй составляющей потенциала связана с несколькими факторами, в частности отношение энергией кристалла к температуре плавления для систем с парным взаимодействием приблизительно в 3 раза меньше, чем для реальных металлов, а энергия образования вакансий в 3 раза больше.

1.3 Условия сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентного континуума

Следуя работам [95, 33], приведем вывод аналитического критерия сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентного континуума. Будем проверять сильную эллиптичность отдельного деформированного состояния относительно малых возмущений, не рассматривая способ, которым система была приведена в это состояние. Рассмотрим бесконечную кристаллическую структуру, в которой частицы связаны парным силовым потенциалом. Используя длинноволновое приближение после наложения конечной деформации перей-

дем к эквивалентной сплошной среде. Уравнение движения в форме Пиолы будет иметь вид [28]:

$$\rho^0 \ddot{\mathbf{u}} = \overset{\circ}{\nabla} \cdot \mathbf{P}. \quad (28)$$

где ρ^0 — плотность среды в отсчетной (деформированной) конфигурации, равная отношению массы m частиц приходящихся на элементарную ячейку к ее объему V^0 , \mathbf{P} — тензор напряжений в форме Пиолы (5), \mathbf{u} — вектор перемещений. Найдем первую вариацию уравнения (28).

$$\ddot{\mathbf{v}} = {}^4\mathbf{Q} \cdot \cdot \cdot \nabla \nabla \mathbf{v}, \quad (29)$$

где ∇ — оператор Гамильтона в актуальной конфигурации,

$${}^4\mathbf{Q} = \frac{1}{2\rho^0 V^0} \left(\mathbf{E} \sum_k \Pi'_k A_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k + \sum_k A_k^2 \left(\Pi''_k - \frac{\Pi'_k}{A_k} \right) \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \right). \quad (30)$$

Здесь A_k — длина связи в актуальной конфигурации, \mathbf{e}_k — единичный вектор направленный по связи, $\mathbf{v} = \delta \mathbf{u}$ — вектор малых перемещений.

Введем ортонормированный базис $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ и будем искать решение уравнения (29) в виде $\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 e^{i\omega t} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$, где \mathbf{v}_0 — амплитуда, \mathbf{k} — волновой вектор, ω — частота. Подставляя решение в уравнение (29) приходим к задаче на собственные числа (ω^2) тензора $\mathbf{D} = {}^4\mathbf{Q} \cdot \cdot \mathbf{k} \mathbf{k}$, согласно [95] актуальная конфигурация устойчива, если для любого вещественного \mathbf{k}

$$\omega^2 > 0. \quad (31)$$

Требование положительности собственных чисел означает положительную определенность тензора \mathbf{D} . Как было показано в [95] для бесконечной решетки, ограничиваясь длинноволновым приближением условие (31) аналогично условию сильной эллиптичности [35, 28]. Отметим, что данная постановка задачи сходна с первой краевой задачей специального вида [35, 28], для которой доказано, что условие сильной эллиптичности является не только необходимым, но и достаточным. Отметим, что данный метод имеет ряд отличий от широко используемого в молекулярной динамике условия о вещественности фононных

частот [60]; использование парных потенциалов позволяет аналитически, а не численно определить тензор \mathbf{D} , что существенно уменьшает время расчета области устойчивости; тензор \mathbf{D} получен в приближении длинных волн, и для больших \mathbf{k} его вид будет отличаться от вида динамической матрицы, определяющей фононные частоты; кроме того вектора \mathbf{k} должны располагаться по векторам обратной решетки и ограничиваться размером ячейки периодичности.

Для двумерной среды условие положительной определённости тензора \mathbf{D} принимает вид:

$$\begin{cases} \text{tr } \mathbf{D} > 0 \\ \det \mathbf{D} > 0 \end{cases} \quad (32)$$

эти условия должны выполняться для произвольных векторов \mathbf{k} .

Для двумерной системы произвольная аффинная деформация задается следующим деформационным градиентом:

$$\mathbf{R} \overset{\circ}{\nabla} \sim \begin{pmatrix} 1 + \varepsilon_x & \text{tg } \varphi_{yx} \\ 0 & 1 + \varepsilon_y \end{pmatrix} \quad (33)$$

Если не рассматривать сдвиговые деформации:

$$\mathbf{R} \overset{\circ}{\nabla} \sim \begin{pmatrix} 1 + \varepsilon_x & 0 \\ 0 & 1 + \varepsilon_y \end{pmatrix} \quad (34)$$

То в силу симметрии треугольной решетки после деформирования (34) условия (32) становятся условиями на положительную определенность квадратичных форм:

$$\begin{cases} (Q_{11} + Q_{21})k_1^2 + (Q_{12} + Q_{22})k_2^2 > 0 \\ (Q_{11}Q_{21})k_1^4 + (Q_{11}Q_{21} + Q_{12}Q_{22} - 4Q_{44})k_2^2k_1^2 + (Q_{12}Q_{22})k_2^4 > 0 \end{cases} \quad (35)$$

Таким образом условия устойчивости приобретают вид:

$$\begin{cases} Q_{11} + Q_{21} > 0 \\ (Q_{11} + Q_{21})(Q_{12} + Q_{22}) > 0 \\ Q_{11}Q_{21} > 0 \\ Q_{12}Q_{22} > 0 \\ Q_{11}Q_{21} + Q_{12}Q_{22} - 4Q_{44} > -\sqrt{Q_{11}Q_{21}Q_{12}Q_{22}} \end{cases} \quad (36)$$

При учете сдвиговой деформации (34) симметрия решетки уменьшается и условия (32) принимают вид

$$\begin{cases} (Q_{11} + Q_{21})k_1^2 + (Q_{14} + Q_{24})k_1k_2 + (Q_{12} + Q_{22})k_2^2 > 0 \\ Ak_1^4 + Bk_1^2k_2^2 + Ck_2^4 + Dk_1^3k_2 + Ek_1k_2^3 > 0 \end{cases} \quad (37)$$

где коэффициенты второго условия (37₂) определяются формулами:

$$\begin{aligned} A &= Q_{11}Q_{21} - Q_{41}^2, & B &= Q_{14}Q_{24} + Q_{11}Q_{22} + Q_{12}Q_{21} - 2Q_{41}Q_{42} - Q_{44}^2, \\ C &= Q_{12}Q_{22} - Q_{42}^2, & D &= 2Q_{11}Q_{24} - 4Q_{41}Q_{44} + 2Q_{14}Q_{21}, \\ E &= 2Q_{12}Q_{24} + 2Q_{14}Q_{22} - 4Q_{42}Q_{44}. \end{aligned} \quad (38)$$

Первое условие (37₁) является квадратичной формой, и условием ее положительной определенности будет:

$$Q_{11} + Q_{21} > 0, \quad 4(Q_{11} + Q_{21})(Q_{12} + Q_{22}) - (Q_{14} + Q_{24})^2 > 0, \quad (39)$$

Для проверки второго условия (37₂) необходимо исследовать его относительно различных значений \mathbf{k} , но их количество можно существенно сократить, разделив обе части уравнения на $|\mathbf{k}|^4$ убедимся, что условия устойчивости зависят только от направления, а не от длины волнового вектора, кроме того мы можем проверять только минимумы функции:

$$F\left(\frac{k_1}{k_2}\right) = A\frac{k_1^4}{k_2^4} + B\frac{k_1^2}{k_2^2} + C + D\frac{k_1^3}{k_2^3} + E\frac{k_1}{k_2}. \quad (40)$$

Что сводится к задаче о решении кубического уравнения.

Аналогичное рассуждение можно провести и для трехмерных решеток.

Рассмотрим аффинную деформацию:

$$\mathbf{R} \overset{\circ}{\nabla} \sim \begin{pmatrix} 1 + \varepsilon_x & \text{tg } \varphi_{yx} & 0 \\ 0 & 1 + \varepsilon_y & \text{tg } \varphi_{zy} \\ \text{tg } \varphi_{xz} & 0 & 1 + \varepsilon_z \end{pmatrix}. \quad (41)$$

Или в случае только осевой деформации:

$$\mathbf{R} \overset{\circ}{\nabla} \sim \begin{pmatrix} 1 + \varepsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \varepsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \varepsilon_z \end{pmatrix}. \quad (42)$$

Характеристическое уравнение $\det(\mathbf{D} - \omega^2 \mathbf{E}) = 0$, ограничиваясь осевыми деформациями, принимает вид:

$$\omega^6 - I_1 \omega^4 + I_2 \omega^2 - I_3 = 0, \quad (43)$$

где I_1, I_2, I_3 — инварианты тензора \mathbf{D} . Требование положительности кубического уравнения относительно ω^2 приводит к следующим условиям:

$$\begin{cases} I_1 > 0 \\ I_2 > 0 \\ I_3 > 0 \\ \Delta = 4I_1^3 I_3 + I_1^2 I_2^2 - 4I_2^3 + 18I_1 I_2 I_3 - 27I_3^2 \geq 0 \end{cases} \quad (44)$$

1.4 Уравнения состояния простых кристаллических решёток

Следуя работе [24] введем разделение на тепловую $\tilde{}$ и холодную $\hat{}$ составляющие.

Запишем разложение в ряд по тепловому параметру для тепловой составляющей тензора напряжений и энергии

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}} = \frac{1}{2V} \sum_k \sum_{n=1}^{\infty} \hat{\mathbf{A}}_k^{2n+1} \hat{\mathbf{F}}_k \odot \langle {}^{2n} \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_t, \quad (45)$$

$$\tilde{U} = \frac{1}{4} \sum_k \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n+1}{n} \hat{\mathbf{A}}_k^{2n} \hat{\mathbf{F}}_k \odot \langle {}^{2n} \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_t, \quad (46)$$

где V — объём системы. Объём определяется как $V_n N$ — произведение объёма элементарной ячейки на количество частиц; k — индекс связей между частицами, n — индекс степени ряда, $\hat{\mathbf{A}}_k$ — k -ый вектор между частицами, ${}^{n+1} \hat{\mathbf{F}}_k$ — тензорные производные от силы взаимодействия между частицами, ${}^n \tilde{\mathbf{A}}_k$ — тензор ранга n , получаемый n -кратным тензорным произведением векторов $\tilde{\mathbf{A}}_k$.

$${}^{n+1} \mathbf{F}_k = \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n \mathbf{F}_k}{d\mathbf{A}_k^n} \right|_{\tilde{\mathbf{A}}_k}, \quad (47)$$

$${}^n \tilde{\mathbf{A}}_k = {}^n \tilde{\mathbf{A}}_k. \quad (48)$$

Запишем производные для центрально-симметричного потенциала:

$$\begin{aligned}
d\widehat{\mathbf{A}}_k &= \mathbf{E} \cdot d\widehat{\mathbf{A}}_k, \\
d\widehat{A}_k &= \frac{1}{2\widehat{A}_k} \left(\mathbf{E} \cdot \widehat{\mathbf{A}}_k + \widehat{\mathbf{A}}_k \cdot \mathbf{E} \right) \cdot d\widehat{\mathbf{A}}_k = \frac{\widehat{\mathbf{A}}_k}{\widehat{A}_k} \cdot d\widehat{\mathbf{A}}_k, \\
\frac{d}{d\widehat{A}_k} \widehat{\mathbf{F}}_k &= \frac{d}{d\widehat{A}_k} \left(\widehat{F}_k \widehat{\mathbf{A}}_k \right) = \frac{d}{d\widehat{A}_k} \left(-\frac{\Pi'_k}{\widehat{A}_k} \widehat{\mathbf{A}}_k \right) = \\
&= -\frac{\Pi''_k}{\widehat{A}_k^2} \widehat{\mathbf{A}}_k \widehat{\mathbf{A}}_k + \frac{\Pi'_k}{\widehat{A}_k^3} \widehat{\mathbf{A}}_k \widehat{\mathbf{A}}_k + \frac{\Pi'_k}{\widehat{A}_k} \mathbf{E}, \\
\frac{d^2}{d(\widehat{A}_k)^2} \widehat{\mathbf{F}}_k &= \left(\frac{\Pi'''_k}{\widehat{A}_k^3} - 3\frac{\Pi''_k}{\widehat{A}_k^4} + 3\frac{\Pi'_k}{\widehat{A}_k^5} \right) \widehat{\mathbf{A}}_k \widehat{\mathbf{A}}_k \widehat{\mathbf{A}}_k + \\
&+ 2 \left(\frac{\Pi''_k}{\widehat{A}_k^2} - \frac{\Pi'_k}{\widehat{A}_k^3} \right) \mathbf{E} \widehat{\mathbf{A}}_k + \left(\frac{\Pi''_k}{\widehat{A}_k^2} - \frac{\Pi'_k}{\widehat{A}_k^3} \right) \widehat{\mathbf{A}}_k \mathbf{E}.
\end{aligned} \tag{49}$$

Ограничиваясь первым порядком разложения получим уравнений (45) и (46):

$$\begin{aligned}
\tilde{\tau} &= \frac{1}{4V} \sum_k \left(\frac{\Pi'''_k}{\widehat{A}_k^3} - 3\frac{\Pi''_k}{\widehat{A}_k^4} + 3\frac{\Pi'_k}{\widehat{A}_k^5} \right) \widehat{\mathbf{A}}_k \widehat{\mathbf{A}}_k \widehat{\mathbf{A}}_k \widehat{\mathbf{A}}_k \cdot \cdot \langle \widetilde{\mathbf{A}}_k \widetilde{\mathbf{A}}_k \rangle_t + \\
&+ 2 \left(\frac{\Pi''_k}{\widehat{A}_k^2} - \frac{\Pi'_k}{\widehat{A}_k^3} \right) \widehat{\mathbf{A}}_k \mathbf{E} \widehat{\mathbf{A}}_k \cdot \cdot \langle \widetilde{\mathbf{A}}_k \widetilde{\mathbf{A}}_k \rangle_t + \left(\frac{\Pi''_k}{\widehat{A}_k^2} - \frac{\Pi'_k}{\widehat{A}_k^3} \right) \widehat{\mathbf{A}}_k \widehat{\mathbf{A}}_k \mathbf{E} \cdot \cdot \langle \widetilde{\mathbf{A}}_k \widetilde{\mathbf{A}}_k \rangle_t,
\end{aligned} \tag{50}$$

$$\tilde{U} = \frac{1}{2} \sum_k \left(\frac{\Pi''_k}{\widehat{A}_k^2} - \frac{\Pi'_k}{\widehat{A}_k^3} \right) \widehat{\mathbf{A}}_k \widehat{\mathbf{A}}_k \cdot \cdot \langle \widetilde{\mathbf{A}}_k \widetilde{\mathbf{A}}_k \rangle_t + \frac{\Pi'_k}{\widehat{A}_k} \mathbf{E} \cdot \cdot \langle \widetilde{\mathbf{A}}_k \widetilde{\mathbf{A}}_k \rangle_t. \tag{51}$$

В работе [24] был получен коэффициент Грюнайзена в предположении о шаровой природе тензора $\langle \widetilde{\mathbf{A}}_k \widetilde{\mathbf{A}}_k \rangle_t$ далее будет показано, что такое предположение верно только на некоторых участках границы потери устойчивости.

2 Устойчивость кристаллических структур

К настоящему моменту в механике сплошных сред разработано несколько подходов к исследованию устойчивости. Наиболее естественны из них является наложение условий на вид функции удельной (приходящейся на единицу объема) потенциальной энергии деформации (w). Данная функция определяет работу, которую нужно совершить для деформации материала и количество энергии выделяющееся при разгрузке. Тогда для устойчивого линейно-упругого материала наблюдается минимум энергии и критерием устойчивости будет положительная определенность квадратичной формы w [28]. Устойчивость нелинейно деформированного материала была рассмотрена Адамаром и получено необходимое условие устойчивости — неравенства Адамара [72]. Следуя Адамару мы исследуем устойчивость предварительно деформированного тела относительно произвольной малой деформации т.е. путем наложения малой деформации на конечную. Данный метод ограничивает нас только аффинными конечными деформациями, а так же предполагает, что для данного материала существует производная от w по деформационному градиенту. Другим подходом к определению устойчивости является исследование распространение плоских волн в материале, тогда требование положительности и вещественности скорости распространения плоских волн совпадает с условием сильной эллиптичности уравнений равновесия и строгим неравенством Адамара. Для изотропных упругих сред условие сильной эллиптичности было получено Зубовым [20], для моментно-упругих сред в работе Еремеева [15]. В работах [35, 28] было доказана достаточность условия сильной эллиптичности для граничных условий первого рода. Для линейно-упругого изотропного материала условие сильной эллиптичности выполняется автоматически при положительной определенности w [28]. В некоторых случаях можно использовать более слабый критерий выпуклости энергии для определения устойчивости [94]. Используя приближение Коши-Борна [47, 62], можно применить методы механики сплошной среды к исследованию дискретных сред и, в частности, кристаллических структур. Для

дискретной системы w определяется как сумма потенциальных энергий взаимодействующих частиц, отнесенная к удвоенному объему элементарной решетки и носит название энергии Коши-Борна [47]. Борн доказал, что кристаллическая решетка устойчива по отношению к малым деформациям, если w , вычисленная в положении равновесия, является положительно-определенной квадратичной формой. Для дискретной системы «волновым» критерием устойчивости является требование вещественности частот фононов. Сравнение различных методов определения устойчивости кристаллической решетки было проведено в работах [59, 60] и [57, 58], где рассматривались парные и многочастичные потенциалы взаимодействия. Наиболее простой двумерной кристаллической структурой, используемой в качестве примера во многих работах по дискретным системам, является квадратная решетка. В работе [57] показано, что такая решетка неустойчива, однако авторы [66] и [50] допускают устойчивость, в работах [102] указывается отличие границ области устойчивости вследствие потери эллиптичности и фононных колебаний.

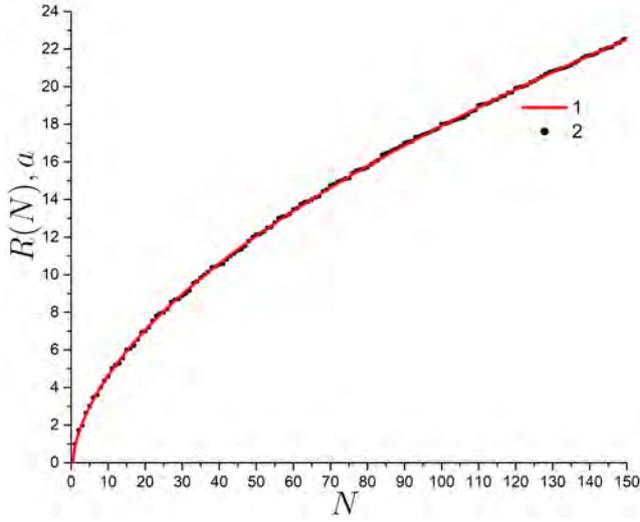
Устойчивость трехмерных ГЦК и ГПУ решеток для парных потенциалов была показана в работе [115], а в статьях [53, 79, 92, 117] для потенциала погруженного атома, исследуя фононный спектр. Условия нагружения, как показано в работе [116], имеют определяющее влияние на устойчивость материала. Устойчивость ГЦК и ОЦК кристаллов при сжатии исследована в статье [91] для псевдо-потенциалов. В работе [87] предложен критерий локальной устойчивости для идеальных кристаллов. Динамический критерий был применен для исследования устойчивости графена [34], взаимодействие описывалось парным моментным потенциалом [5]; для многочастичного потенциала [101] в статье [12] было получено различие между областями устойчивости относительно малых однородных деформаций и вещественности частот фононов. Для потенциала AIREBO получена неустойчивость некоторых алмазоподобных фаз, получающихся при сшивке или совмещении фуллереноподобных кластеров [88]. В работе [99] исследована устойчивость тонкой пленки GaN в процессе роста.

Необходимость определения устойчивости кристаллов связано с тем, что потеря устойчивости приводит не только к разрушению материала, но и к фазовым переходам. Как показано в работе [82, 83] структурные переходы могут быть использованы для получения необходимых материалов (Si->SiO). Также материалов испытывающих фазовый переходом может наблюдаться асимметрия поведения по отношению к растяжению–сжатию образца [82, 83]. Сложность теоретического исследования структуры после потери устойчивости вызвана не однородным деформированным состоянием, возникающим в материале при фазовом переходе [80] и приводящим к появлению различных двухфазных состояний [64, 14, 36, 65] с меньшей энергией. Структурные переходы могут оказывать определяющее влияние на поведение нанокомпозитов, где поверхностная энергия сравнима с внутренней энергией включений [55, 2, 10, 69], что приводит к большим деформациям включения, а как следствие и структурным переходам при изменении состоянии матрицы.

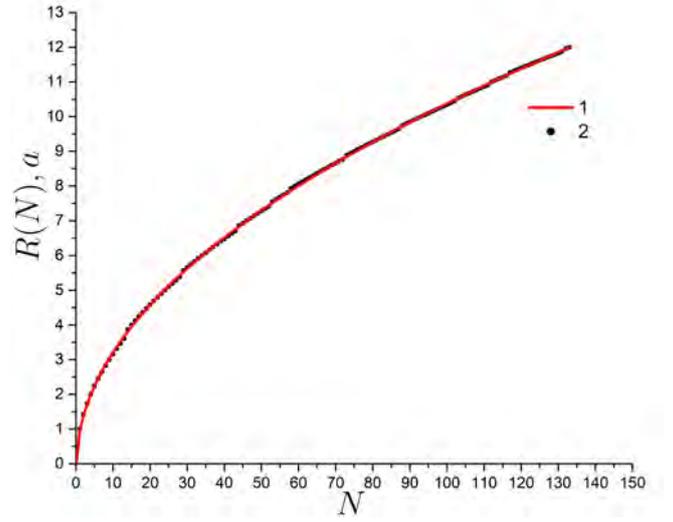
2.1 Расположение координационных сфер

Определим положения координационных сфер для треугольной решетки. Под координационной сферой будем понимать частицы, находящиеся на одинаковом расстоянии от отсчетной. Будем рассматривать недеформированную треугольную решетку, в которой расстояние между ближайшими частицами составляет a .

Зависимость расстояния до координационной сферы от её номера для треугольной решетки представлена на рис.2а, а для ГЦК на рис. 2б. Получены аппроксимационные зависимости (52) и (53) соответственно. Благодаря высокой точности аппроксимации она может использоваться для выбора радиуса обрезания потенциала, учета влияния нескольких координационных сфер при выводе аналитических формул и записи граничных условий моделирующих поведение крупных объёмов материала.



(а) Треугольная решетка



(б) ГЦК решетка

Рис. 2: Зависимость расстояния (в единицах a) до координационной сферы от ее номера для недеформированной решетки 1 — точное значение, 2 — аппроксимация: (а) — (52), (б) — (53).

$$R(N) = -0.60815 + 1.48591N^{0.54781}, \quad (52)$$

$$R(N) = -0.07916 + 1.03142N^{0.50298}. \quad (53)$$

2.2 Поджатие связей

При учете взаимодействия не только с ближайшими соседями равновесное расстояние не напряженной решетки отличается от равновесного расстояния потенциала, в следствии возникающих внутренних напряжений. Для определения величины поджатия связей используется следующий метод. Согласно [23] тензор жесткости не напряженной решетки ($\boldsymbol{\tau} = 0$) для парного центрального потенциала имеет вид (54).

$${}^4\mathbf{C} = \frac{1}{2V} \sum_k \left(\frac{\Pi''}{A_k^2} - \frac{\Pi'}{A_k^3} \right) \mathbf{A}_k \mathbf{A}_k \mathbf{A}_k \mathbf{A}_k. \quad (54)$$

Зная тензор напряжений (55) в дискретной среде [23].

$$\boldsymbol{\tau} = -\frac{1}{2V} \sum_k \mathbf{A}_k \mathbf{F}_k. \quad (55)$$

И из закона Гука (56) получим систему линейных уравнений

$$\boldsymbol{\tau} = {}^4\mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (56)$$

Симметрия простых решеток в двумерном и трехмерном случаях приводят к тому, что решением системы (56) является шаровой тензор деформаций, для сложных решеток, в частности ГПУ, одновременно с пожатием связей необходимо определять вектор сдвига подрешеток, дополнительные уравнения записываются, используя первую и вторую производные от энергии по вектору сдвига подрешеток. Решение определяется в ходе итерационной процедуры ввиду нелинейности закона взаимодействия, на каждом шаге которой вычисляется тензор напряжений и мгновенный тензор жесткости по формулам (55) и (54). Следует отметить, что ошибка в определении тензора жесткости по формуле (54) в данном случае несущественна, поскольку отклонение от ненапряженного состояния является малым, и полностью устраняется в ходе итерационной процедуры.

Как видно из рис.3 и соответствующих аппроксимаций (57), (58) зависимость величины поджатия связей с высокой точностью описывается экспоненциальной зависимостью, однако коэффициенты сильно зависят от параметров потенциала.

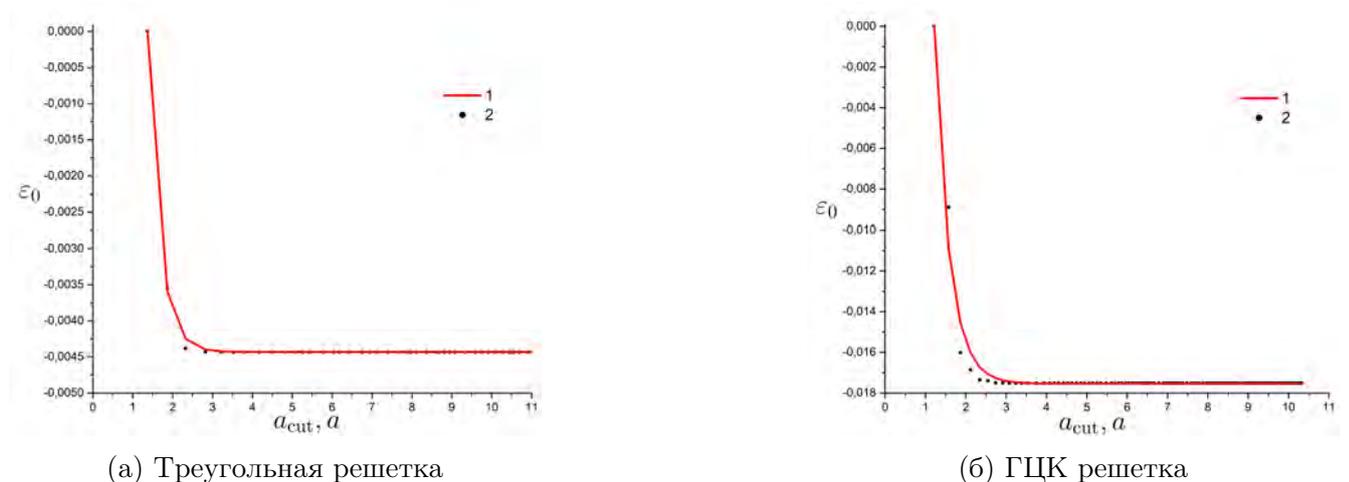


Рис. 3: Зависимость объемной деформации (ε_0) для: (а) получения ненапряженной треугольной решетки, (б) ненапряженной ГЦК решетки от количества учитываемых координационных сфер (радиуса обрезания потенциала); 1 — точное значение, 2 — аппроксимация: (а) — (57), (б) — (58).

$$\varepsilon_0(a_{\text{cut}}) = -0.00443 + 0.42833e^{-3.3450a_{\text{cut}}}, \quad (57)$$

$$\varepsilon_0(a_{\text{cut}}) = -0.01754 + 0.47868e^{-2.7206a_{\text{cut}}}. \quad (58)$$

2.3 Энергия системы

Аналогично поджатию связей потенциальная энергия, приходящаяся на одну частицу, в ненапряженном состоянии экспоненциально зависит от количества учитываемых координационных сфер (рис. 4а) и (рис. 4б) для треугольной и ГЦК решетки соответственно.

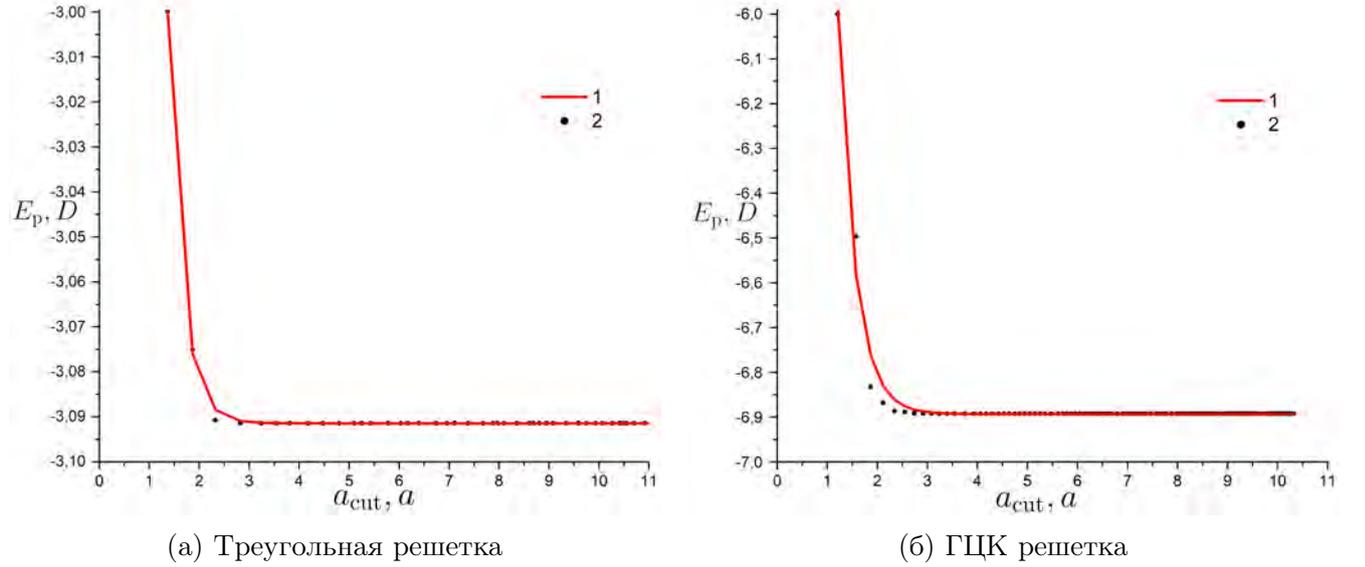


Рис. 4: Зависимость потенциальной энергии (приходящейся на частицу) от количества учитываемых координационных сфер для ненапряженной решетки; 1 — точное значение, 2 — аппроксимация: (а) — (59), (б) — (60).

Аппроксимационные формулы (59) и (60) позволяют оценить значения энергии треугольной решетки для различных параметров системы.

$$E_p(a_{\text{cut}}) = -3.09145 + 11.9164e^{-3.5644a_{\text{cut}}}. \quad (59)$$

$$E_p(a_{\text{cut}}) = -6.89335 + 31.2889e^{-2.9319a_{\text{cut}}}. \quad (60)$$

2.4 Релаксация энергии

В данном разделе рассмотрен процесс перераспределения энергии по степеням свободы и перехода моделируемой системы к стационарному состоянию. В начальный момент времени мы задаём частицам случайные начальные скорости так, что полный импульс системы равен нулю. Затем происходит перераспределение и переход кинетической энергии в потенциальную, при этом, в равновесном состоянии $\tilde{K} \simeq \frac{1}{2}\tilde{K}_0$, здесь и далее \tilde{K} будем обозначать кинетическую энергию, приходящуюся на частицу. Исследованы два случая, первый, когда компоненты скорости распределены равномерно на отрезке $[0, \sqrt{\frac{2\tilde{K}}{m}}]$ и второй, если распределение компонент скорости соответствует нормальному распределению.

Из рис. 5 видно, что при сферическом распределении скоростей частиц амплитуда колебаний энергии убывает до 10% от среднего за $2T_0$, через $6T_0$ амплитуда колебаний не превосходит 2.5%. Таким образом, в качестве времени релаксации можно выбрать $6T_0-10T_0$.

В отличие от одномерного [25] в двумерном кристалле энергия ведет себя как суперпозиция нескольких затухающих колебаний. Очевидно, что колебания никогда не затухают полностью и среднеквадратичное отклонение составляет $\simeq 1\%$.

Процесс перераспределения кинетической энергии по степеням свободы происходит значительно быстрее (рис.6) и заканчивается (д) примерно за T_0 , когда распределение частиц по скоростям принимает вид распределения Максвелла-Больцмана [85]. Сравнивая с результатом для нормального начально распределения скоростей (рис. 7, рис. 8) видим, что поведение средних значение энергии не меняется даже на начальном этапе, а распределение по скоростям практически совпадает после $0.5T_0$.

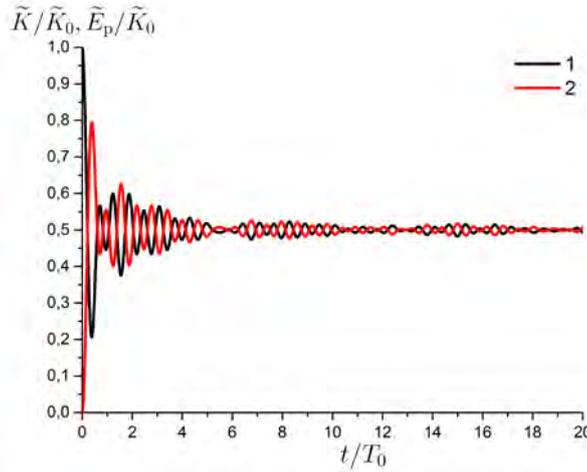
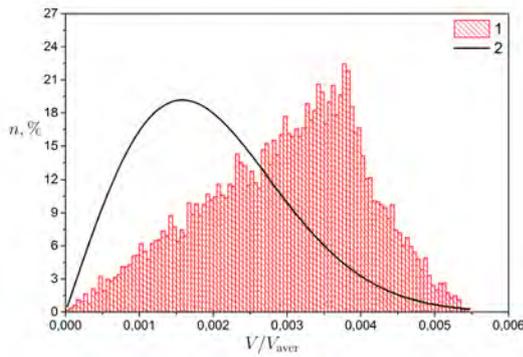
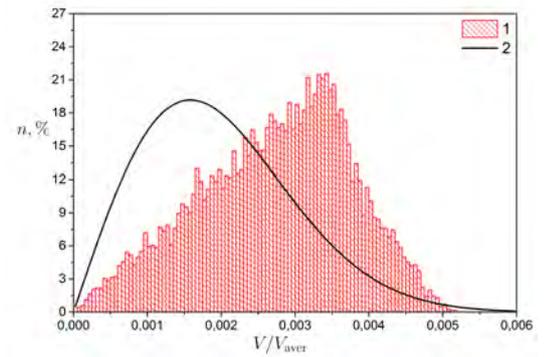


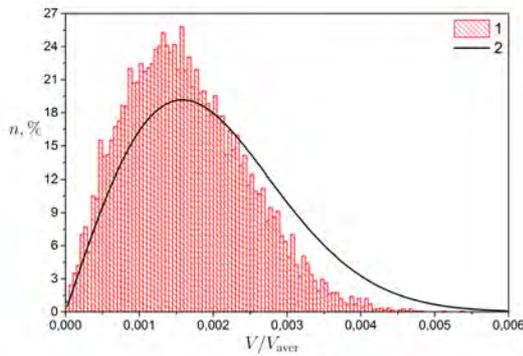
Рис. 5: Зависимость кинетической и потенциальной энергии от времени: 1 — отношение средней кинетической энергии, приходящейся на частицу, к начальной кинетической энергии, 2 — отношение отклонения от начального значения средней потенциальной энергии, приходящейся на частицу, к начальной кинетической энергии.



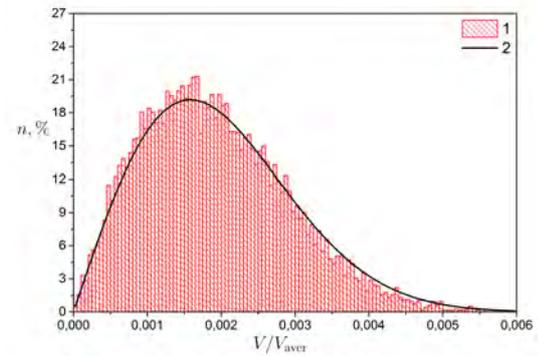
(а) $t = 0$



(б) $t = 0.1T_0$



(в) $t = 0.5T_0$



(г) $t = T_0$

Рис. 6: Гистограмма распределения частиц по модулю скорости для различных моментов времени t , 1 — Распределение Максвелла для данной температуры, 2 — результат моделирования; $V_{\text{aver}} = \sqrt{\frac{2\tilde{K}}{m}}$, n — доля частиц скорость которых находится в заданном интервале.

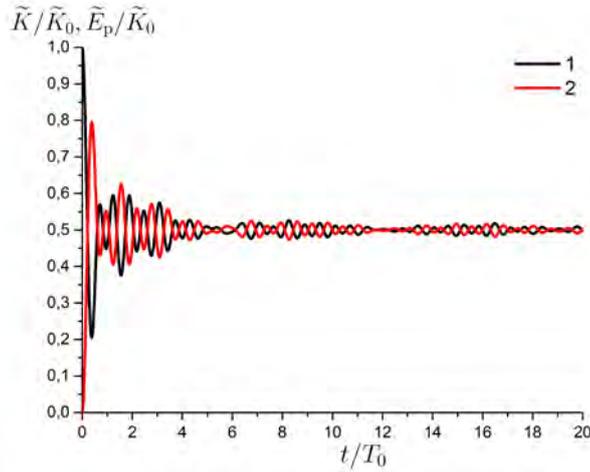
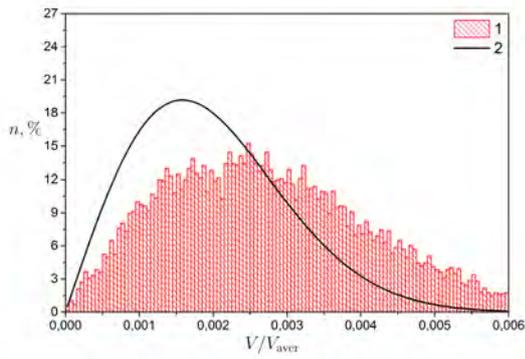
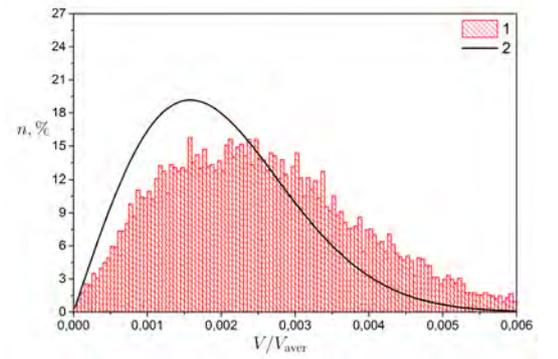


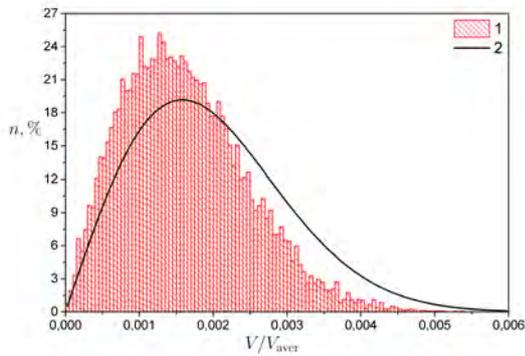
Рис. 7: Зависимость кинетической и потенциальной энергии от времени: 1 — отношение средней кинетической энергии, приходящейся на частицу, к начальной кинетической энергии, 2 — отношение отклонения от начального значения средней потенциальной энергии, приходящейся на частицу, к начальной кинетической энергии.



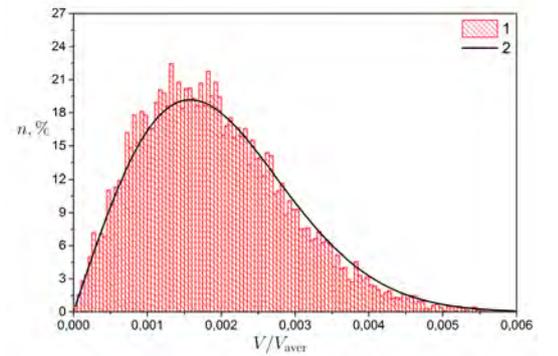
(а) $t = 0$



(б) $t = 0.1T_0$



(в) $t = 0.5T_0$



(г) $t = T_0$

Рис. 8: Гистограмма распределения частиц по модулю скорости для различных моментов времени t , 1 — распределение Максвелла для данной температуры, 2 — результат моделирования; $V_{\text{aver}} = \sqrt{\frac{2\tilde{K}}{m}}$, n — доля частиц скорость которых находится в заданном интервале.

Таким образом, можно сделать вывод, что время релаксации энергии в системе частиц довольно мало и в расчетах можно предполагать достаточно однородное состояние системы после $10T_0$. Начальные скорости, при условии достаточно однородного распределения влияют на поведение системы на временах $< T_0$, затем начальное состояние «забывается».

2.5 Алгоритм исследования устойчивости методом молекулярной динамики

Данная глава посвящена моделированию устойчивости кристаллических решеток при конечных деформациях методом молекулярной динамики. Проводится сравнение полученных областей устойчивости кристаллических решеток в пространстве деформаций с результатами аналитического решения [95], а также методом молекулярной динамики исследуются неустойчивые конфигурации и их переход в новое равновесное состояние. Рассмотрим алгоритм определения областей устойчивости из условий, описанных в предыдущем пункте. Будем исследовать устойчивость каждой точки в пространстве деформаций независимо. В данной работе не учитывается история нагружения и предполагается что динамические процессы в образце начинают происходить после деформации, таким образом мы разделяем устойчивость структуры кристалла в точке пространства деформаций и влияние скоростных и усталостных характеристик нагружения. Для того, чтобы поверхностные эффекты не искажали результаты исследования и получения сходства поведения с бесконечной решеткой, рассмотренной в [95], будем использовать периодические граничные условия Борна-Кармана. Будем рассматривать кристаллы с идеальной решеткой. Взаимодействие частиц описывается потенциалом Морзе (26), параметр $\alpha a = 6$ и ограничено тремя координационными сферами в не напряженном состоянии и $a_{\text{cut}} = \frac{1}{2} (R(3) + R(4))$, определяемым по формулам (52), (53) если не оговорено иное. В начальный момент времени все частицы имеют малую случайную начальную скорость, согласно нормальному распределению, так чтобы средняя кинетическая энергия была равна $10^{-5}D$, центр масс системы неподвижен.

Подвергаем образец аффинной деформации, переводя его в новое равновесное состояние, и соответствующим образом изменяем границы периодической ячейки. Количество частиц, которые взаимодействуют с отсчетной, т.е. находящимися внутри круга радиусом a_{cut} , существенно зависит от деформации. Таким образом мы создаем достаточно большую область решетки, размером не менее $3a_{\text{cut}}$ в каждом направлении и определяем взаимодействующие частицы для каждой точки в пространстве деформаций. Естественным будет принять за начало координат в пространстве деформаций положение ненапряженной решетки. При учете взаимодействия с более чем 1 координационной сферой, необходимо определить расстояние между частицами в ненапряженной системе, для чего используем результаты, описанные в параграфе 2.2.

Поскольку в устойчивом случае частицы будут двигаться вблизи положения равновесия и их окружение будет оставаться неизменным, для ускорения расчетов используем списки Верле [111], определенные после деформации. Проведем интегрирование уравнений движения методом Верле [111], для определения устойчивости конфигурации. 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. Если конфигурация устойчива, то примерно $\frac{1}{2}\tilde{K}_0$ переходит в потенциальную энергию и значение \tilde{K} осциллирует у данного уровня [25].

В неустойчивой конфигурации через определенное время происходит перестройка внутренней структуры образца и переход к устойчивому состоянию с меньшей энергией. Данный переход сопровождается выделением энергии и поскольку система консервативна кинетическая энергия резко возрастает. Таким образом, критерием устойчивости было выбрано $\tilde{K} < (1 + \eta)\tilde{K}_0$, где коэффициент $\eta = 10^{-5}$, позволяет учесть возможную вычислительную ошибку на первом шаге. Ввиду малости начальной кинетической энергии выбор коэффициента $(1 + \eta)$ достаточен для фиксирования появления любых дефектов структуры в материале.

2.6 Области устойчивости треугольной решетки

Рассмотрим двумерный кристалл с идеальной треугольной решеткой, которая представляет собой набор равносторонних треугольников, выберем ось 1 вдоль основания треугольника, а ось 2 вдоль высоты. Пусть деформационный градиент содержит только диагональные компоненты:

$$\mathbf{R} \overset{\circ}{\nabla} = \begin{pmatrix} 1 + \varepsilon_{11} & 0 \\ 0 & 1 + \varepsilon_{22} \end{pmatrix} \quad (61)$$

Разобьем пространство деформаций на регулярную треугольную сетку и, выполняя описанный в параграфе 2.5 алгоритм определяем устойчивые узлы методом молекулярной динамики. Области устойчивости и области сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентного континуума [98, 96, 95] показаны на рис. 9.

На рис. 9 мы видим три области устойчивости, две большие области соответствуют горизонтальной и вертикальной ориентациям треугольной решетки (рис. 10а), при этом переходе две частицы со второй координационной сферы, расположенные вдоль оси 2 переходят, переходят на первую, а две частицы с первой, расположенные вдоль оси 1 на вторую, координаты точек отвечающих ненапряженным конфигурациям соответственно равны $(0, 0)$ и $(\sqrt{3} - 1, \frac{1}{\sqrt{3}} - 1)$. Третья маленькая область соответствует квадратной решетке (рис. 10в), данный переход сопровождается перемещением на четвертую координационную сферу 4 из 6 частиц второй сферы и выходу на вторую сферу двух атомов с первой сферы, таким образом на каждой из трех первых координационных сфер мы получаем по 4 частицы, при этом ненапряженная квадратная решетка $(\sqrt{2} - 1, \sqrt{\frac{2}{3}} - 1)$ неустойчива.

Из рис. 11 и 12 можно сделать вывод, что радиус взаимодействия не оказывает влияние на области устойчивости треугольной решетки. Форма области устойчивости квадратной решетки не меняется при учете более двух координационных сфер, однако существенно изменяется при переходе от первой ко второй координационной сфере. Если мы ограничиваемся только одной сферой,

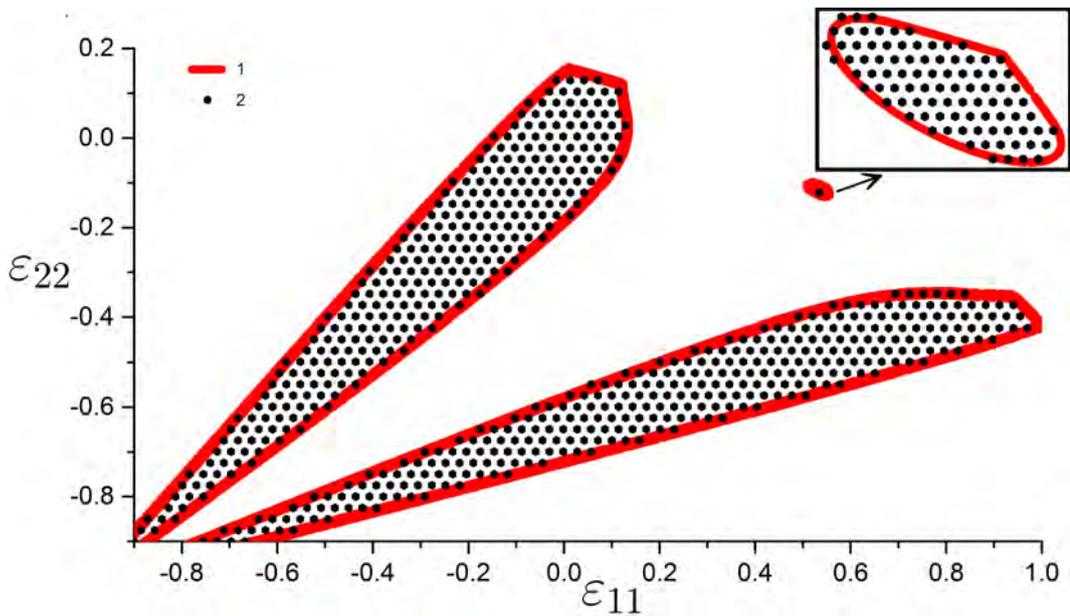


Рис. 9: Области устойчивости треугольной решетки в пространстве осевых деформаций. 1 (красная линия) – граница областей сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентной сплошной среды, 2(черные точки) – устойчивые узлы, полученные методом молекулярной динамики.

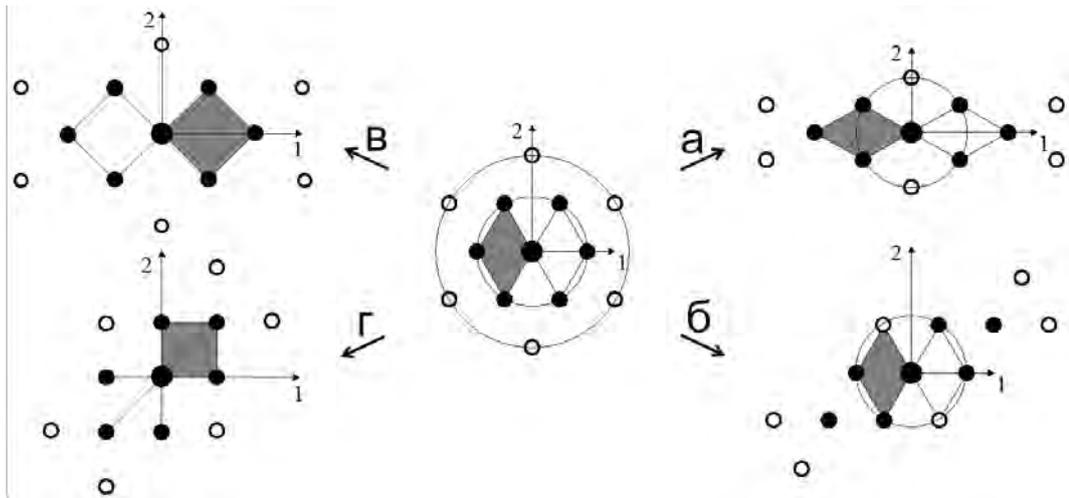
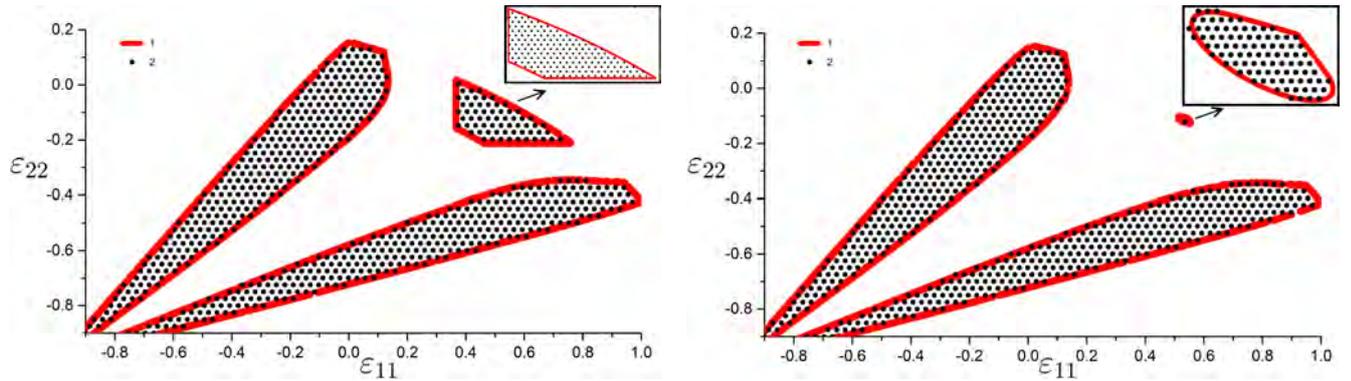


Рис. 10: Переход между устойчивыми структурами двумерной решетки [95]. Серым цветом выделена элементарная ячейка, цветом точек обозначены координационные сферы: первая – черный, вторая – белый. Переходы: а – к вертикальной ориентации треугольной решетки, б – получение треугольной решетки при сдвиге, в – к квадратной решетке, г – к квадратной решетке при сдвиге.

то область устойчивости квадратной решетки представляет собой трапецию со слегка скругленными основаниями. При двух сферах область устойчивости выглядит как треугольник со скругленным основанием, направленный вершиной к

напряженной конфигурации. Трапеции и треугольник будут равнобедренными в системе координат, где направления ε_{11} и ε_{22} эквивалентны.



(а) Взаимодействие ограничено одной координационной сферой

(б) Взаимодействие ограничено двумя координационными сферами

Рис. 11: Области устойчивости треугольной решетки в пространстве осевых деформаций; при различных параметрах a_{cut} . 1 (красная линия) – граница областей сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентной сплошной среды, 2 (черные точки) – устойчивые узлы, полученные методом молекулярной динамики.

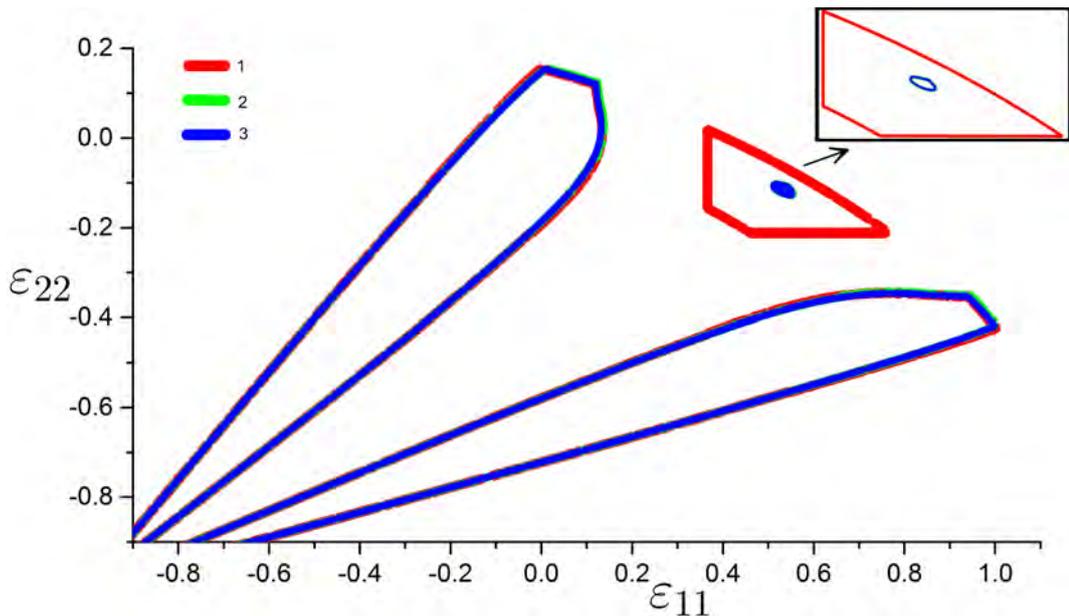


Рис. 12: Границы областей сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентной сплошной среды. 1 (красная линия) – взаимодействие с одной координационной сферой, 2 (зеленая линия) – взаимодействие с двумя координационными сферами, 3 (синяя линия) – взаимодействие с тремя координационными сферами в ненапряженном состоянии.

Параметр, определяющий ширину потенциальной ямы (αa), позволяет в широких пределах менять размер областей устойчивости треугольной решетки с сохранением их подобия рис. 13, 14. При увеличении αa и, соответствен-

но, уменьшении ширины потенциальной ямы область устойчивости квадратной решетки перемещается ближе к точке, соответствующей ненапряженной конфигурации, но в пределе только касается ее. Кроме того область принимает эллипсовидную форму, где большая полуось перпендикулярна линии гидростатического сжатия. В противоположность области треугольной решетки область квадратной увеличивается с ростом αa , и отсутствует при $\alpha a < 5.60$.

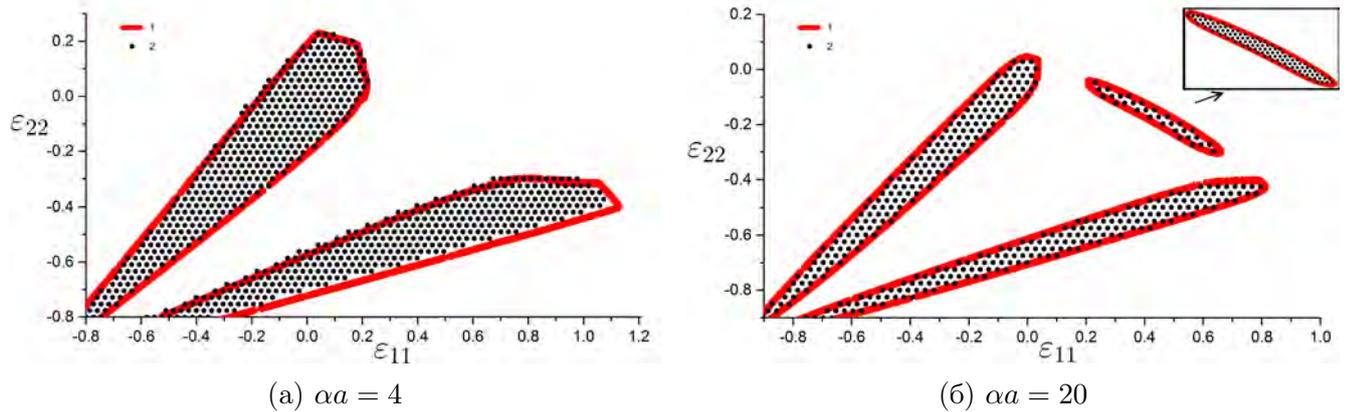


Рис. 13: Области устойчивости треугольной решетки в пространстве осевых деформаций; при различных параметрах αa . 1 (красная линия) – граница областей сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентной сплошной среды, 2 (черные точки) – устойчивые узлы, полученные методом молекулярной динамики.

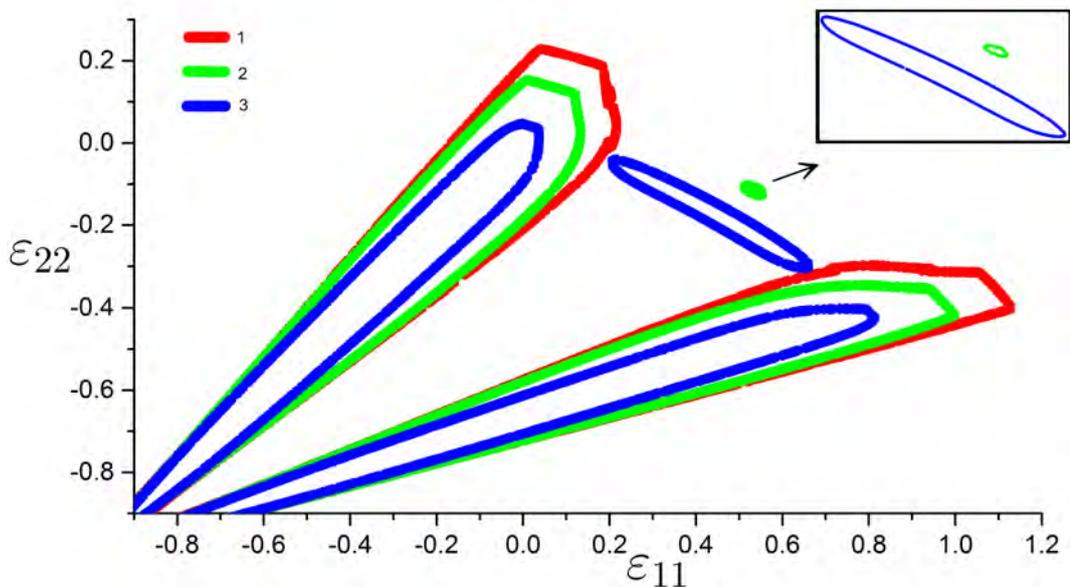


Рис. 14: Границы областей сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентной сплошной среды. 1 (красная линия) – $\alpha a = 4$, 2 (зеленая линия) – $\alpha a = 6$, 3 (синяя линия) – $\alpha a = 20$.

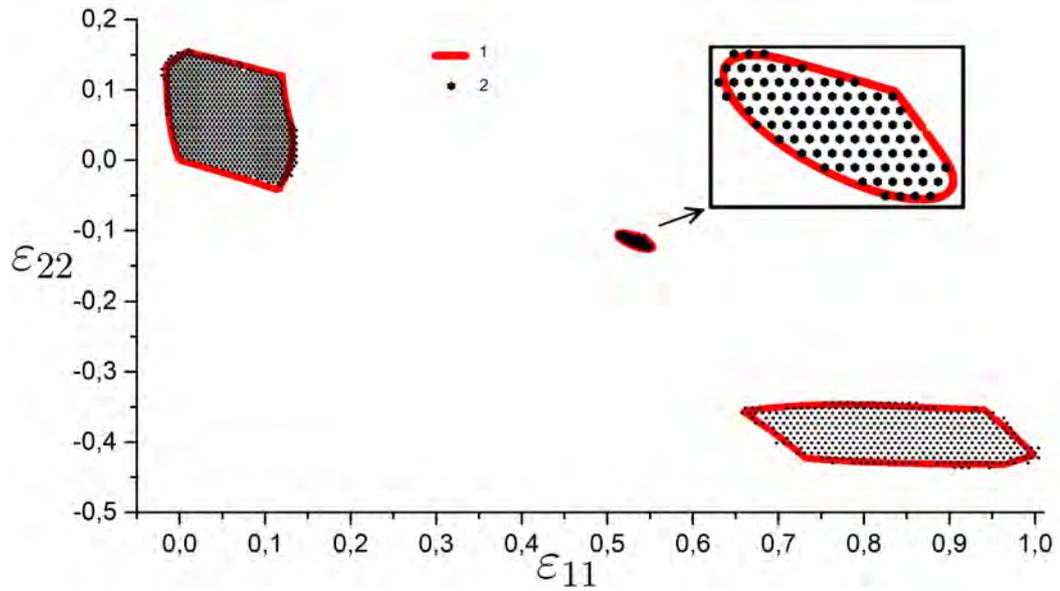


Рис. 15: Области устойчивости треугольной решетки в пространстве осевых деформаций; трехмерная задача. 1 (красная линия) — граница областей сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентной сплошной среды, 2 (черные точки) — устойчивые узлы, полученные методом молекулярной динамики.

Если дать возможность треугольной решетке испытывать колебания перпендикулярно плоскости, то при сжатии решетка потеряет устойчивости гораздо быстрее (рис. 15), как будет показано далее в следствии выхода из плоскости, область устойчивости квадратной решетки не изменится.

Добавим сдвиговую компоненту деформационного градиента:

$$\mathbf{R} \overset{\circ}{\nabla} = \begin{pmatrix} 1 + \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} \\ 0 & 1 + \varepsilon_{22} \end{pmatrix} \quad (62)$$

Пространство деформаций является трехмерным и разбивается на регулярную сетку в виде ГЦК решетки. Области устойчивости и области сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентного континуума [98, 95] с учетом сдвига будут иметь вид, показанный на рис. 16. Следует отметить, что при большом сжатии ($> 50\%$) существует множество областей устойчивости отвечающих треугольной и квадратной решеткам. Так же появляется область устойчивости правее области «А», при сжатии по оси ординат на 80%. Ввиду больших деформаций маловероятен переход кристалла в вышеперечисленные области в реальных задачах, поэтому рассмотрим пять областей обозначенных

«А»—«Д». Область «Д» образуется при приложении сдвиговой деформации к горизонтальной ориентации треугольной решетки, область «А» отвечает переходу в вертикальную ориентацию (рис. 10а), область «Б» — горизонтальная ориентация при сдвиге на межатомное расстояние вдоль оси абсцисс (рис. 10б), области «В» и «Г» — квадратная решетка, получаемая за счет осевой деформации (рис. 10в) и сдвига, соответственно (рис. 10г). Был рассмотрен сдвиг только оси 2 к оси 1, при другой компоненте сдвига мы получим аналогичные области устойчивости относительно вертикальной ориентации треугольной решетки.

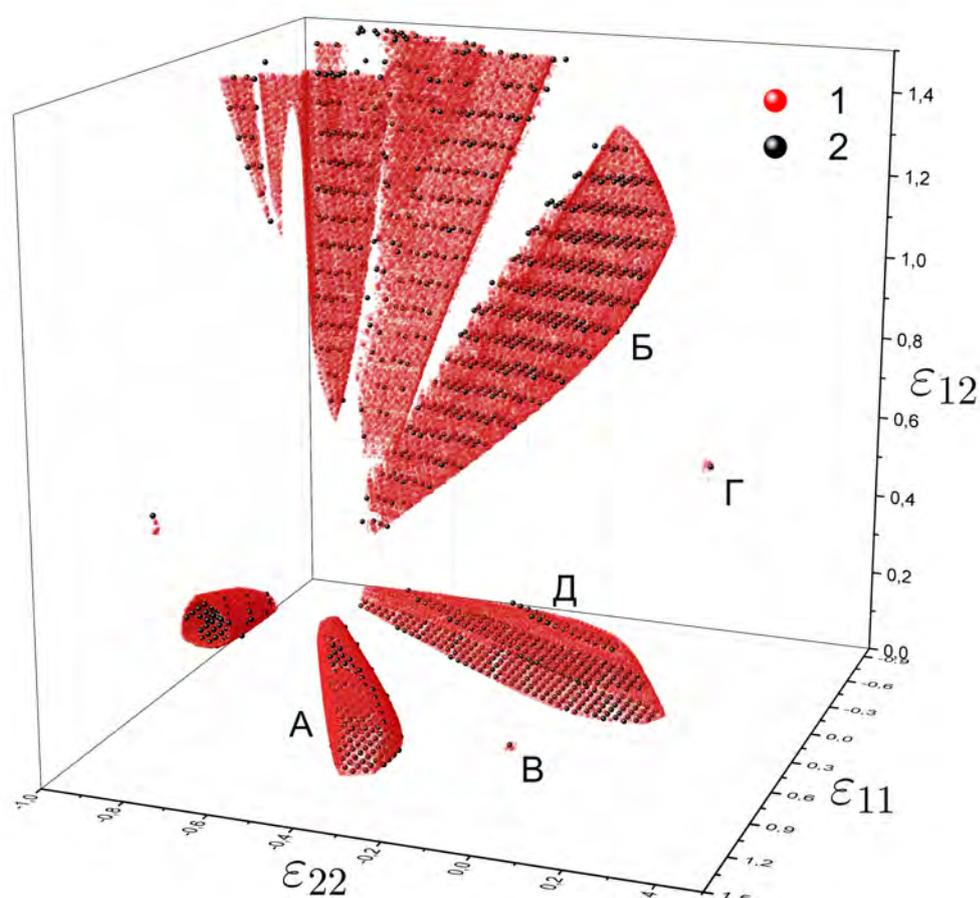


Рис. 16: Области устойчивости треугольной решетки в пространстве деформаций. 1 (красные точки) — граница областей сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентной сплошной среды, 2(черные точки) — устойчивые узлы, полученные методом молекулярной динамики.

2.7 Физический смысл границ областей устойчивости треугольной решетки

Для того, чтобы выяснить физический смысл границ областей устойчивости найдем «мгновенный» тензор жесткости для каждой точки в пространстве деформаций. Определим «мгновенный» тензор жесткости как реакцию деформированного материала на малую деформацию, тогда из закона Гука получим (63).

$$\Delta \tau = {}^4 C^M \cdot \cdot \Delta \varepsilon. \quad (63)$$

Компоненты тензора жесткости определим по формуле (64), с целью увеличения точности будем использовать метод центральных разностей, шаг малой деформации был выбран $\Delta \varepsilon_{kl} = 10^{-5}$.

$$\frac{\Delta \tau_{ij}}{\Delta \varepsilon_{kl}} = C_{ijkl}^M. \quad (64)$$

Тензор податливости равен:

$${}^4 S^M = ({}^4 C^M)^{-1}. \quad (65)$$

В силу симметрии решетки тензор жесткости треугольной решетки при произвольной осевой деформации имеет 8 ненулевых компонент, из них различны 6: C_{1111}^M , C_{1122}^M , C_{2211}^M , C_{2222}^M , C_{1212}^M , C_{2121}^M .

Тогда можно определить упругие модули как:

$$\begin{aligned} E_1^M &= 1/S_{1111}^M, & E_2^M &= 1/S_{2222}^M, & G_{12}^M &= C_{1212}^M, & G_{21}^M &= C_{2121}^M, \\ K^M &= \frac{1}{4} (C_{1111}^M + C_{2222}^M + C_{1122}^M + C_{2211}^M). \end{aligned} \quad (66)$$

Области, в которых модули отрицательны показаны на рис. 17–19. Деформации, при которых отрицателен модули Юнга вдоль оси 1 и 2 изображены на рисунке рис. 17, можно сделать вывод, что условие отрицательности модуля Юнга соответствует «внутренним» границам областей устойчивости, за исключением малой области при гидростатическом растяжении. На большей части

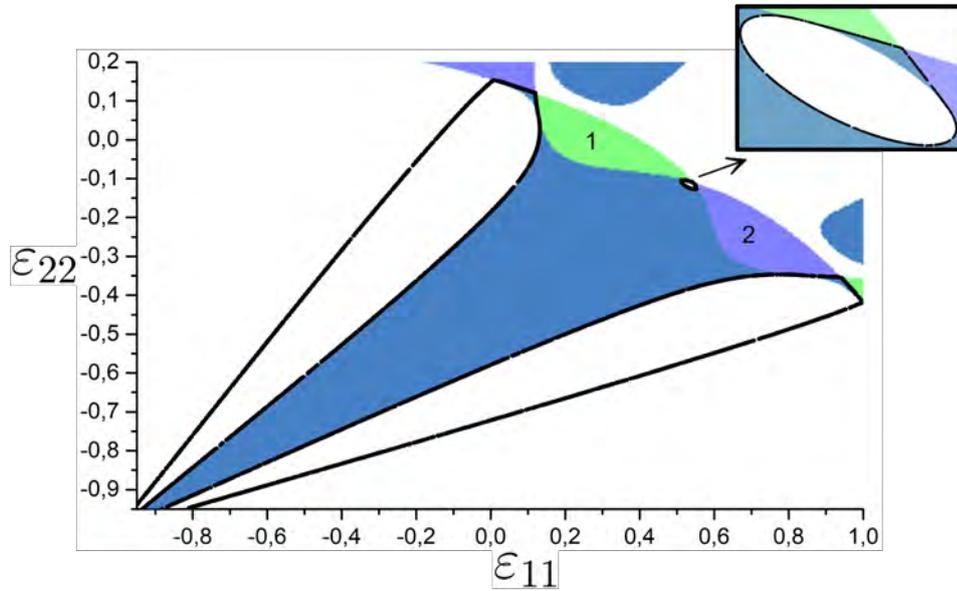


Рис. 17: Области в которых мгновенные модули Юнга отрицательны; 1 — $E_1^M < 0$, 2 — $E_2^M < 0$

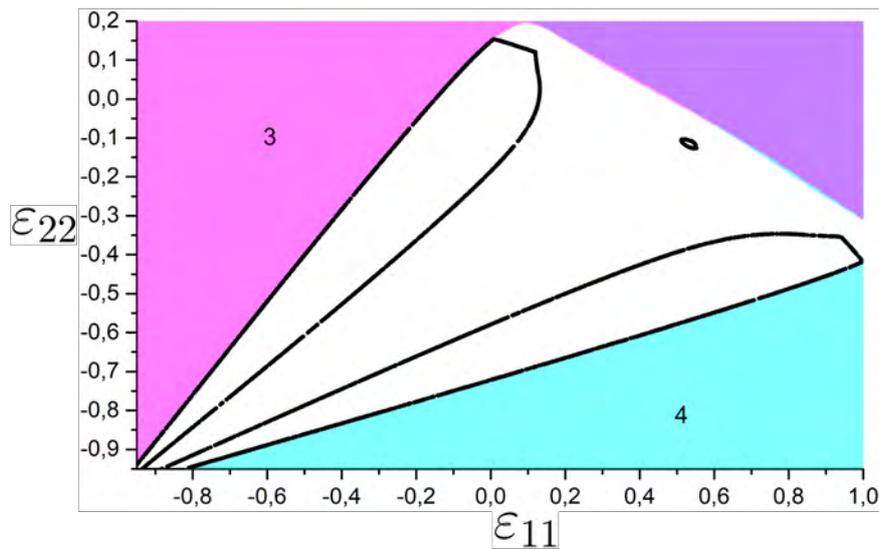


Рис. 18: Области, в которых мгновенные модули сдвига отрицательны; 3 — $G_{12}^M < 0$, 4 — $G_{21}^M < 0$

границы оба модуля меняют знак одновременно, кроме прямых отрезков границ областей устойчивости треугольной решетки, при растяжении в направлении квадратной и прямых участков в области устойчивости квадратной решетки. Как и следовало ожидать, точки, в которых выполняется условие $E_2^M < 0$, симметричны относительно точек $E_1^M < 0$.

Положительность модулей сдвига (рис. 18) нарушается на «внешних» границах областей устойчивости треугольной решетки. При этом граница области устойчивости квадратной решетки не соприкасается с точками соответствующими $G_{12}^M < 0$ и $G_{21}^M < 0$, за исключением случая, когда учитывается взаимодействие только с первой координационной сферой для ненапряженной решетки. Две границы соответствуют обращению в ноль модулей Юнга, а две других — модулей сдвига. Следует отметить, что при учете взаимодействия только с одной координационной сферой и увеличении области устойчивости квадратной решетки, два участка ее границы соответствуют отрицательным модулям сдвига.

Отрицательный модуль объемного сжатия наблюдается (рис. 19) в устойчивых точках, в которых были отрицательными одновременно оба модуля Юнга. Устойчивости решетки в данных точках связана с особенностью нагружения, поскольку на решетку накладывается деформация и граница периодической ячейки неподвижна, то возникают напряжения удерживающие решетку. Можно сделать вывод, что внешние границы областей устойчивости соответствуют переходу через 0 модулей сдвига (G_{12}^M для горизонтальной ориентации и G_{21}^M для вертикальной). На внутренних границах всех устойчивых областей равны нулю модули Юнга (E_1^M и E_2^M). Исключением из этих правил является переход от внутренней границы области устойчивости треугольной решетки к внешней, где сначала обращается в ноль только один из модулей Юнга (E_1^M для горизонтальной ориентации и E_2^M для вертикальной), затем отрицателен модуль объемного сжатия. Аналогичная картина наблюдается для области устойчивости квадратной решетки, где модули E_1^M , E_2^M , K^M отсекают выступ соответствующий гидростатическому растяжению. Более подробно механизм потери устойчивости и направление релаксации решетки будут рассмотрены в следующем параграфе.

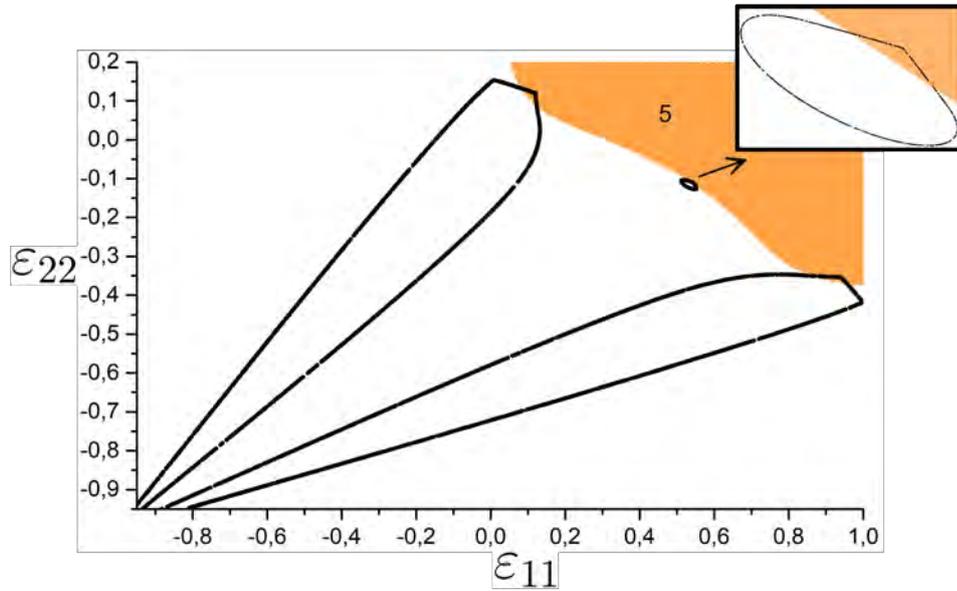


Рис. 19: Область, в которой мгновенный модуль объемного сжатия отрицателен; 1 — K^M

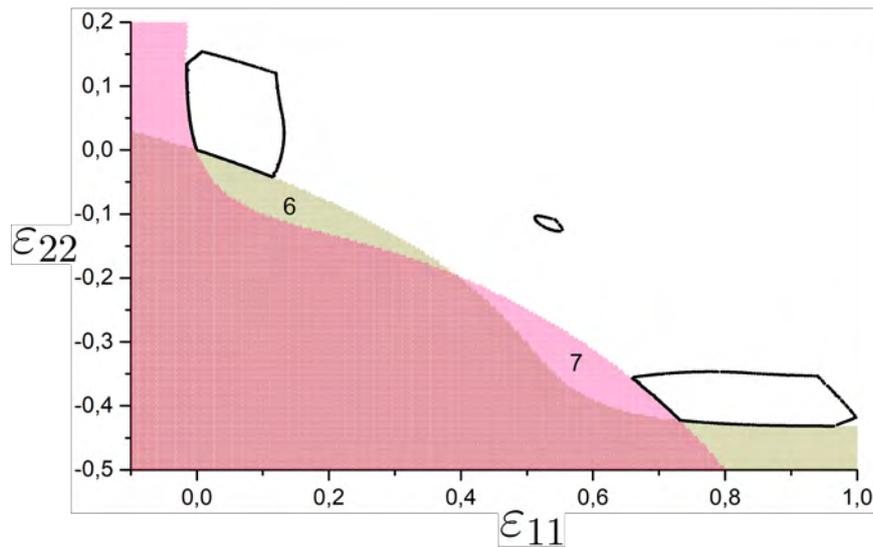


Рис. 20: Области, в которых мгновенные модули сдвига отрицательны; 6 — $G_{13}^M < 0$, 7 — $G_{23}^M < 0$

Если частицы в решетке имеют возможность двигаться перпендикулярно плоскости, то получим два дополнительных участка границы областей устойчивости, которые будут соответствовать обращению в ноль модулей сдвига $G_{13}^M = C_{1313}^M$ и $G_{23}^M = C_{2323}^M$ (рис. 20). Причем каждый участок границы будет соответствовать обращению в ноль только одного из модулей. Область устойчивости

квадратной решетки не касается данных границ, поскольку устойчива только в напряженном состоянии.

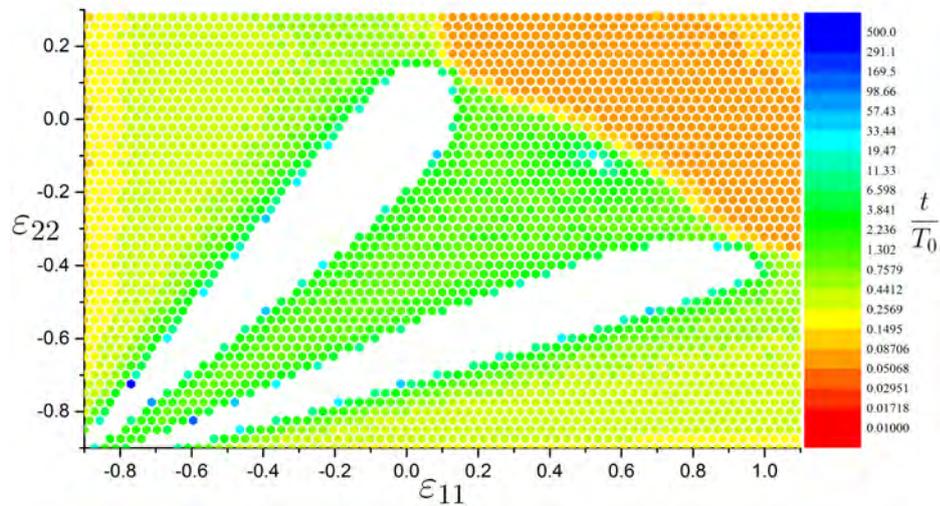
2.8 Релаксация структуры после потери устойчивости

Процесс потери устойчивости сопровождается перестройкой структуры материала, таким образом происходит уменьшение потенциальной энергии и как следствие увеличение температуры в замкнутой системе. Как показали вычислительные эксперименты наиболее чувствительным критерием устойчивости является энергетический критерий, а не условие изменения окружения частицы. Потеря устойчивости является вероятностным процессом и время развития неустойчивости увеличивается при приближении к границе области устойчивости, но существенно нелинейно зависит от деформаций. Энергия и напряжения релаксируют к уровню не напряженного материала. Существует несколько типов потери устойчивости: разрушение, перестройка внутренней структуры, амортизация материала. Направление развития неустойчивости также существенно зависит от деформаций. Границы, возникающие в следствии мартенситных фазовых превращений и двойникования в кристаллических телах, можно рассматривать как поверхности, на которых напряжения и перемещения непрерывны, а некоторые компоненты градиента тензора деформации претерпевают разрыв. Математическое моделирование фазовых превращений начинается с выбора функции энергии деформации, поэтому теория может предсказать, что произойдет с данным материалом в различных условиях нагружения.

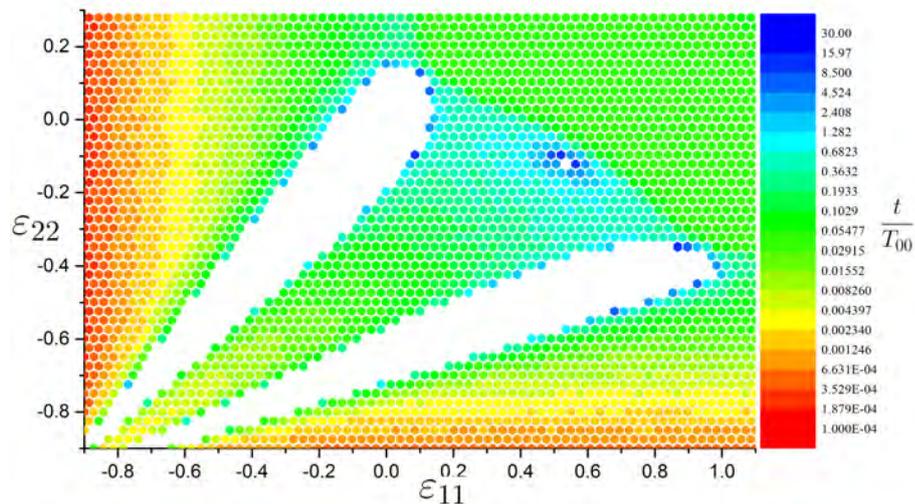
В этом разделе эволюция треугольной решетки исследуется с помощью моделирования методом молекулярной динамики, оценивается релаксация энергии из неустойчивых состояний и определяются микроструктуры, образующиеся после релаксации энергии. Взаимодействие между частицами описывается потенциалом Морзе (26). Исследование устойчивости проводится с использованием двух типов возмущений: «однородных» и «неоднородных»; в обоих случаях они вызваны введением начальной кинетической энергии. В рамках «однород-

ного» подхода каждой частице приписывается небольшая случайная скорость с нормальным распределением по частицам, так что средняя кинетическая энергия образца примерно на шесть порядков меньше глубины потенциальной ямы D , как описано в параграфе 2.5.

Процесс потери устойчивости неоднороден по времени (рис.21). Можно видеть, что медленнее всего неустойчивость развивается вблизи устойчивой квадратной решетки и в точках с отрицательными мгновенными модулями Юнга.



(а) Количество периодов T_0 до обнаружения неустойчивости

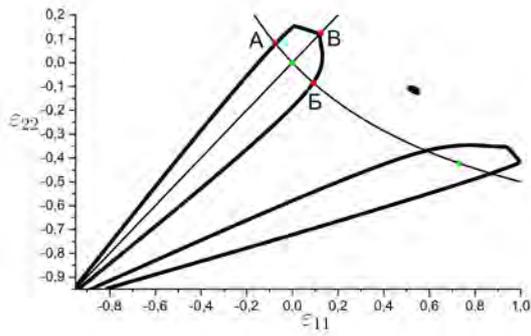


(б) Время до обнаружения неустойчивости относительно периода колебаний недеформированной пары частиц T_{00}

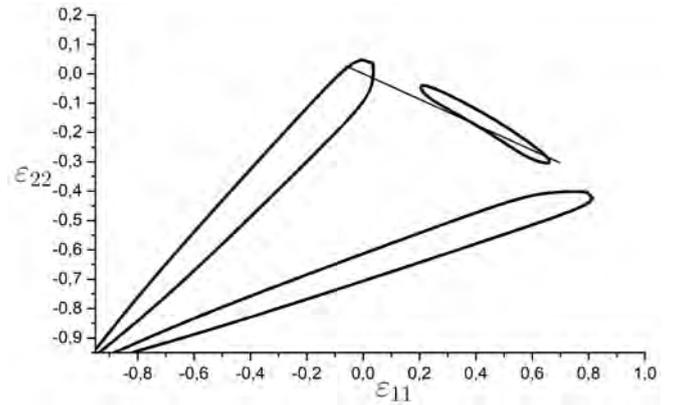
Рис. 21: Распределение времени обнаружения неустойчивости в пространстве деформаций для треугольной решетки.

На первом этапе, пока решетка устойчива, расчет выполняется в соответствии со списком взаимодействий Верле [111], которые определяются до начала движения, поскольку список взаимодействий не изменяется при низких уровнях средней кинетической энергии.

Рассмотрим процесс развития неустойчивости треугольной решетки в нескольких точках пространства деформаций (рис.22а). В точке «А» отрицателен модуль G_{12}^M , таким образом развитие неустойчивости начинается с прохождения дислокаций сквозь решетку, образуются дефекты упаковки и решетка разделяется на домены (рис.23). Поскольку точка «А» находится вблизи области устойчивости, домены на рис.23а выражены слабо. В точке «Б» отрицательны модули Юнга, но поскольку движение дислокации энергетически более выгодно, чем разрывы связей, на первом этапе слои решетки смещаются параллельно друг другу. На втором этапе, когда симметрия решетки нарушена проходят следующие дислокации, формируя границы зерен (рис.24б). В точке «В» отрицателен модуль объёмного сжатия и потеря устойчивости, ожидаемо, приводит к формированию трещин (рис.25). Также рассмотрим две границы области устойчивости, появляющиеся, если частицы могут двигаться перпендикулярно плоскости решетки (рис.26) несмотря на схожую физическую природу границ ($G_{13}^M < 0$ в точке «Г», $G_{23}^M < 0$ в точке «Д») неустойчивости реализуется по разному. В точке «Г» материал становится «волнистым» (рис.27а), но основная доля перемещений частиц происходит в плоскости (рис.27б). В точке «Д» на материале формируются складки сильно искажая локальную структуру (рис.28а), однако выход частиц из плоскости также мал (рис.28б), как и в точке «Г».

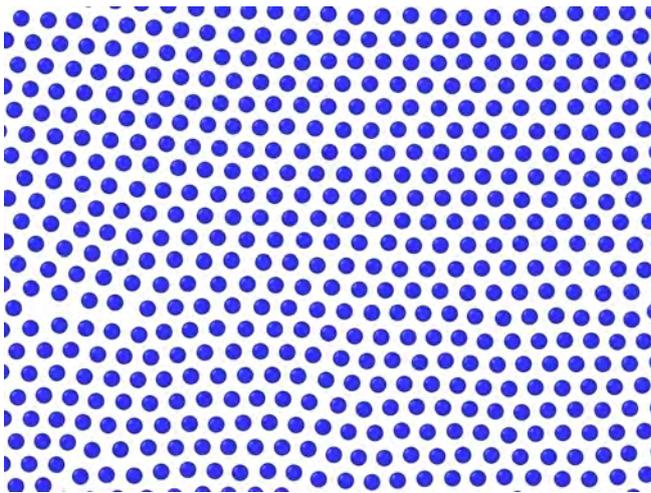


(a) $\alpha a = 6$

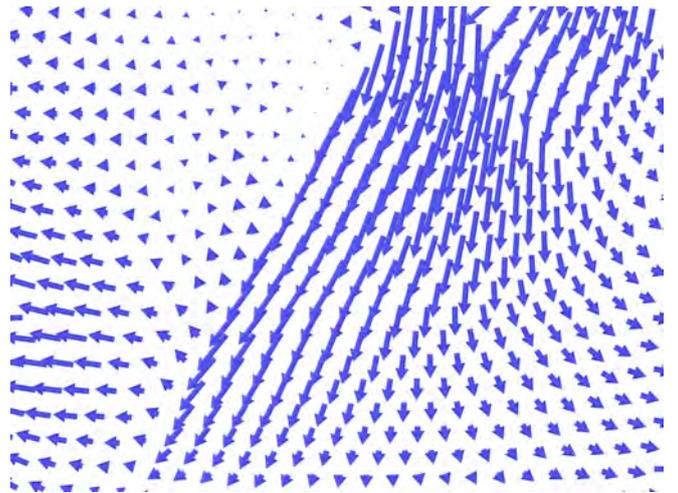


(б) $\alpha a = 20$

Рис. 22: Области сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентной сплошной среды для треугольной решетки и потенциала Морзе при разных параметрах αa : (а) $\alpha a = 6$, линиями обозначены пути деформирования: гидростатический и линия постоянного объема, зеленые точки — ненапряженная треугольная решетка, красные точки — неустойчивые точки на линиях; (б) $\alpha a = 20$.

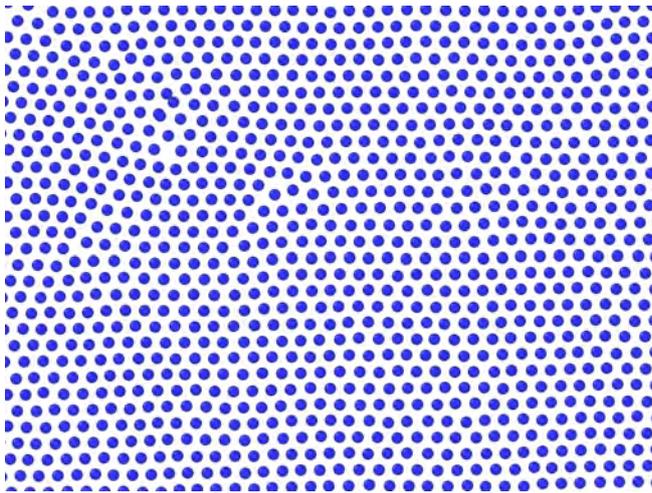


(а) расположение частиц, $t = 69.6T_0$

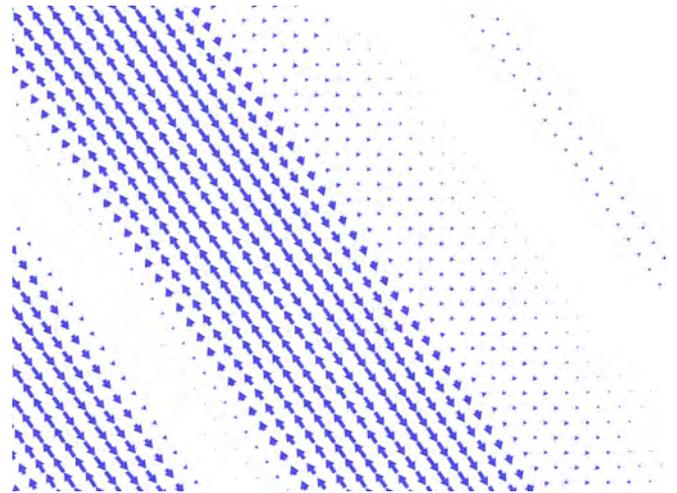


(б) поле перемещений, $t = 18.4T_0$

Рис. 23: Конфигурация решетки после потери устойчивости в точке пространства деформаций «А» (рис.22а).

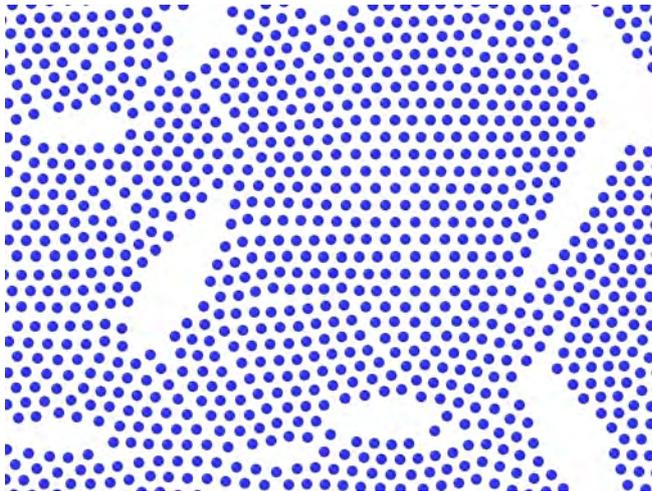


(а) расположение частиц, $t = 18.9T_0$

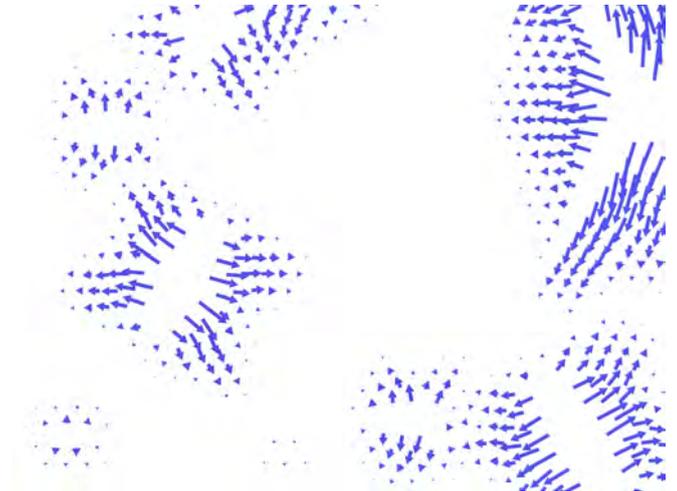


(б) поле перемещений, $t = 5.7T_0$

Рис. 24: Конфигурация решетки после потери устойчивости в точке пространства деформаций «Б» (рис.22а).



(а) расположение частиц, $t = 5.9T_0$



(б) поле перемещений, $t = 2.0T_0$

Рис. 25: Конфигурация решетки после потери устойчивости в точке пространства деформаций «В» (рис.22а).

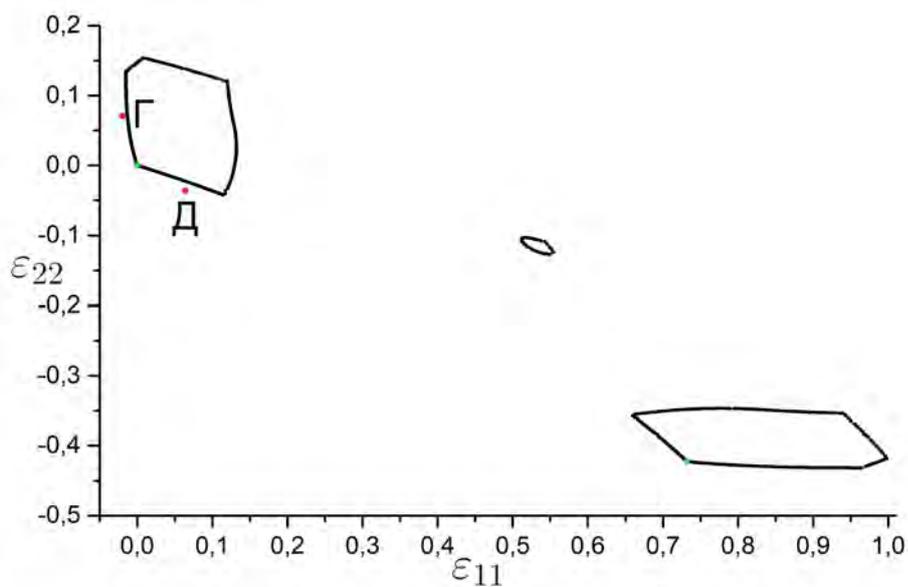
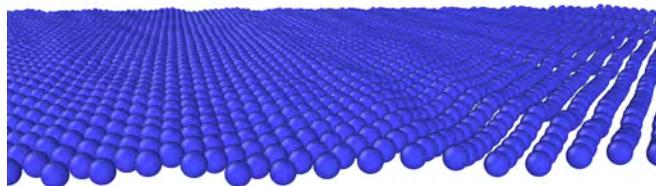
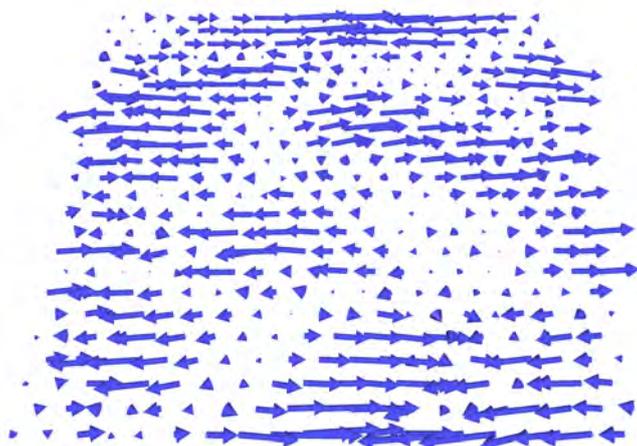


Рис. 26: Области сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентной сплошной среды для треугольной решетки и потенциала Морзе при возможности движения частиц перпендикулярно плоскости решетки; зеленые точки — ненапряженная треугольная решетка, красные точки — неустойчивые точки на линиях

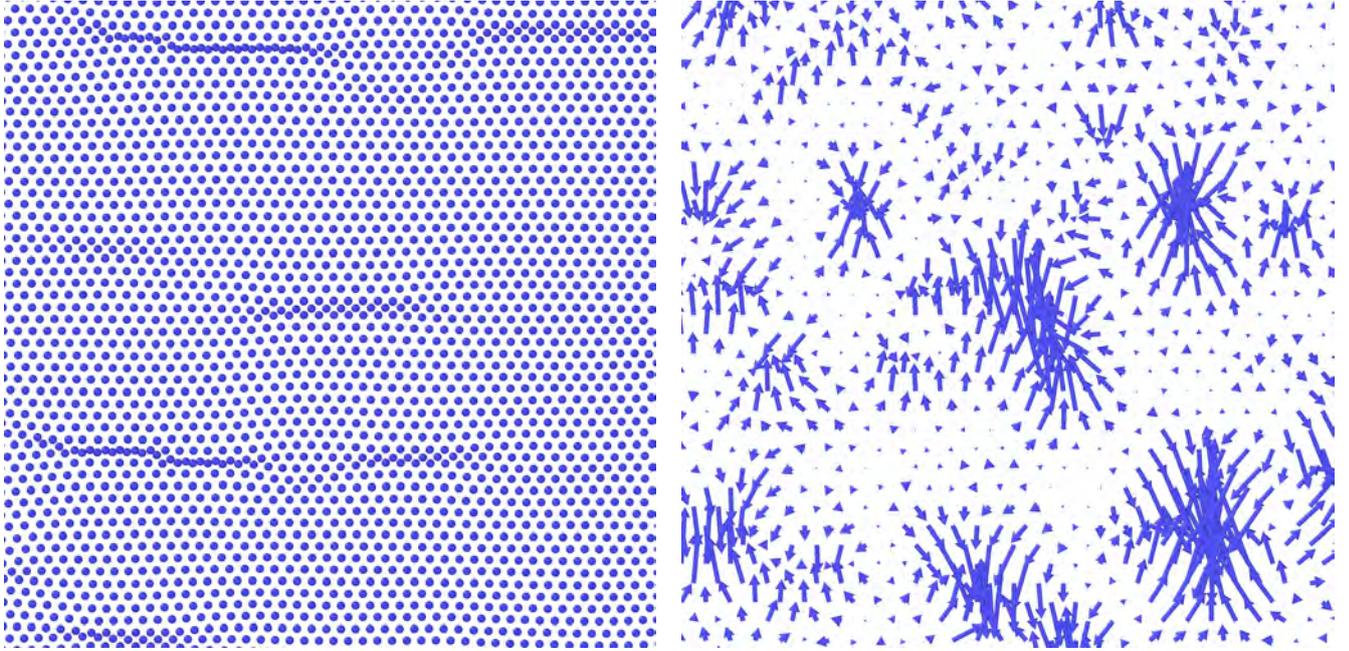


(а) расположение частиц, $t = 21.5T_0$



(б) поле перемещений, $t = 7.4T_0$

Рис. 27: Конфигурация решетки после потери устойчивости в точке пространства деформаций «Г» (рис.26).



(а) расположение частиц, $t = 1.13T_0$

(б) поле перемещений, $t = 0.75T_0$

Рис. 28: Конфигурация решетки после потери устойчивости в точке пространства деформаций «Д» (рис.26).

Для того, чтобы исследовать новое устойчивое состояние материала был использован следующий алгоритм. Если обнаружена неустойчивость, списки Верле обновляются каждые 20 шагов, то есть $0.2T_0$, используя метод сеток [38]. Наши расчеты показали, что $500T_0$ достаточно для формирования новой равновесной микроструктуры. После этого мы медленно «охлаждаем» систему, вводя диссипативную силу $\mathbf{F}_d = -\nu \mathbf{V}_n$. Коэффициент диссипации зависит от средней кинетической энергии и выбран следующим образом:

$$\nu = \nu_0 \left(\nu_A - \frac{\nu_B \tilde{K}^2}{\tilde{K}^2 + \nu_C} \right) \quad (67)$$

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.

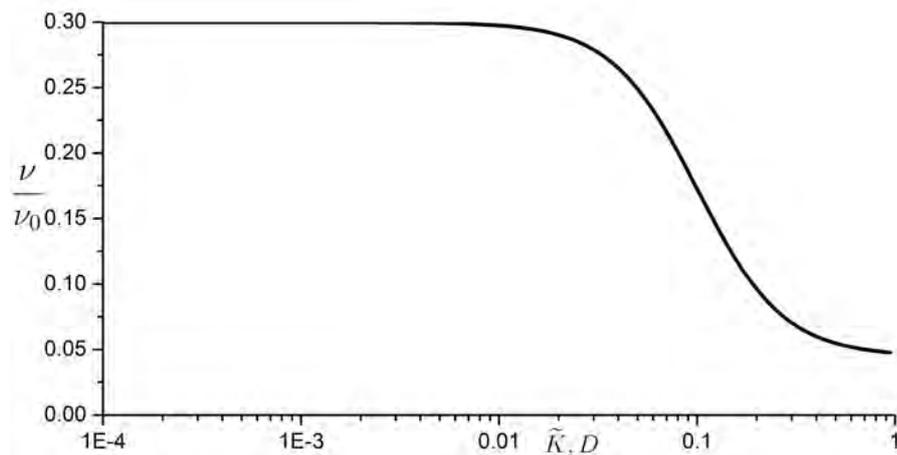


Рис. 29: Зависимость коэффициента диссипации ν от средней кинетической энергии, приходящейся на частицу.

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 $50T_0$. По завершению охлаждения вычисляются средние значения механических свойств материала, время осреднения составляет $300T_0$.

Подчеркнем, что область неустойчивости не перекрывает область сильной эллиптичности при рассматриваемых однородных возмущениях. Но известно, что фазовое преобразование может начаться до того, как локальная устойчивость родительской фазы будет потеряна. Напомним, что только очищенный газ и жидкость могут находиться в переохлажденных или перегретых состояниях соответственно в фазовых переходах «газ-жидкость».

Имея это в виду, мы используем «неоднородные» возмущения. Во-первых, на решетке, как и ранее, накладывается однородная деформация и случайное поле малых скоростей. Затем в центре выбирается круглая зона с площадью около четверти площади образца. Скорости частиц внутри этой зоны дополнительно увеличиваются, так что средняя кинетическая энергия внутри зоны становится на один порядок меньше глубины потенциальной ямы. Неустойчивость проявляется как разрыв связей и перегруппировка частиц. После нача-

ла неустойчивости формируется новая микроструктура, затем система «охлаждается» и вычисляется энергия нового устойчивого состояния. Эта процедура позволяет получить релаксированные микроструктуры с энергиями, близкими к минимально возможной энергии. Таким образом, используя два типа возмущений, мы получаем экспериментально как границы минимальной энергии, так и границы устойчивости. Случайность исходного распределения скорости объясняет неединственность статического решения после потери устойчивости. Полученные микроструктуры варьируются от одного эксперимента к другому, но основные макропараметры остаются неизменными.

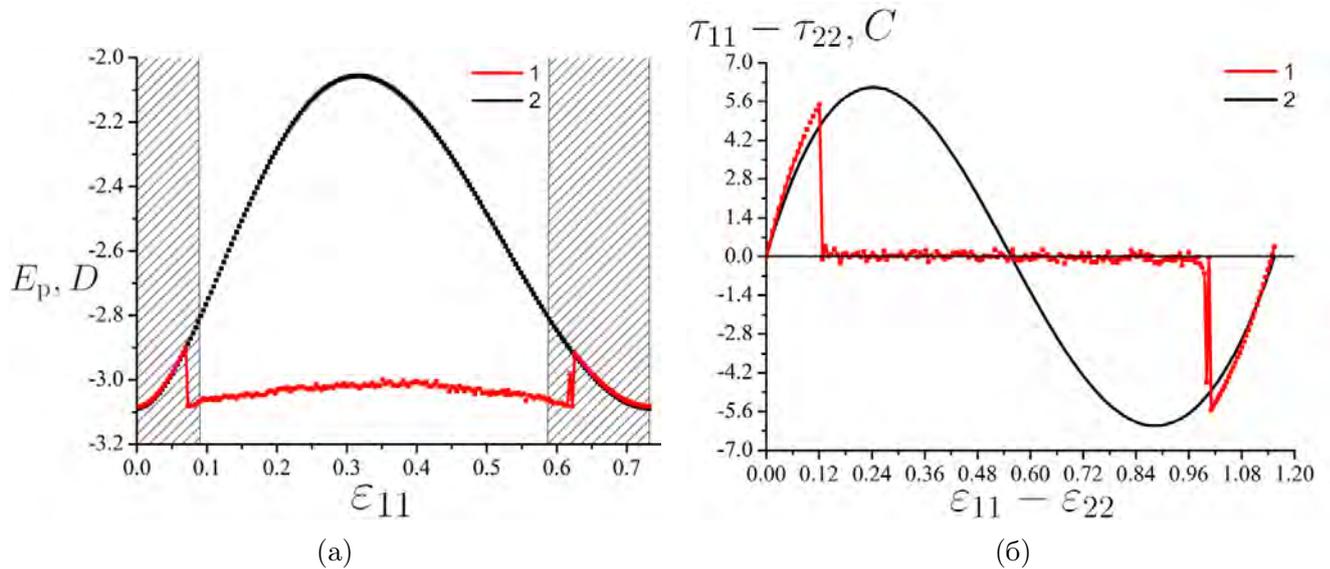


Рис. 30: Переход от одного варианта треугольной фазы к другому варианту треугольной фазы. Энергия до 2 (черная) и после 1 (красная) релаксации (а) и диаграмма сдвиговое напряжение — сдвиговая деформация (б) вдоль пути постоянного объема (рис. 22а). Заштрихованы зоны сильной эллиптичности.

На рис. 30 показаны зависимости энергии и сдвигового напряжения от деформации вдоль пути деформации по постоянному объему $(1 + \varepsilon_1)(1 + \varepsilon_2) = 1$, соединяющего не напряженные конфигурации треугольной решетки в пространстве деформаций (линия постоянного объема на рис. 30а). В теоретическом анализе, который не учитывает эволюцию после потери сильной эллиптичности, объем образца и элементарной ячейки фиксированы и равны соответствующим объемам ненапряженного состояния, так как рассматриваются только однородные деформации. В моделировании мы можем фиксировать

только объем образца, что позволяет осуществлять структурные преобразования, а объем элементарной ячейки фиксируется только как начальное условие на положения частиц. Такой путь деформирования позволяет исключить влияние объемного растяжения или сжатия и сосредоточиться на механизмах деформации сдвига. Черная линия на рис. 30а показывает энергию, рассчитанную теоретически для однородно деформированной решетки. Красная линия получается методом МД после релаксации энергии. Энергетические скачки являются зародышеобразовательными барьерами, а другая часть кривой образует оболочку теоретического энергетического профиля, полученного для равномерно деформированной решетки.

Экспериментальная (красная линия) и теоретическая (черная линия) зависимости сдвиговых напряжений и сдвиговых деформаций показаны на рис. 30б. В выбранных координатах теоретическая кривая аналогична изотерме Ван-дер-Ваальса в диаграмме давления-объема для фазового перехода «газ-жидкость», а экспериментальная линия практически удовлетворяет правилу Максвелла равной площади с разницей между областями приблизительно 9%.

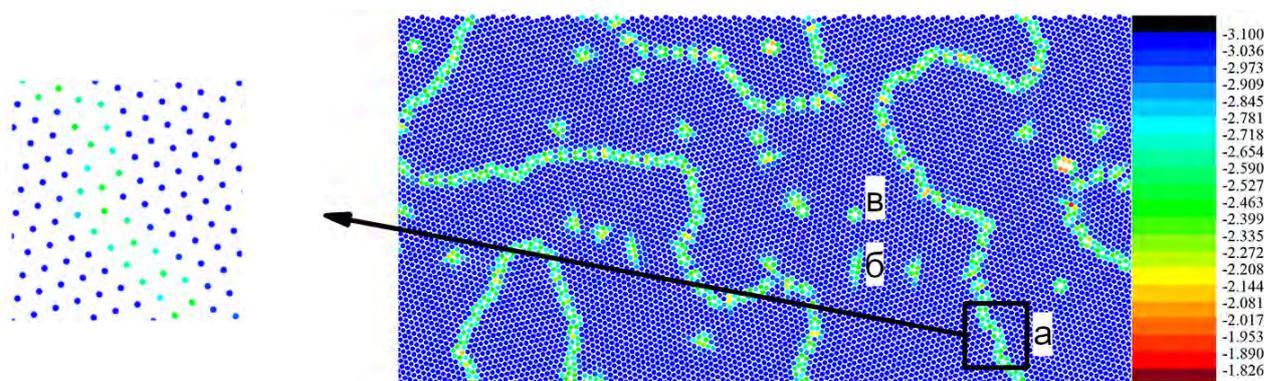


Рис. 31: Микроструктуры с зёрнами, образованные вариантами треугольной решетки в зоне неэллиптичности при $\varepsilon_{11} = 0.366$ (см. Рис. 30); (а) двойники, (б) вакансии, (в) дислокации.

Пример микроструктуры, которая соответствует релаксированной энергии при деформации, взятой в зоне неэллиптичности, показана на рис. 31. Каждая точка — частица; цвет обозначает ее энергию. Можно видеть зёрна, образованные различными ориентациями треугольной решетки. Зёрна содержат части-

цы с минимальной энергией. Они энергетически неразличимы и соответствуют двойникованию. Частицы с более высокой энергией образуют границы зерен, точечные дефекты и дислокации, где локализована избыточная энергия.

Таким образом, результаты численного эксперимента полностью соответствуют теоретическим, согласно которым полученная оболочка профиля энергии должна быть квазивыпуклая оболочка, соответствующая микроструктурам с минимальной энергией. Теоретический профиль энергии является касательной к минимумам энергии в случае ненапряженных двойников; и отклонение от прямой может быть вызвано внутренними напряжениями. Видно, что в рассматриваемом случае границы зерен и различные дефекты аккумулируют энергию. И, наконец, двойники автоматически удовлетворяют правилу Максвелла [71].

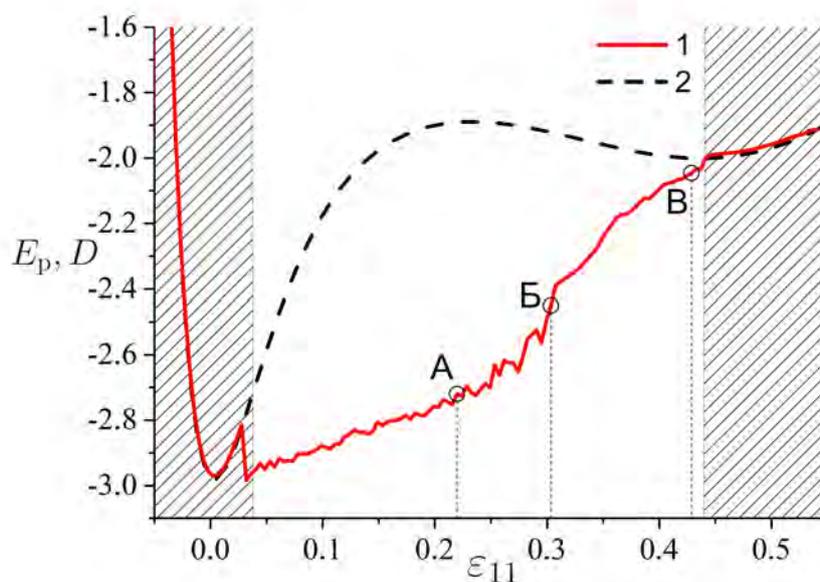


Рис. 32: Переход от треугольной к квадратной фазе. Энергия до (черная) и после (красная) релаксации энергии, вдоль пути деформирования показанной линией на рис. 22б. Заштрихованы зоны сильной эллиптичности.

Двухфазные микроструктуры, появляются на пути деформирования, соединяющего ненапряженную треугольную решетку и напряженную квадратную (прямая на рис. 22б). Релаксированная энергия показана на рис. 32. Примеры

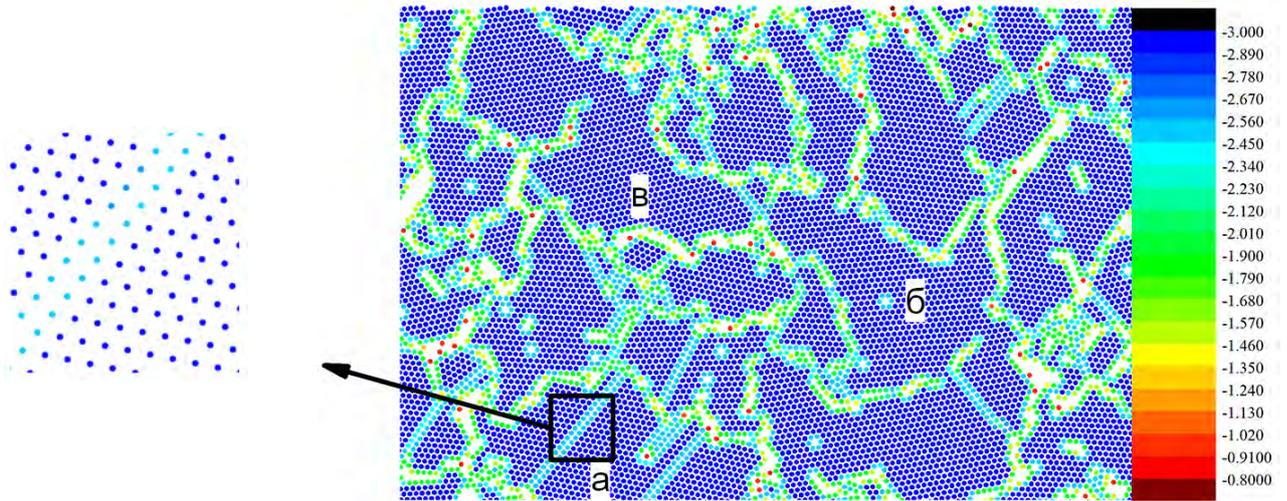


Рис. 33: Микроструктуры в зоне неэллиптичности при деформациях «А» (см. рис. 32). (а) Треугольная решетка, разделенная на тонкими слоями квадратной решетки, (б) вакансии, (в) микротрещины.

микроструктур, соответствующих точкам «А», «Б» и «В», показаны на рис. 33, 34 и 35 соответственно.

Ближе к области устойчивости треугольной решетки мы видим зерна с треугольной фазой. В отличие от пути деформирования с постоянным объемом, здесь появляются больше вакансий и микротрещин. Различие между рис. 33 и 31 состоит в том, что зерна разделены тонкими слоями квадратной фазы. По мере увеличения внешней деформации образуется четко выраженная слоистая двухфазная микроструктура. На рисунке 34 видно, что энергия распределяется между сосуществующими областями с низкоэнергетическими вариантами треугольной фазы и высокоэнергетической квадратной. В итоге, почти весь материал трансформируется в квадратную фазу. На рис. 35 также можно видеть полосы сдвига, образованные тонкими слоями треугольной фазы. Заметим, что энергетическая релаксация связана не только с образованием двухфазных микроструктур, но и с двойникованием, которое видно, хотя и не обозначено особо, на рис. 33. Как и в случае двойникования, эти результаты соответствуют общему теоретическому предсказанию [42], что зарождение и развитие двухфазной микроструктуры является механизмом релаксации энергии в материалах с невыпуклой энергией.

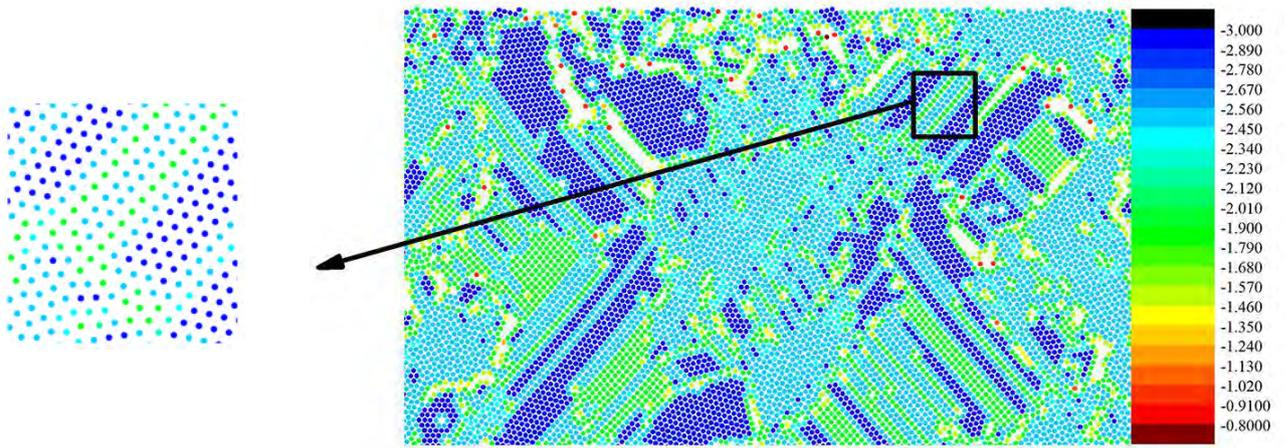


Рис. 34: Многослойная двухфазная микроструктура в зоне неэллиптичности при деформациях «Б» (см. рис. 32). Появились зоны с аморфной структурой.

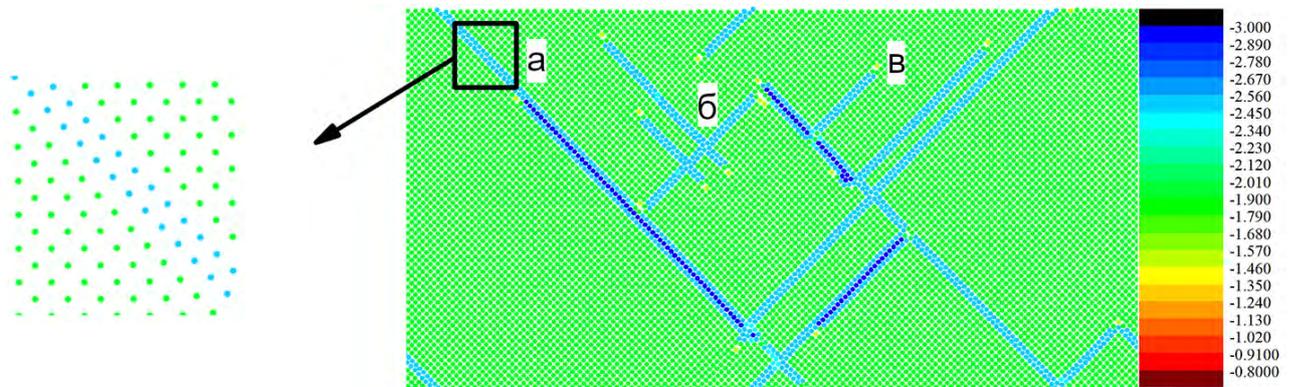


Рис. 35: Микроструктуры в зоне неэллиптичности при деформациях «В» (см. рис. 32). (а) Домены квадратной решетки разделены полосой сдвига, образованной слоем треугольной решетки (б) дислокации, образованная в пересечении двух полос сдвига (в) дислокации на концах полос сдвига.

2.9 Трехмерные кристаллические структуры

Гранецентрированная кубическая (ГЦК) решетка является одним из вариантов плотной упаковки шаров в пространстве, обладает кубической симметрией, но может быть представлена в виде набора треугольных слоев смещенных друг относительно друга в виде (АВСАВС). Второй вариант плотной упаковки в пространстве — гексагональная плотноупакованная структура (ГПУ) так же представима в виде треугольных слоев, но двух типов (АВАВ). В отличие от ГЦК в ГПУ отсутствует кубическая симметрия и ГПУ является сложной решеткой, что приводит к увеличению количества условий сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентного континуума связанных со смеще-

нием подрешеток [30]. Условия сильной эллиптичности уравнений равновесия для простой трехмерной решетки (ГЦК) приведены в разделе 1.3 (44).

Область устойчивости ГЦК решетки строится аналогично треугольной, пространство деформаций разбивается на регулярную сетку в виде ГЦК решетки, оси направлены вдоль осей кубической симметрии. Области устойчивости и области сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентного континуума [31, 96] будут иметь вид, показанный на рис. 36 (устойчивые точки при сжатии более 70% не были вычислены ввиду величины времени расчета для достижения необходимой точности). Здесь можно видеть основную область в виде трехгранного клина, в силу симметрии решетки, и три области примыкающие к клину при большом сжатии, эти области соответствуют сжатой объемноцентрированной кубической решетке (ОЦК) (рис. 37).

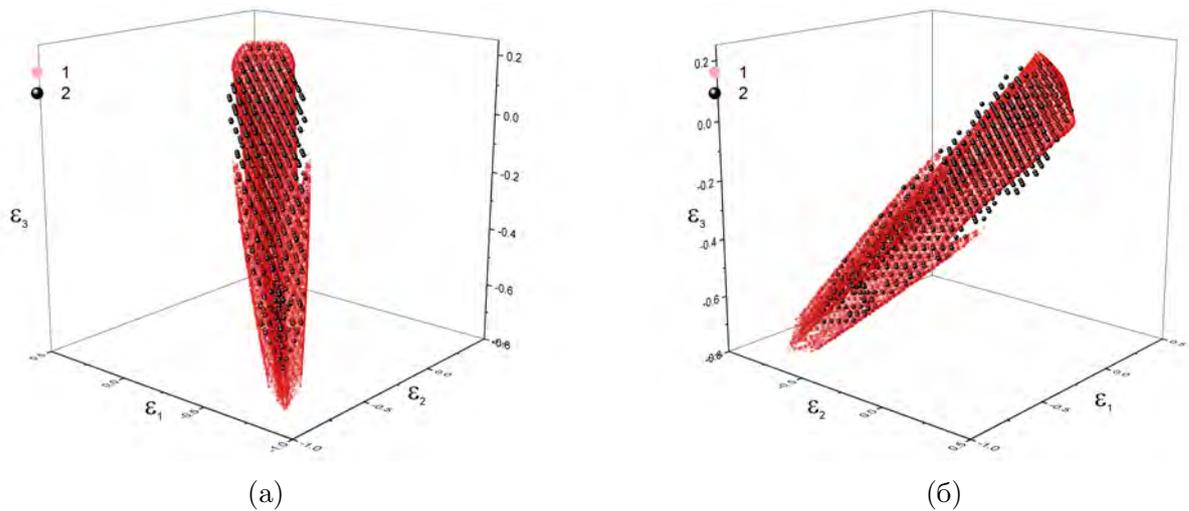


Рис. 36: Области устойчивости ГЦК решетки в пространстве осевых деформаций. 1 (красные точки) – граница областей сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентной сплошной среды, 2 (черные точки) – устойчивые узлы, полученные методом молекулярной динамики.

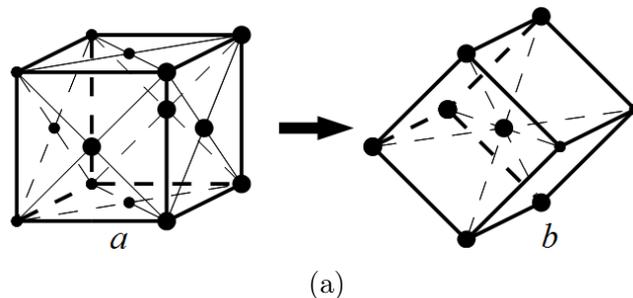
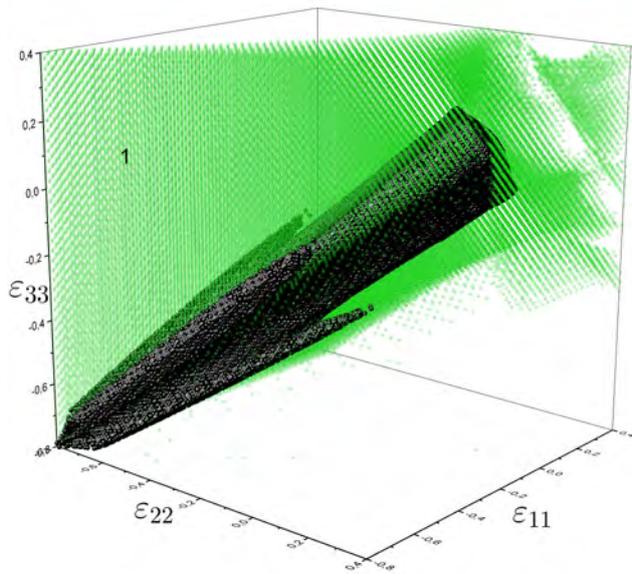


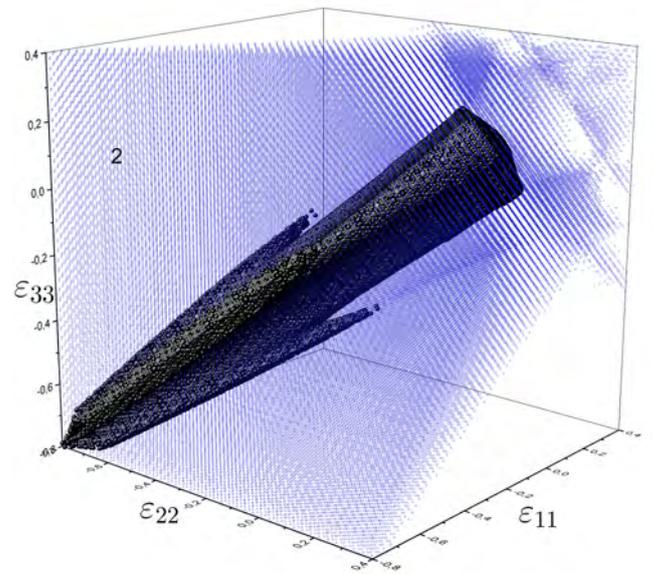
Рис. 37: Переход из ГЦК в ОЦК решетку [31].

2.10 Физический смысл границ областей устойчивости ГЦК решетки

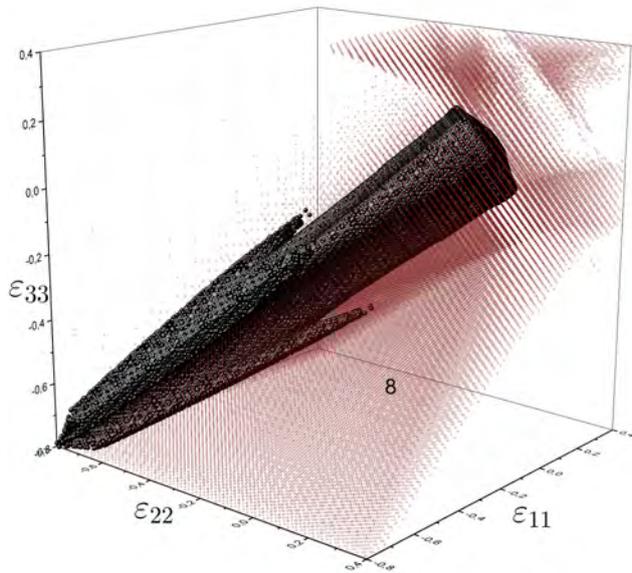
Определим области в пространстве деформаций в которых упругие модули отрицательны (рис. 38, 39). Ввиду симметрии решетки оси вдоль которых деформируется образец эквивалентны. Каждый из модулей Юнга отрицателен со стороны одной из областей устойчивости ОЦК, модуль объемного сжатия отсекает плоскость перпендикулярную линии гидростатического растяжения. Модель сдвига отрицательны во всем пространстве деформаций кроме проекций области устойчивости на плоскости перпендикулярные плоскости сдвига.



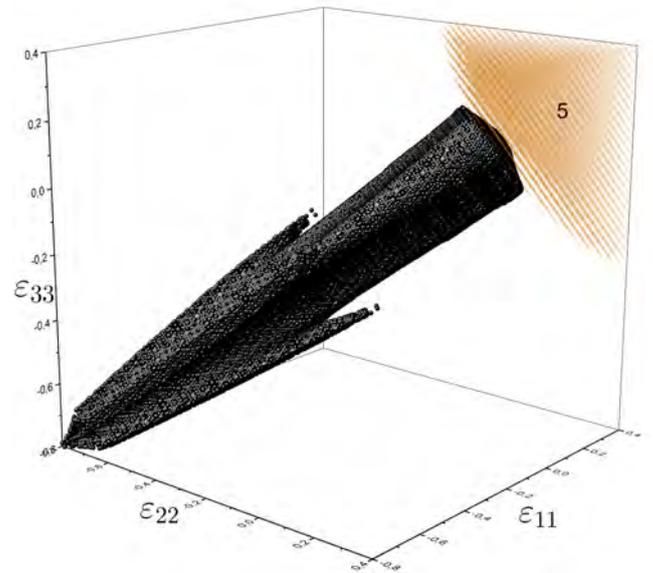
(a) $E_1^M < 0$



(б) $E_2^M < 0$

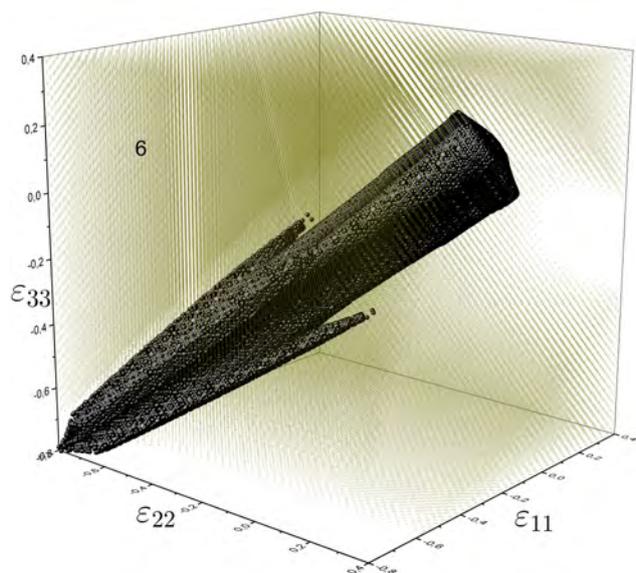


(в) $E_3^M < 0$

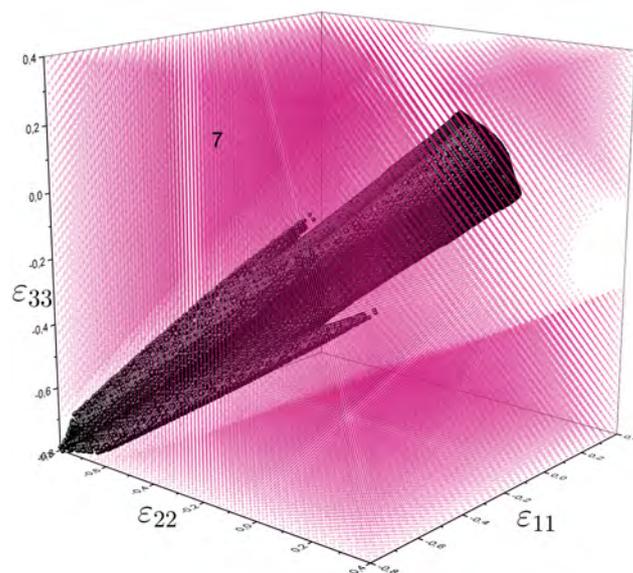


(г) $K^M < 0$

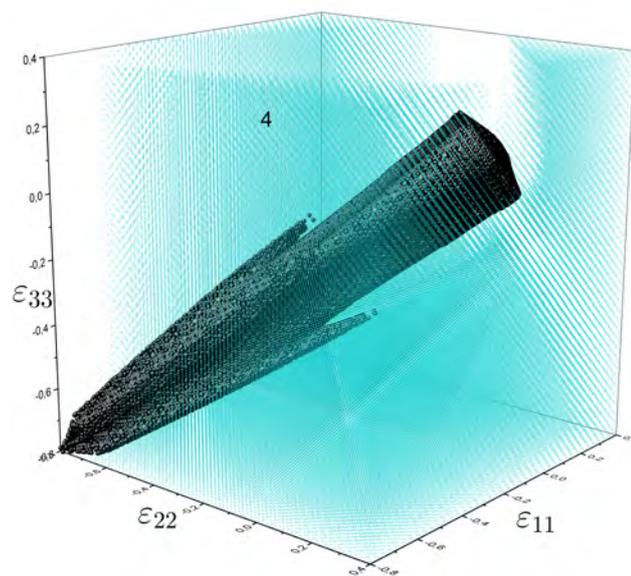
Рис. 38: Области в которых мгновенные упругие модули принимают отрицательные значения: 1 — $E_1^M < 0$, 2 — $E_2^M < 0$, 8 — $E_3^M < 0$, 5 — $K^M < 0$. Черные точки — границ области сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентной сплошной среды.



(a)



(б)



(в)

Рис. 39: Области в которых мгновенные упругие модули принимают отрицательные значения: 6 — $G_{13}^M < 0$, 7 — $G_{23}^M < 0$, 4 — $G_{12}^M < 0$. Черные точки — границ области сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентной сплошной среды.

2.11 Выводы

Суммируя полученные выше результаты можно сделать следующие выводы:

1. Методом динамики частиц определены области устойчивости треугольной решетки в пространстве конечных деформаций при парном силовом взаимодействии.
2. Показано, что области устойчивости кристаллической решетки соответствуют областям сильной эллиптичности уравнений равновесия и аналитические выражения позволяют предсказывать области устойчивости кристаллической структуры с высокой точностью.
3. Показан физический смысл границ областей устойчивости.
4. Исследована микроструктура двухфазных состояний после потери устойчивости треугольной решетки и при структурном переходе из треугольной в квадратную решетку. Выявлены механизмы релаксации энергии при структурном переходе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014-2020 годы», Мероприятие 1.2., Соглашение о предоставлении субсидии № 14.575.21.0146 от 26.09.2017, уникальный идентификатор ПНИ: RFMEFI57517X0146.

3 Уравнение состояния идеальных кристаллов

Фазовые превращения и в частности мартенситные превращения, протекают в металлах при воздействии внешних напряжений и температуры. Описать внутренние напряжения в материале, возникающие в следствии изменения температуры, позволяют уравнения состояния. Уравнения состояния используются в методах механики сплошной среды для замыкания системы определяющих уравнений. Часто, при рассмотрении макроскопических процессов методами механики сплошных сред, уравнения состояния постулируется на основе экспериментальных данных, так как в данных моделях обычно не рассматривается структура вещества и законы взаимодействия между атомами, определяющие уравнения состояния. Однако в задачах, где существенным является учёт микроструктуры материала [11, 27, 5, 29, 1] необходимы методы получения уравнений состояния, учитывающие как микроструктуру, так и выбранные потенциалы межатомного взаимодействия. Кроме того необходимо обеспечить переход от параметров дискретного континуума к эквивалентной сплошной среде для использования аппарата механики сплошных сред. В термодинамике уравнения состояния удается получить методами статистической механики на основе некоторых эмпирических предположений [16, 18, 17, 3]. Заменяя атомарную структуру кристалла на систему независимых гармонических осцилляторов, А.Эйнштейн получил выражение для свободной энергии системы [4]. Развитие идеи А.Эйнштейна было выполнено М.Борном [46], и предложен самосогласованный метод определения гамильтониана системы независимых гармонических осцилляторов эквивалентной ансамблю взаимодействующих атомов, расширив, таким образом, теорию Эйнштейна на нелинейные системы. В дальнейшем Д.Хоттон [74], [75] расширил метод Борна для описания квантовомеханических систем. Следующим шагом стал переход к фононной модели, выполненный Н.Вертхамером [118], [68]. Предложенные методы нашли широкое применение для различных задач [52, 41, 63, 54]. Недостатком итерационного метода Борна является отсутствие информации о зависимости эквивалентного

гармонического гамильтониана от состояния системы, что существенно осложняет его использование в аналитических методах. Альтернативным подходом является вывод уравнений состояния на основе некоторых дополнительных эмпирических предположений о соотношении между макроскопическими свойствами материала. В частности, для описания твердых тел широко применяется уравнение состояний Ми-Грюнайзена. Его можно получить на основе теории Дебая, если принять, что зависимость фононных частот от объёма задаётся выражением:

$$\frac{\omega_i}{\omega_i^0} = \left(\frac{V^0}{V} \right)^\gamma \quad (68)$$

Где параметр γ называется параметром Грюнайзена, i — нумерует частоты. Тогда можно записать уравнение состояния в следующем виде:

$$P = P(V, \tilde{U}_T) = \hat{p}(V) + \Gamma(V) \frac{\tilde{U}_T}{V} \quad (69)$$

где $\Gamma(V)$ — функция Грюнайзена, является функцией объёма и не зависит от теплового возмущения в материале. Однако получить точный вид функции Грюнайзена пока не удастся. Довольно часто $\Gamma(V)$ определяется на основе так называемой «холодной» кривой деформирования [16, 103, 21], однако, как указано, в [103] необходимо учитывать взаимное влияние напряженно-деформированного состояния и температуры. В работе [56] уравнение состояния записано с учётом напряженно-деформированного состояния. В настоящей работе используется метод определения эквивалентных термомеханических параметров предложенный А.Кривцовым [22, 23] и развитый В.Кузькиным [24]. Данный метод опирается на рассмотрение материала как системы частиц с известным потенциалом взаимодействия, движущихся по законам классической механики. Переход от дискретного к континуальному описанию осуществляется с использованием длинноволнового приближения [8]. Таким образом, данный метод позволяет получить макроскопических характеристики описываемого кристалла и уравнение состояния непосредственно из закона взаимодействия и структуры материала. В настоящей диссертационной работе проводится уточнение вида уравнений состояния полученных в [24], определение области

их применимости и сравнение с результатами молекулярно-динамического моделирования.

3.1 Исследование термодинамических параметров двумерных кристаллических структур

Для исследования термических напряжений в треугольной решетке использовался квадратный образец (150x149межатомных расстояний) с единственно возможным плотным расположением дисков на плоскости — треугольной решёткой (25800 частиц), на границе заданы периодические граничные условия. Частицы взаимодействуют посредством парного центрального потенциала Морзе (26).

Параметр, отвечающий за ширину потенциальной ямы, $\alpha a = 6$. При таком значении параметра значение первых двух производных при $A_k = a$ совпадают с производными от потенциала Леннард-Джонса. Скорости в начальный момент времени распределены согласно нормальному распределению, центр масс системы неподвижен, кинетическая энергия, приходящаяся на частицу составляет $2 \cdot 10^{-5} D$. Компоненты тензора $\tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k$ определяются в системе координат связанной со связью (ось абсцисс вдоль связи, ось ординат - $\mathbf{j} = \mathbf{k} \times \mathbf{i}$, ось аппликат перпендикулярна плоскости образца). Значения тензора усредняются по всем связям в образце $\langle \rangle_r$, а затем усредняются по ансамблю систем с одинаковыми начальными условиями, но различным случайным распределением скоростей. И после, усредняются по времени $\langle \rangle_t$, начиная с момента установления равновесного значения. Будем считать, что $\langle \rangle$ есть усреднение и по пространству и по времени. Уравнения движения интегрируются методом Верле [111], шаг по времени определялся как $\frac{T_0}{100}$, где T_0 — период малых колебаний изолированной пары частиц. В данной главе мы ограничиваемся рассмотрением состояний системы, при которых связи между частицами остаются неизменными в течении всего времени моделирования. Это даёт возможность использовать списки Верле [111], определенные в начальный момент времени. Далее используются

описанные выше параметры моделирования, изменения отдельных параметров указываются отдельно.

При непосредственном исследовании устойчивости кристалла методом молекулярной динамики процесс потери устойчивости носит существенно вероятностный характер (что будет показано далее) и зависит от интенсивности хаотического движения частиц т.е. температуры. Теоретические границы областей устойчивости были получены по отношению к любому бесконечно малому возмущению. Однако при моделировании мы всегда задаем некоторую конечную температуру и кроме того при температурах ниже температуры Дебая проявляются квантовые эффекты, которые не учитываются классическим методом молекулярной динамики [4]. Как было показано в разделе 1.4 для парных центральных потенциалов связь между тепловой энергией и возникающими внутренними напряжениям (уравнение Грюнайзена) полностью определяется первыми тремя производными от потенциала и тензором $\tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k$, который характеризует деформирование связи. Компоненты тензора $\tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k$ на рис. 40 определены для описанной выше конфигурации и нормированы на $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{r,xx}$, показана зависимость от времени, каждая точка графика получена усреднением по всему объему.

Из рис. 40 видно, что все компоненты тензора $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_r$ быстро (в течении нескольких периодов T_0) приходят к равновесному значению, на него накладываются высокочастотный шум и среднеквадратичное отклонение составляет 1.4% от среднего. Таким образом, можно сделать вывод, что используемый метод определения тензора $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_r$ обладает достаточной точностью, и усреднения в течении нескольких десятков T_0 будет достаточно для определения компонент тензора $\tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k$. Тензор $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_r$ имеет диагональный вид. Далее будем называть тензор $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_r$ тензором деформационной температуры. Отношение диагональных компонент Θ для ненапряженной треугольной решетки обозначим:

$$\Theta_0 = \frac{\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{r,yy}}{\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{r,xx}} = 1.435 \pm 0.016 \quad (70)$$

Благодаря диагональному виду тензора $\tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k$ для получения коэффициента Грюнайзена достаточно определить отношение деформации вдоль связи $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{r,xx}$ к деформации перпендикулярно связи $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{r,yy}$.

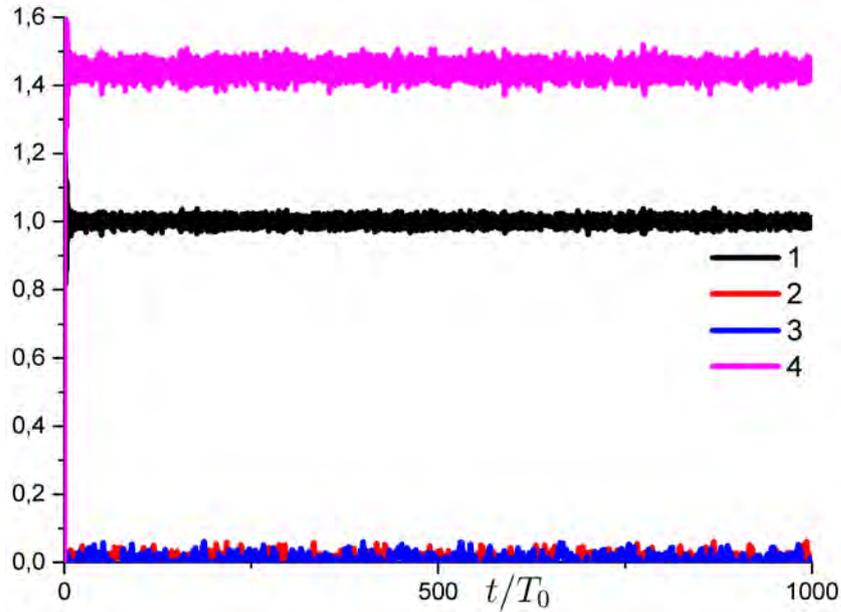


Рис. 40: Зависимость компонент тензора $\tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k$ от времени. 1 – $\tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_{kxx}$, 2 – $\tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_{kxy}$, 3 – $\tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_{kyx}$, 4 – $\tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_{kyy}$

Сравним значения $\tilde{\tau}$, $\tilde{U} = \tilde{E}_p + \tilde{E}_k$, полученные в ходе вычислительного эксперимента по формулам (22), (1), (2), (70) с результатами формул (50), (51). Относительная погрешность для средних значений составила 0.0007% для энергии и 0.0002% для компонент тензора напряжений, в то время как предположение о шаровом характере тензора $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle$ приводит к переоценке на 22% и 20% для энергии и компонент тензора напряжений соответственно, однако, поскольку ошибки обеих величин имеют один знак и относительные погрешности близки, отклонение значения коэффициента Грюнайзена составляет всего 2.5%. Используя отношение $\Theta \simeq 1.5$, мы получаем погрешность 0.4% для компонент тензора напряжений, при среднеквадратичной погрешности вычислительного эксперимента в 1%. При использовании отношения $\Theta = 1$ [39, 19] погрешность определения тензора напряжений и внутренней энергии по формулам (71), (72) 20 и 24%, соответственно, при этом погрешность определения коэффициента Грюнайзена составляет 3%.

Перепишем уравнения (50), (51):

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}} = \frac{1}{4V} \sum_k \left[\alpha_k \left(\hat{\mathbf{A}}_k \hat{\mathbf{A}}_k \mathbf{E} + 2\hat{\mathbf{A}}_k \mathbf{E} \hat{\mathbf{A}}_k \right) + \beta_k \hat{\mathbf{A}}_k \hat{\mathbf{A}}_k \hat{\mathbf{A}}_k \hat{\mathbf{A}}_k \right] \cdot \cdot \langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle, \quad (71)$$

$$\tilde{U} = \frac{1}{2} \sum_k \left[\alpha_k \hat{\mathbf{A}}_k \hat{\mathbf{A}}_k + \gamma_k \mathbf{E} \right] \cdot \cdot \langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle, \quad (72)$$

где:

$$\alpha_k = \frac{\hat{\Pi}'_k \hat{A}_k - \hat{\Pi}'_k}{\hat{A}_k^3}, \quad \beta_k = \frac{\hat{\Pi}'''_k \hat{A}_k^2 - 3\hat{\Pi}''_k \hat{A}_k + 3\hat{\Pi}'_k}{\hat{A}_k^5}$$

$$\gamma_k = \frac{\hat{\Pi}'_k}{\hat{A}_k}$$

Окончательно для треугольной решётки, используя предположения о диагональности тензора $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle$ и $\Theta_0 = \frac{\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{yy}}{\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{xx}} = 1.435$, получаем:

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}} = \frac{\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{xx}}{4V} \sum_k \left[\frac{\hat{\Pi}'''_k}{\hat{A}_k} + \Theta_0 \alpha_k \right] \hat{\mathbf{A}}_k \hat{\mathbf{A}}_k, \quad (73)$$

$$\tilde{U} = \frac{\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{xx}}{2} \sum_k \left[\hat{\Pi}''_k + \Theta_0 \frac{\hat{\Pi}'_k}{\hat{A}_k} \right], \quad (74)$$

$$\boldsymbol{\Gamma} = -\frac{1}{2N} \sum_k \frac{\hat{A}_k^2 \hat{\Pi}'''_k + \Theta_0 \hat{A}_k \hat{\Pi}''_k - \Theta_0 \hat{\Pi}'_k}{\hat{A}_k^3 \hat{\Pi}''_k + \Theta_0 \hat{A}_k^2 \hat{\Pi}'_k} \hat{\mathbf{A}}_k \hat{\mathbf{A}}_k, \quad (75)$$

где N — количество частиц на первой координационной сфере. В силу симметрии недеформированной треугольной решетки тензор $\boldsymbol{\Gamma}$ будет шаровым. Дополнительно обозначим:

$$\Gamma = \text{tr}(\boldsymbol{\Gamma}), \quad \Gamma_e = -\frac{V}{\tilde{U}} \text{tr}(\tilde{\boldsymbol{\tau}}), \quad (76)$$

здесь Γ_e вычислено непосредственно по формулам (1) и (22).

3.2 Зависимость компонент тензора $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle$ от параметров моделирования

В данном разделе мы определяем влияние параметров взаимодействия между частицами, начальных условий и напряженного состояния на соотношение компонент тензора $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle$. На рис. 41 показано влияние размера системы на

отношение Θ . Конфигурация системы описана в пункте 3.1, размер изменялся в обоих направлениях, оставляя образец квадратным с точность до одного межатомного слоя по оси ординат. Полученные значения усреднялись по времени, начиная с момента достижения равновесных значений ($10T_0$). Как видно из графика увеличение системы более чем 100×100 межатомных расстояний не меняет значения отношения Θ . Все отклонения от среднего значения находятся в пределах точности вычисления и с увеличением количества связей погрешность, ожидаемо, уменьшается. Исходя из результатов эксперимента можно сделать вывод, что отношение Θ не связано с максимальной длиной волн, которую ограничивает размер образца. Уменьшение вплоть до 30 межатомных расстояний существенно увеличивает погрешность (до 8%), но слабо изменяет среднее значение.

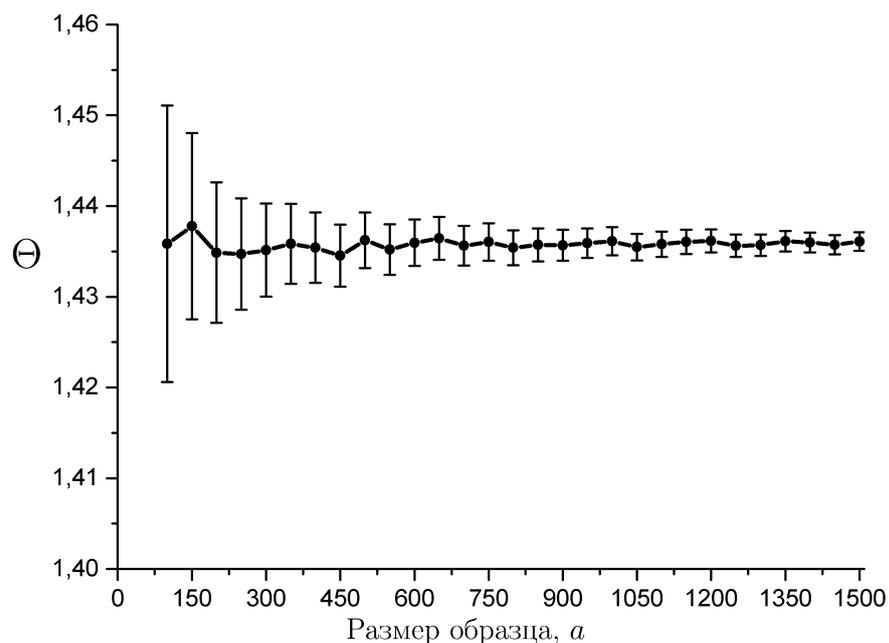


Рис. 41: Зависимость отношения компонент тензора Θ от размера системы. В качестве размера квадратного образца указывается количество слоев треугольной решётки вдоль основания треугольника.

Влияние ширины потенциальной ямы αa , а следовательно и жесткости связи показано на рис. 43. Среднее значение соотношения Θ находится в промежутке от 1.433 до 1.437 и не образует какой либо монотонной зависимости от увеличения ширины потенциальной ямы.

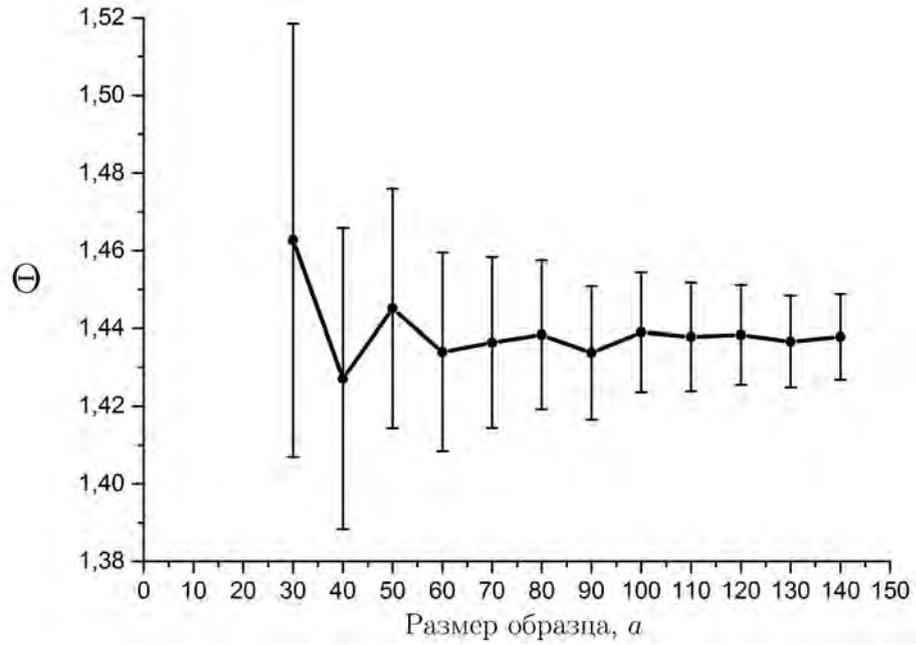


Рис. 42: Зависимость отношения компонент тензора Θ от размера системы. В качестве размера квадратного образца указывается количество солёв треугольной решётки вдоль основания треугольника.

Компоненты тензора $\tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k$ усреднялись по всему ансамблю связей в решетке, а затем полученные данные усреднялись по 10 запускам с различным распределением начальных скоростей. Полученные значения усреднялись по времени, начиная с момента достижения равновесных значений (~ 10 периодов малых колебаний пары частиц). Параметр αa также оказывает влияние и на соотношение наклонов стенок потенциальной ямы и мы можем сделать вывод, что вид парного центрального потенциала не будет оказывать влияние на отношение Θ .

Данное утверждение справедливо и для гармонического потенциала (77). Отношение компонент $\Theta = 1.437$. Погрешность определения энергии 0.008%, компонент тензора напряжений 0.0002%, и 0.007% для коэффициента Грюнайзена. Таким образом, мы можем использовать формулы (73), (74), (75) для плоской задачи и произвольного парного центрального потенциала. Ограничением является наше предположение, о локализации частицы вблизи потенциального минимума. Тогда для потенциала с несколькими минимумами, если энергия частиц достаточна для перемещения между ними, необходимо будет вводить некоторый эффективный потенциал с одним минимумом.

$$\Pi_k = D (a - A_k)^2 \quad (77)$$

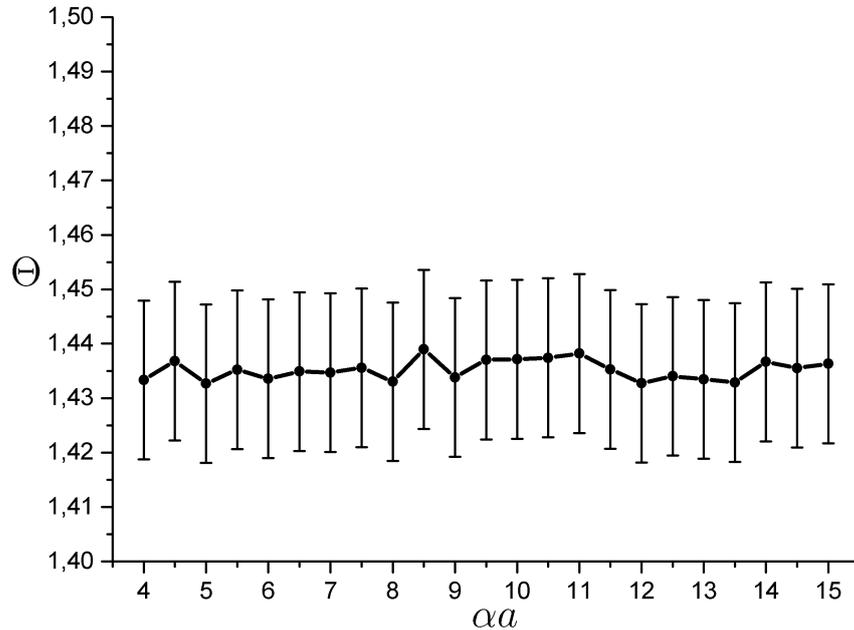


Рис. 43: Зависимость отношения компонент тензора Θ от ширины потенциальной ямы αa .

На рис. 44 среднее значение соотношения Θ с увеличением температуры незначительно растет от 1.435 до 1.499 (рост 4.5%) при увеличении начальной кинетической энергии с $0.00002D$ до D . Также на 4.5% экспериментальное значение коэффициента Грюнайзена отклоняется от вычисленного по формуле (75). С увеличением температуры значение Θ становятся некорректными, поскольку при перемещениях частицы, сопоставимых с межатомным расстоянием, возникает сложность в соотношении связи с номером координационной сферы, а также происходит разрывы и образование новых связей. Тем не менее можно сделать вывод, что ранее оценки отношения Θ соответствуют полученным значениям вплоть до температуры близких к температуре плавления.

В решении практических задач редко ограничиваются взаимодействием только с первой координационной сферой. Как можно видеть на рис. 45 увеличение количества учитываемых координационных сфер также не влияет на среднее значение соотношения Θ , радиус обрезания (a_{cut}) выбирался как среднее между расстоянием до учитываемой сферы и следующей сферой. При вычислении теп-

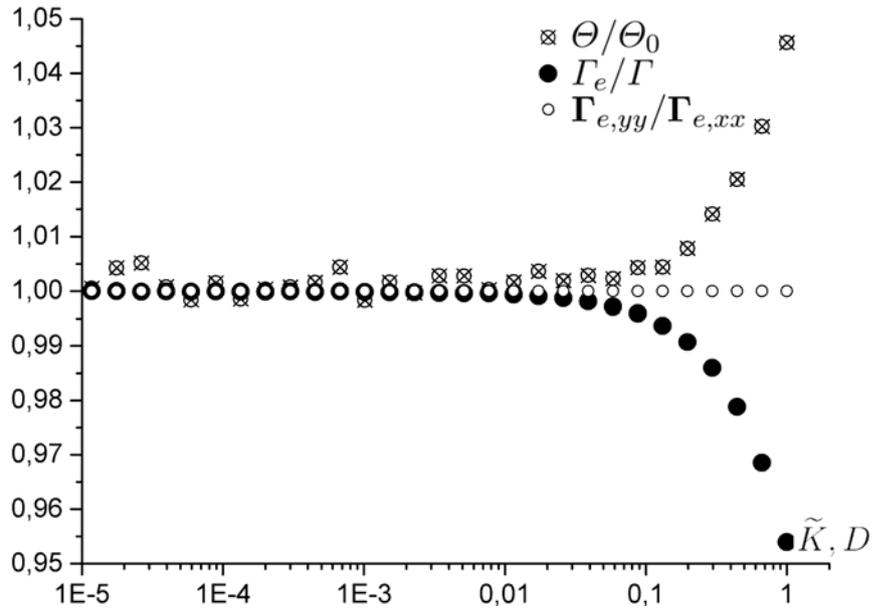


Рис. 44: Зависимость от кинетической энергии (в единицах D) в начальный момент времени отношений: диагональных компонент деформационной температуры Θ , шаровых частей функций Грюнайзена Γ_e и Γ и диагональных компонент функции Грюнайзена Γ_e .

ловой энергии и тензора термических напряжений, в данном случае, в формулах (72) и (71) необходимо проводить суммирование по всем координационным сферам, полученная погрешность $< 1\%$.

Деформация оказывает существенное влияние на значения Θ и Γ . Рассмотрим состояния решетки вдоль гидростатического пути деформирования и линия постоянного объема (рис. 22а). На рис. 46 можно видеть, что формула (75) верна на всем произвольной гидростатической деформации внутри области устойчивости треугольной решетки. Значение Θ увеличивается в два раза при сжатии на 80% стремится к единице вблизи границы области устойчивости при растяжении. Вдоль линии постоянного объема (рис. 47) значение Γ_e и Γ также совпадают в пределах области устойчивости. Поведение Θ зависит от природы границы области устойчивости: при приближении к границе, на которой $G_{12}^M < 0$ — Θ растёт быстрее, чем при приближении к границ, на которой $E_1^M < 0$ и $E_2^M < 0$. Поскольку при таком деформировании симметрия решетки уменьшается функция Грюнайзена Γ становится нешаровой и отношение диагональных компонент зависит от вида границы: $\Gamma_{e,yy} > \Gamma_{e,xx}$ при

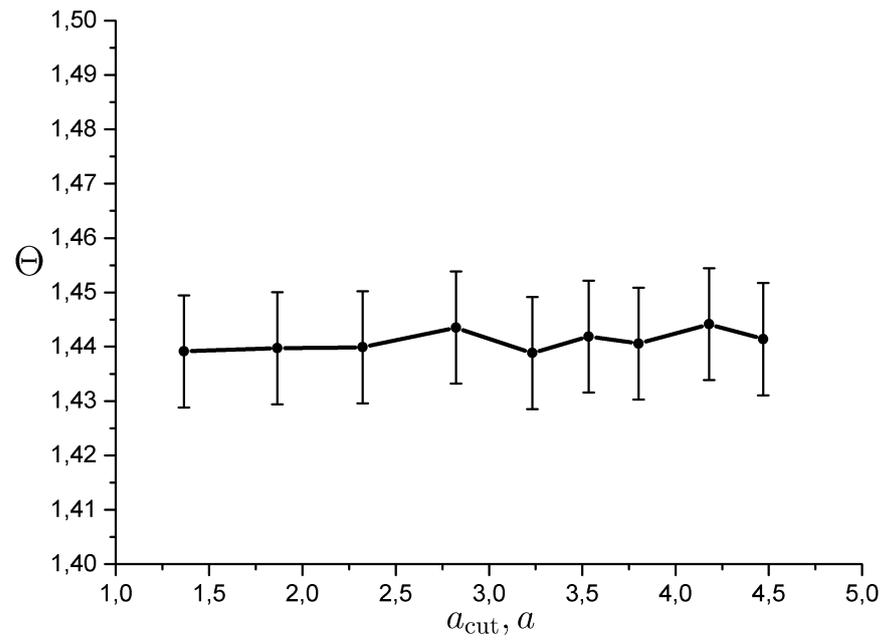


Рис. 45: Зависимость отношения компонент тензора Θ от количества учитываемых координационных сфер.

малых значениях модуля сдвига и $\Gamma_{e,yy} < \Gamma_{e,xx}$ при малых значениях модулей Юнга. Что наглядно демонстрирует необходимость использования уравнения состояния Ми–Грюнайзена в тензорном виде.

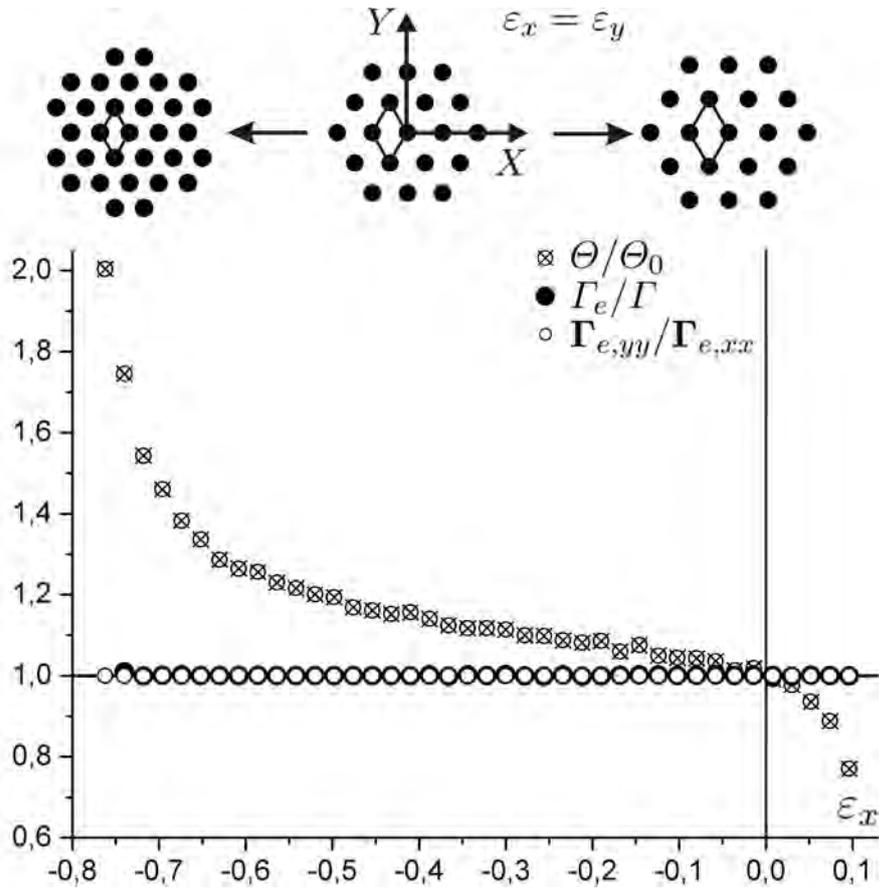


Рис. 46: Зависимость от объемной деформации отношений: диагональных компонент деформационной температуры Θ , шаровых частей функций Грюнайзе на Γ_e и Γ и диагональных компонент функции Грюнайзе Γ_e . Над графиком показаны направления главных осей тензора деформации, структура решетки относительно недеформированной конфигурации (в центре), элементарная ячейка и связь между компонентами тензора деформации.

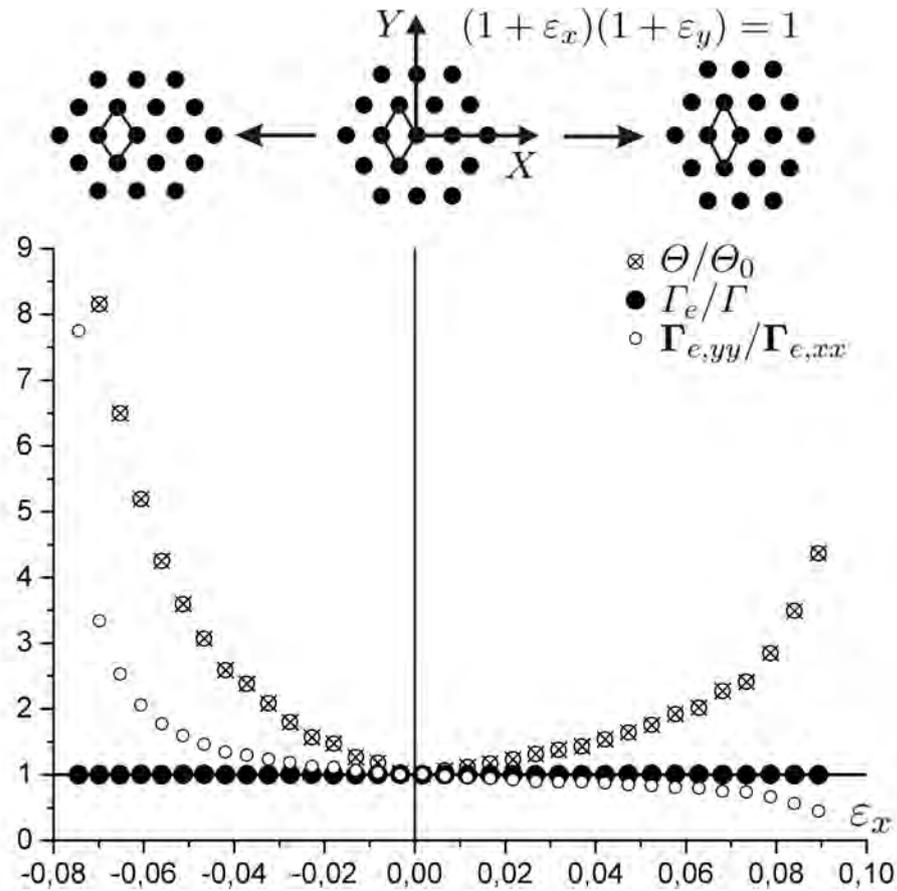


Рис. 47: Зависимость от деформации формоизменения отношений: диагональных компонент деформационной температуры Θ , шаровых частей функций Грюнайзена Γ_e и Γ и диагональных компонент функции Грюнайзена Γ_e . Над графиком показаны направления главных осей тензора деформации, структура решетки относительно недеформированной конфигурации (в центре), элементарная ячейка и связь между компонентами тензора деформации.

Влияние деформации на отношение $\frac{\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{yy}}{\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{xx}}$ показано на рис. 48. Цветом $\left(\frac{\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{yy}}{\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{xx}} - 1.435 \right) / 1.435$. Можно видеть, что отношение сохраняется неизменным только в узкой области, шириной $\approx 3\%$ вдоль линии гидростатического сжатия треугольной решетки. Области полученные на рис. 48 являются областями устойчивости треугольной решетки, подробнее они будут описаны в следующей главе. Отношение быстро растет к границам области что во многом связано с уменьшением модулей сдвига (после деформации решетка становится анизотропной) и, соответственно, увеличением амплитуды сдвиговых мод колебаний. Исключение составляет точка потери устойчивости при гидростатическом растяжении образца, где отношение убывает более чем в два раза. Если рассмотреть модули упругости в неустойчивых точках, то видно, что модули

сдвига становятся отрицательными по всей неустойчивой области, в то время как модули Юнга отрицательны только между областями устойчивости и на верхних гранях, таким образом можно предположить, что уменьшение отношения будет только в тех точках, где модули Юнга стремятся к нулю быстрее, чем модули сдвига. Маленькая область между двумя основными соответствует квадратной решетке, как можно заметить значение отношения в этой области существенно выше 1.41 и находится в диапазоне 3.05...14.45.

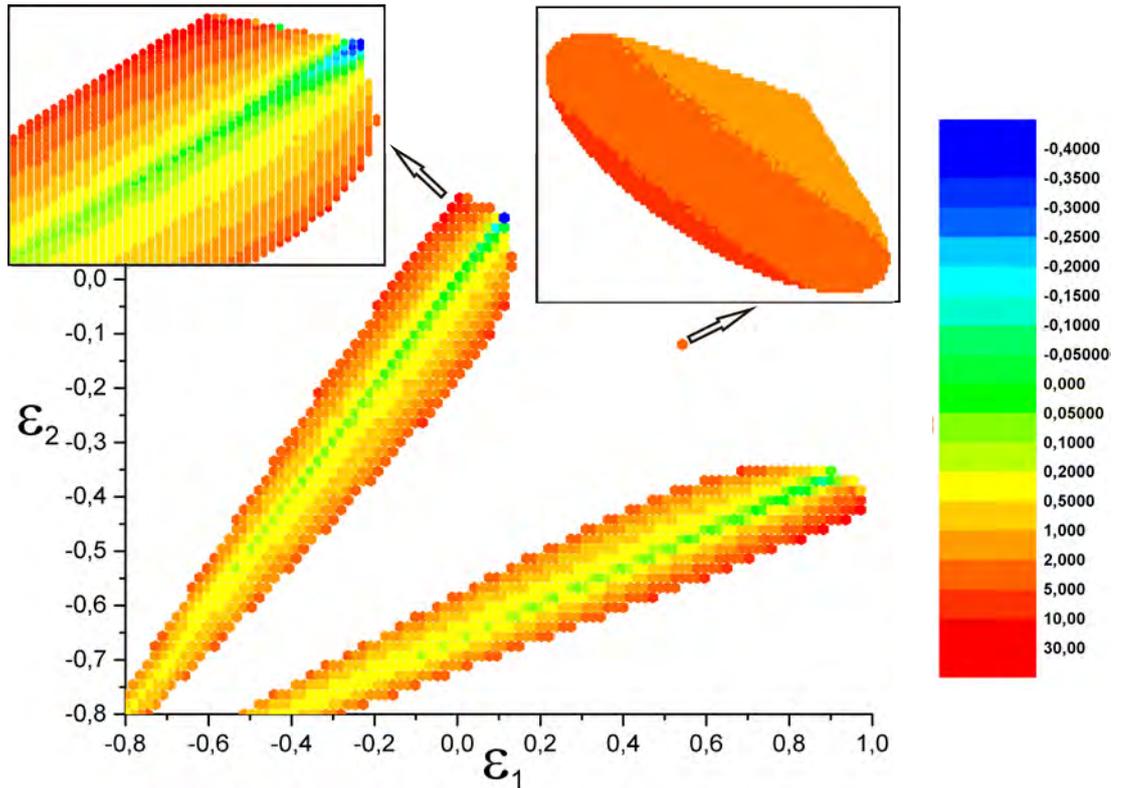


Рис. 48: Зависимость отношения компонент тензора $\frac{\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{yy}}{\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{xx}}$ от деформации, ось 1 направлена вдоль основания треугольной решетки, ось 2 перпендикулярно, цветом показано отклонение в долях отношения $\frac{\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{yy}}{\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_{xx}}$ от значения 1.41.

3.3 Корреляционный тензор

Для понимания физического смысла компонент тензора $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_r$ перепишем его через перемещения \mathbf{u}_k и \mathbf{u} :

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_k &= \mathbf{a}_k + \mathbf{u}_k - \mathbf{u} \\ \tilde{\mathbf{A}}_k &= \tilde{\mathbf{u}}_k - \tilde{\mathbf{u}} \end{aligned} \quad (78)$$

Тогда тензор $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_r$ принимает следующий вид:

$$\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_r = \langle \tilde{\mathbf{u}}_k \tilde{\mathbf{u}}_k \rangle_r - 2\langle \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}_k \rangle_r - \langle \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}} \rangle_r = 2\langle \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}} \rangle_r - 2\langle \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}_k \rangle_r \quad (79)$$

Введем обозначения $\tilde{\boldsymbol{\xi}}_k = \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}_k$ — тензор ковариации перемещений, $\tilde{\boldsymbol{\eta}}_k = \dot{\tilde{\mathbf{u}}} \tilde{\mathbf{u}}_k$ — тензор ковариации скоростей, $\tilde{\boldsymbol{\rho}} = \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}$ — тензор дисперсии перемещений, $\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \dot{\tilde{\mathbf{u}}} \dot{\tilde{\mathbf{u}}}$ — тензор дисперсии скоростей.

Таким образом, тензор $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_r$ является тензором деформаций связей и вычисляется как удвоенная разность между дисперсиями и корреляциями.

$$\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle_r = 2\langle \tilde{\boldsymbol{\xi}} \rangle_r - 2\langle \tilde{\boldsymbol{\xi}}_k \rangle_r \quad (80)$$

На рис. 49, 51, 52 показано, что корреляции и дисперсия постепенно растут со временем стремясь к асимптотическому значению, в тоже время их разность согласно рис. 40 достигает равновесного значения за несколько T . Со временем также растет среднеквадратичное отклонение значений корреляции и дисперсии перемещений в кристалле ($> 25\%$), но компоненты тензора $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle$ меняются во времени очень слабо.

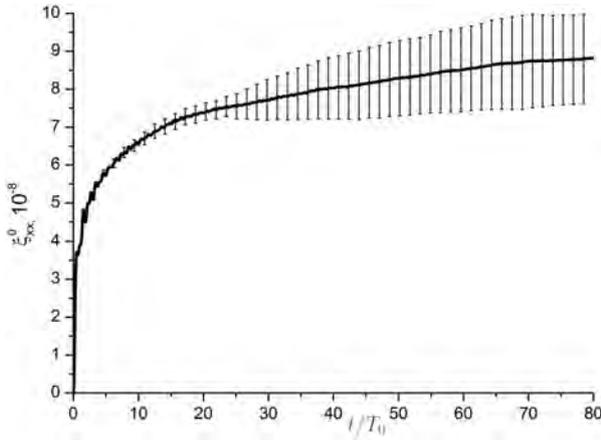


Рис. 49: Зависимость дисперсии перемещений частиц ξ_{xx}^0 от времени.

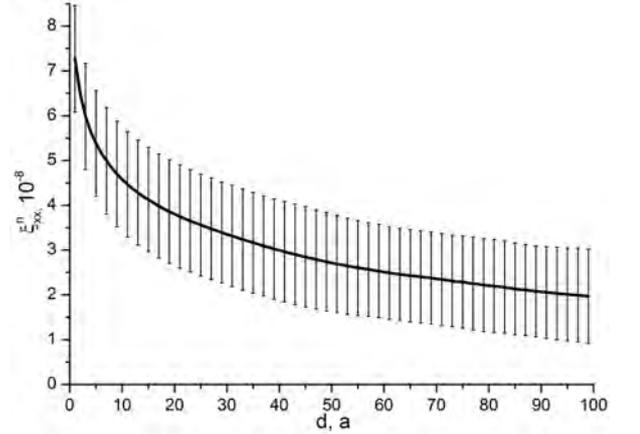


Рис. 50: Зависимость продольной компоненты тензора корреляций ξ_{xx}^k от расстояния.

Из рис. 53 и рис. 54 мы можем сделать вывод, что корреляции распространяются как волна в кристалле и постепенно выходят на некоторый средний уровень.

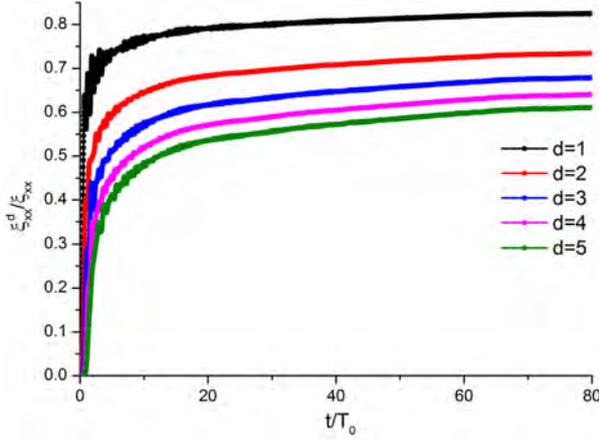


Рис. 51: Зависимость отношения продольной компоненты тензора корреляций к дисперсии $\tilde{\xi}_{xx}^d / \tilde{\xi}_{xx}^0$ от времени для различных координационных сфер, нумеруемых d .

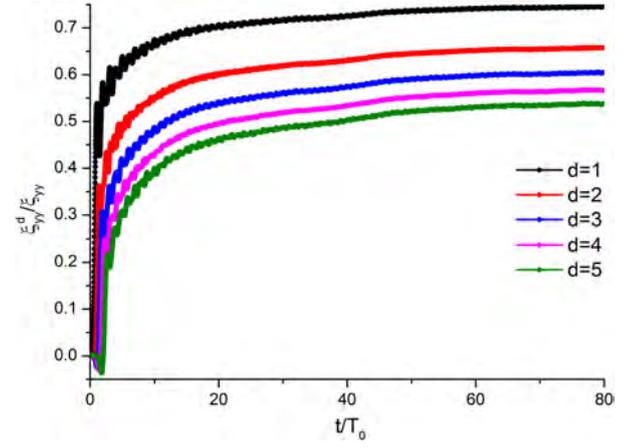


Рис. 52: Зависимость отношения поперечной компоненты тензора корреляций к дисперсии $\tilde{\xi}_{yy}^d / \tilde{\xi}_{xx}^0$ от времени для различных координационных сфер, нумеруемых d .

3.4 Детерминированная задача определение корреляций перемещений частиц в идеальной решетке

Следуя работе [26] рассмотрим идеальный кристалл с периодическими граничными условиями, заданными случайными начальными скоростями и неподвижным центром масс. Поскольку система однородна все частицы эквивалентны, для произвольной векторной или тензорной функции $f(\mathbf{r})$ выполняется условие:

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle_r = \langle f(\mathbf{r} + \mathbf{A}_k) \rangle_r \quad (81)$$

Постулируем тождество для произвольных функций $f(\mathbf{r})$ и $g(\mathbf{r})$:

$$\langle f(\mathbf{r})g(\mathbf{r}) \rangle_r = \langle f(\mathbf{r} - \mathbf{A}_k)g(\mathbf{r}) \rangle_r \quad (82)$$

Используя 81 и 82 получим:

$$\langle f(\mathbf{r} + \mathbf{A}_k)g(\mathbf{r}) \rangle_r = \langle f(\mathbf{r} - \mathbf{A}_k + \mathbf{A}_k)g(\mathbf{r} + \mathbf{A}_k) \rangle_r = \langle f(\mathbf{r})g(\mathbf{r} + \mathbf{A}_k) \rangle_r \quad (83)$$

Запишем уравнение динамики кристалла в линейном приближении.

$$\ddot{\mathbf{u}} = \omega_0^2 \sum_k (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}) = \omega_0^2 \sum_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \cdot (\mathbf{u}_k - \mathbf{u}) = \omega_0^2 \Delta \mathbf{u}_n \quad (84)$$

где n - нумерует частицы, $\omega_0^2 = \frac{C}{m}$ - частота колебаний пары частиц.

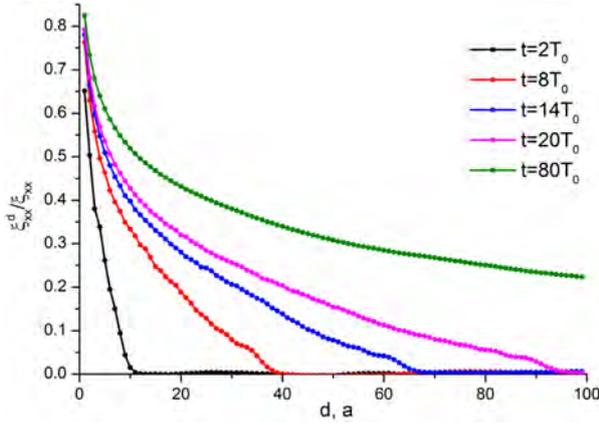


Рис. 53: Зависимость отношения продольной компоненты тензора корреляций к дисперсии $\tilde{\xi}_{xx}^d / \tilde{\xi}_{xx}^0$ от расстояния для различных моментов времени, нумеруемых d .

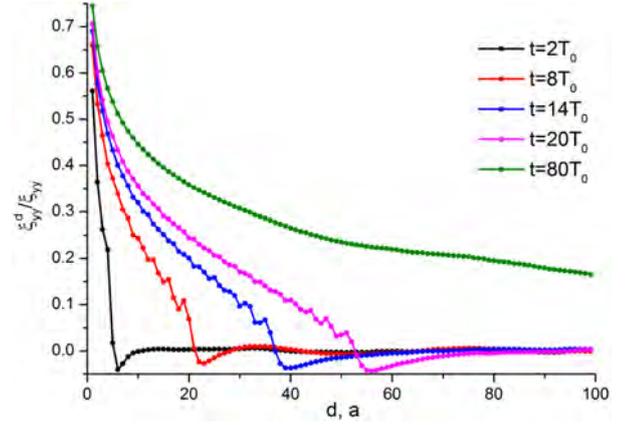


Рис. 54: Зависимость отношения поперечной компоненты тензора корреляций к дисперсии $\tilde{\xi}_{yy}^d / \tilde{\xi}_{yy}^0$ от расстояния для различных моментов времени, нумеруемых d .

Тензорно домножим уравнение (84) на \mathbf{u}_k и $\dot{\mathbf{u}}_k$, затем найдем средние по пространству.

$$\begin{aligned} \langle \ddot{\mathbf{u}}_k \rangle_r &= \omega_0^2 \sum_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \cdot (\langle \mathbf{u}_k \mathbf{u}_k \rangle_r - \langle \mathbf{u} \mathbf{u} \rangle_r) \\ \langle \ddot{\mathbf{u}} \dot{\mathbf{u}}_k \rangle_r &= \omega_0^2 \sum_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \cdot (\langle \mathbf{u}_k \dot{\mathbf{u}}_k \rangle_r - \langle \mathbf{u} \dot{\mathbf{u}} \rangle_r) \end{aligned} \quad (85)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \mathbf{u} \mathbf{u} \rangle_r &= \langle \dot{\mathbf{u}} \mathbf{u} \rangle_r + \langle \mathbf{u} \dot{\mathbf{u}} \rangle_r = 2 \langle \dot{\mathbf{u}} \mathbf{u} \rangle_r \\ \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{u} \mathbf{u} \rangle_r &= 2 \langle \ddot{\mathbf{u}} \mathbf{u} \rangle_r + 2 \langle \dot{\mathbf{u}} \dot{\mathbf{u}} \rangle_r \\ \frac{d}{dt} \langle \dot{\mathbf{u}} \dot{\mathbf{u}} \rangle_r &= 2 \langle \ddot{\mathbf{u}} \dot{\mathbf{u}} \rangle_r \end{aligned} \quad (86)$$

С учетом производных от корреляционных тензоров (86) и их симметричности уравнения (85) приводятся к виду:

$$\langle \ddot{\boldsymbol{\xi}}_k \rangle_r = 2 \langle \ddot{\boldsymbol{\eta}}_k \rangle_r + 2\omega_0^2 \sum_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \cdot (\langle \dot{\boldsymbol{\xi}} \rangle_r - \langle \dot{\boldsymbol{\xi}}_k \rangle_r) \quad (87)$$

$$\langle \ddot{\boldsymbol{\eta}}_k \rangle_r = \omega_0^2 \sum_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \cdot (\langle \dot{\boldsymbol{\xi}} \rangle_r - \langle \dot{\boldsymbol{\xi}}_k \rangle_r) \quad (88)$$

Проинтегрируем уравнение (88) по времени и подставим $\langle \ddot{\boldsymbol{\eta}}_k \rangle_r$ в (87)

$$\langle \ddot{\boldsymbol{\xi}}_k \rangle_r = 2\sigma^2 \delta_k \mathbf{E} + 4\omega_0^2 \sum_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \cdot (\langle \dot{\boldsymbol{\xi}} \rangle_r - \langle \dot{\boldsymbol{\xi}}_k \rangle_r) \quad (89)$$

где σ^2 – константа интегрирования, определяемая из начальных условий $\langle \boldsymbol{\eta}_k \rangle_r |_{t=0, k=0} = \frac{2}{m} \tilde{K}$, поскольку среднее от всех корреляции в начальный момент времени равно нулю.

Таким образом, мы переходим от стохастической задачи (84) на перемещения частиц со случайными начальными скоростями к детерминированной задаче динамики корреляций (89) с некоторой сосредоточенной обобщенной силой.

Для сравнения стохастической и детерминированной задач была использована конфигурация из пункта 2.3. В центре образца помещена частица с индексом $n = 0$. В ходе расчета на неё действовала добавочная постоянная сила $\frac{2}{m} \tilde{K}$, где \tilde{K} соответствует начальной кинетической энергии в стохастической задаче. Далее уравнение (89) интегрировалось по схеме Верле.

Как видно из рисунка 55 результаты детерминированной и стохастической задачи полностью совпадают.

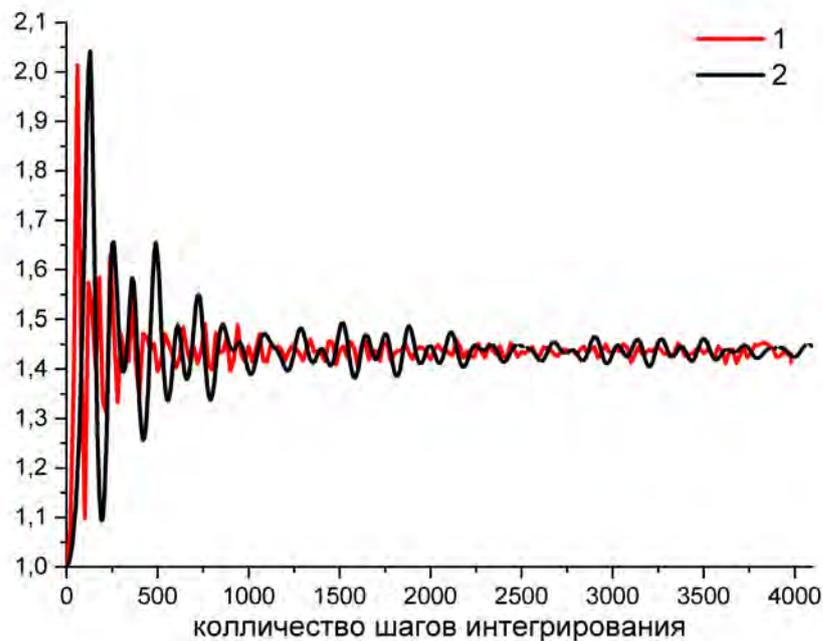


Рис. 55: Зависимость отношения компонент тензора $\frac{\tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_{kyy}}{\tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_{kxx}}$ от шага интегрирования. Для стохастической задачи (1) и детерминированной (2).

3.5 Выводы

Суммируя полученные выше результаты можно сделать следующие выводы:

1. В данной главе было проведено уточнение вида тензора $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle$, что позволяет перейти к аналитическим выражениям для тензора тепловых напряжений $\tilde{\boldsymbol{\tau}}$ (71), тепловой составляющей полной энергии \tilde{U} (72) и их упрощенных выражений, (73),(74) и коэффициента Грюнайзена (75), погрешность которых меньше 1%.
2. Получено, что отношение компонент $\Theta = \frac{\tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_{kyy}}{\mathbf{A}_k \mathbf{A}_{kxx}}$ не зависит от размера образца, формы парного центрального потенциала взаимодействия, слабо ($< 10\%$) растет с температурой и существенно убывает только вблизи границы области устойчивости.
3. Отношение продольной к поперечной компоненте тензора $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle$ существенно зависит от деформаций, постоянно только вдоль линии гидростатического сжатия и резко растет при приближении к границам области устойчивости, однако при гидростатическом растяжении стремится к нулю.
4. Показано, что результаты детерминированной задачи (89) полностью согласуются с результатами стохастической. Таким образом, для определения тензора $\langle \tilde{\mathbf{A}}_k \tilde{\mathbf{A}}_k \rangle$ можно перейти к тензорной задаче о действии сосредоточенной силы.

Заключение

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 решетки 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 треугольной 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 цен-

трального 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.

Список литературы

- [1] Абрамян А.К. и др. Влияние структуры ограничивающих стенок на течение жидкости в наноканалах / А.К. Абрамян // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. – 2010. – №. 3. – С. 87-99.
- [2] Альтенбах Х., Еремеев В.А., Морозов Н.Ф. Об уравнениях линейной теории оболочек при учете поверхностных напряжений / Х. Альтенбах, В.А. Еремеев, Н.Ф. Морозов // Известия РАН. Механика твердого тела. – 2010. – № 3. – С. 30–44.
- [3] Альтшулер Л.В. Применение ударных волн в физике высоких давлений / Л.В. Альтшулер // Успехи физических наук. – 1965. – Т. 85. – №. 2. – С. 199-258.
- [4] Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. Т. 1, 2./ Н. Ашкрофт, Н. Мермин. – М.: Мир, 1979. – 399 С.
- [5] Беринский И.Е., Иванова Е. А., Кривцов А. М., Морозов Н. Ф. Применение моментного взаимодействия к построению устойчивой модели кристаллической решетки графита / И.Е. Беринский, Е.А. Иванова, А.М. Кривцов, Н.Ф. Морозов // Известия РАН. Механика твердого тела. – 2007. – №. 5. – С. 6-16.
- [6] Блехман И.И. Теория вибрационных процессов и устройств. Вибрационная механика и вибрационная техника / И.И. Блехман. – СПб.: Руда и металлы. 2013.
- [7] Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. / Боголюбов Н.Н. – ОГИЗ. Гостехиздат, 1946.
- [8] Борн М. Динамика кристаллической решетки / М. Борн. – М., 1932.

- [9] Васильев Б.В., Любошиц В.Л. Теорема вириала и некоторые свойства электронного газа в металлах / Б.В. Васильев, В.Л. Любошиц // Успехи физических наук. – 1994. – Т. 164. – №. 4. – С. 367-374.
- [10] Гольдштейн Р.В., Городцов В.А., Лисовенко Д.С. Мезомеханика многослойных углеродных нанотрубок и нанопроволок / Р.В. Гольдштейн, В.А. Городцов, Д.С. Лисовенко // Физическая мезомеханика. – 2008. –Т. 11. – №. 6. – С. 25–42.
- [11] Гольдштейн Р.В., Городцов В.А., Устинов К.Б. Влияние поверхностных остаточных напряжений и поверхностной упругости на деформирование шарообразных включений нанометровых размеров в упругой матрице / Р.В. Гольдштейн, В.А. Городцов, К.Б. Устинов // Физическая мезомеханика. – 2010. – Т. 13. – № 5. – С. 127-138.
- [12] Дмитриев С.В., Баимова Ю.А., Савин А.В., Кившарь Ю.С. Границы устойчивости плоского листа графена при деформации в плоскости / С.В. Дмитриев, Ю. А. Баимова, А.В. Савин, Ю.С. Кившарь // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2011. – Т. 93. – №. 10. – С. 632-637.
- [13] Долгушева Е.Б., Трубицын В.Ю. Молекулярно-динамическое исследование структурной стабильности нанопленок ОЦК-циркония / Е.Б. Долгушева, В.Ю. Трубицын //Физика твердого тела. – 2012. – Т. 54. – №. 8. – С. 1549-1558.
- [14] Еремеев В.А., Зубов Л.М. Об устойчивости равновесия нелинейно-упругих тел, испытывающих фазовые превращения / В.А. Еремеев, Л.М. Зубов // Изв. АН. МТТ. – 1991. – №. 2. – С. 56*65.
- [15] Еремеев В.А., Зубов Л.М. Об устойчивости упругих тел с моментными напряжениями / В.А. Еремеев, Л.М. Зубов // Изв. РАН. МТТ. – 1994. – №.3. – С. 181-190.

- [16] Жарков В.Н., Калинин В.А. Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах / В.Н. Жарков, В.А. Калинин. – М.:Наука, 1968. – 311 с.
- [17] Жирифалько Л. Статистическая физика твердого тела / Л. Жирифалько. – М.:Мир, 1975. – 382 с. вещества при высоких плотностях энергии / Е. И. Краус // Вестник НГУ. Серия: Физика. – 2007. – Т. 2 – №. 2. – С. 65-73.
- [18] Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений / Я.Б. Зельдович, Ю.П. Райзер – М.:Наука, 1966. – 688 с.
- [19] Зубарев В.Н., Ващенко В.Я. О коэффициенте Грюнайзена / В.Н. Зубарев, В.Я. Ващенко // ФТТ. –1963. –Т.5. –С. 886-891
- [20] Зубов Л.М., Рудев А.Н. Критерий сильной эллиптичности уравнений равновесия изотропного нелинейно-упругого материала / Л.М. Зубов, А.Н. Рудев // Прикладная математика и механика. – 2011. – Т. 75. – №. 4. – С. 613-634.
- [21] Краус Е.И. Малопараметрическое уравнение состояния твердого вещества при высоких плотностях энергии / Е.И. Краус. – Новосибирский государственный университет, 2007.
- [22] Кривцов А.М., Термоупругость одномерной цепочки взаимодействующих частиц / А.М. Кривцов, Т.П. Товстик // Известия высших учебных заведений. Северо-Кавказский регион. Естественные науки. – 2003. – Спецвыпуск. Нелинейные проблемы механики сплошных сред. – С. 231-243.
- [23] Кривцов А. М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой / А. М. Кривцов. – М.: Физматлит, 2007. – 304 с.
- [24] Кривцов А.М., Кузькин В.А. Получение уравнений состояния идеальных кристаллов простой структуры / А.М. Кривцов, В.А. Кузькин // Известия РАН. Механика твердого тела. – 2011. – №. 3. – С. 67-82.

- [25] Кривцов А.М. Колебания энергий в одномерном кристалле / А.М. Кривцов // Доклады академии наук, – 2014. – Т. 458. – №. 3. – С. 279-279.
- [26] Кузькин В.А., Кривцов А.М. Аналитическое описание переходных тепловых процессов в гармонических кристаллах / В.А. Кузькин, А.М. Кривцов // Физика твердого тела. – 2017. – Т. 59. – №. 5. – С. 1023-1035.
- [27] Лобода О.С., Кривцов А.М. Влияние масштабного фактора на модули упругости трехмерного нанокристалла / О.С. Лобода, А.М. Кривцов // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. – 2005. – №. 4. – С. 27-41.
- [28] Лурье А. И. Нелинейная теория упругости / А. И. Лурье. – М.:Наука, 1980. – 512 с.
- [29] Пальмов В. А. Элементы тензорной алгебры и тензорного анализа: учеб. пособие / В. А. Пальмов. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2008. – 108 с.
- [30] Подольская Е.А. Равновесие и устойчивость гпу-структур при конечных деформациях / Е.А. Подольская // Доклады Академии наук. – 2014. – Т. 457. – №. 5. – С. 539-539.
- [31] 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.
- [32] Псахье С. Г. и др. О термофлуктуационном формировании локальных структурных изменений в кристалле в условиях динамического нагружения / С.Г. Псахье и др. // Физическая мезомеханика. – 2005. – Т. 8. – №. 5.
- [33] Ткачев П.В., Кривцов А.М. Критерий устойчивости внутренней структуры материала / П.В. Ткачев, А.М. Кривцов // XXXIII Неделя науки СПбГПУ.

- Материалы международной научно-практической конференции. Часть V.
– СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2004. – С. 4-6.
- [34] Товстик П.Е., Товстик Т.П. Модель двумерного графитового слоя / П.Е. Товстик, Т.П. Товстик // Вестн. С.-Петерб. ун-та. – 2009. – №. 3. – С. 1-11.
- [35] Трусделл К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред / К. Трусделл. – М.: Мир, 1975. – 592 с.
- [36] Abeyaratne R.C., Bhattacharya K., Knowles J.K. Strain-energy functions with multiple local minima: modeling phase transformations using finite thermoelasticity / R.C. Abeyaratne, K. Bhattacharya, J.K. Knowles // Nonlinear Elasticity: Theory and Application. – Cambridge University Press, 2001. – P. 433-490.
- [37] Alder B.J. Phase transition for a hard sphere system / B.J. Alder, T.E. Wainwright // The Journal of chemical physics. – 1957. – V. 27. – №. 5. – P. 1208-1209.
- [38] Allen M.P., Tildesley D.J. Computer simulation of liquids/ M.P. Allen, D.J. Tildesley – Clarendon Press, Oxford, 1987. – 385 p.
- [39] Anderson O.L. The Gruneisen ratio for the last 30 years / O.L. Anderson // Geophysical Journal International. – 2000. – V. 143. – №. 2. – P. 279-294.
- [40] Balasubramanian A.K., Ramachandran K. Thermal expansion of ZnSe by molecular dynamics simulation / A.K. Balasubramanian, K. Ramachandran//Molecular Simulation. – 2007. – V. 33. – №. 8. – P. 685-688.
- [41] Ball R.D.. Strong anharmonicity in ionic crystals: self-consistent phonons and shell models / R.D. Ball // J. Phys. C: Solid State Phys. – 1986. – V. 19. – P. 1293-1309.

- [42] Ball J.M., James R.D. Fine phase mixtures as minimizers of energy / J.M. Ball, R.D. James // Archive for Rational Mechanics and Analysis. – 1987. – V. 100. – №. 1. – C. 13-52.
- [43] Barron T.H.K., Domb C. On the cubic and hexagonal close-packed lattices / T.H.K. Barron, C. Domb // Proc. R. Soc. Lond. A. – 1955. – V. 227. – №. 1171. – P. 447-465.
- [44] Bekker H. et al. An efficient, box shape independent non-bonded force and virial algorithm for molecular dynamics / H. Bekker et al. // Molecular Simulation. – 1995. – V. 14. – №. 3. – P. 137-151.
- [45] Berlin A.A. et al. Thermal Expansion Coefficient in Simple Models of Condensed Media / A.A. Berlin et al. // Doklady Physical Chemistry. – 2004. – V. 397. – №. 4-6. – P. 187-190.
- [46] Born M. et al. Festschrift zur Feier des Zweihundertjährigen Bestehens der Akademie der Wissenschaften in Gottingen: I. Mathematisch-Physikalische Klasse. / M. Born et al. – Springer-Verlag, 1951.
- [47] Born M., Huang K. Dynamical Theory of Crystal Lattices / M. Born, K. Huang. – Oxford: Clarendon, 1954. – 420 p.
- [48] Chen Y. et al. Thermal expansion and impurity effects on lattice thermal conductivity of solid argon / Y. Chen et al. // The Journal of chemical physics. – 2004. – V. 120. – №. 8. – P. 3841-3846.
- [49] Clausius R. On a mechanical theorem applicable to heat / R. Clausius // The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science. – 1870. – V. 40. – №. 265. – P. 122-127.
- [50] Conti S., Zanzotto G. A variational model for reconstructive phase transformations in crystals, and their relation to dislocations and plasticity / S. Conti, G. Zanzotto // Archive for rational mechanics and analysis. – 2004. – V. 173. – №. 1. – P. 69–88.

- [51] Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals / M.S. Daw, M.I. Baskes // Physical Review B. – 1984. – V. 29. – №. 12. – P. 6443.
- [52] Dellepiane G., Piseri L. Self-consistent harmonic torsional frequencies / G. Dellepiane, L. Piseri // Journal of Molecular Spectroscopy. – 1976. – V. 59. – P. 209-215.
- [53] Delph T.J., Zimmerman J.A. Prediction of instabilities at the atomic scale / T.J. Delph, J.A. Zimmerman // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2010. – V. 18. – №. 4. – P. 045008
- [54] Dobson J.F. “Self-consistent” phonons for paupers / Dobson J.F. // Physics Letters A. – 1977. – V. 62. – №. 5. – P. 368-370.
- [55] Duan H.L., Wang J., Karihaloo B.L. Theory of elasticity at the nanoscale / H.L. Duan, J. Wang, B.L. Karihaloo // Advances in Applied Mechanics. – 2009. – V. 42. – P. 1-68.
- [56] Dugdale J.S., MacDonald D.K.C. The thermal expansion of solids / J.S. Dugdale, D.K.C. MacDonald // Physical Review. – 1953. – V. 89. – №. 4. – P. 832.
- [57] E W., Ming P. Cauchy–Born rule and the stability of crystalline solids: static problems / W. E, P. Ming // Archive for Rational Mechanics and Analysis. – 2007. – V. 183. – №. 2. – P. 241-297.
- [58] E W., Ming P. Cauchy-Born rule and the stability of crystalline solids: dynamic problems / W. E, P. Ming // Acta Mathematicae Applicatae Sinica, English Series. – 2007. – V. 23. – №. 4. – P. 529-550.
- [59] Elliott R.S., Shaw J.A., Triantafyllidis N. Stability of pressure-dependent, thermally-induced displacive transformations in bi-atomic crystals / R.S. Elliott, J.A. Shaw, N. Triantafyllidis // International journal of solids and structures. – 2002. – V. 39. – №. 13. – P. 3845-3856.

- [60] Elliott R.S., Triantafyllidis N., Shaw J.A. Stability of crystalline solids—I: continuum and atomic lattice considerations / R.S. Elliott, N. Triantafyllidis, J.A. Shaw // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2006. – V. 54. – №. 1. – P. 161-192.
- [61] Ercolessi F., Parrinello M., Tosatti E. Simulation of gold in the glue model / F. Ercolessi, M. Parrinello, E. Tosatti // *Philosophical magazine A*. – 1988. – T. 58. – №. 1. – C. 213-226.
- [62] Ericksen J.L. On the Cauchy-Born Rule / J.L. Ericksen // *Mathematics and Mechanics of Solids*. – 2008. – V. 13. – №. 3-4. – P. 199–220.
- [63] Errea I., Calandra M., Mauri F. Anharmonic free energies and phonon dispersions from the stochastic self-consistent harmonic approximation: Application to platinum and palladium hydrides / I. Errea, M. Calandra, F. Mauri // *Physical Review B*. – 2014. – V. 89. – №. 6. – P. 064302.
- [64] Fosdick R.L., James R.D. The elastica and the problem of the pure bending for a non-convex stored energy function / R.L. Fosdick, R.D. James // *Journal of Elasticity*. – 1981. – V. 11. – №. 2. – P. 165-186.
- [65] Freidin A.B., Fu Y.B., Sharipova L.L., Vilchevskaya E.N. Spherically symmetric two-phase deformations and phase transition zones / A.B. Freidin, Y.B. Fu, L.L. Sharipova, E.N. Vilchevskaya // *International journal of solids and structures*. – 2006. – V. 43. – №. 14. – P. 4484-4508.
- [66] Friesecke G., Theil F. Validity and failure of the Cauchy-Born hypothesis in a two-dimensional mass-spring lattice / G. Friesecke, F. Theil // *Journal of nonlinear Science*. – 2002. – V. 12. – №. 5. – P. 445-478.
- [67] Gibbs M.W. *Shadow & Light*. / M.W. Gibbs. – U of Nebraska Press, 1902.
- [68] Gillis N.S., Werthamer N.R., Koehler T.R. Properties of crystalline argon and neon in the self-consistent phonon approximation / N.S. Gillis, N.R. Werthamer, T.R. Koehler // *Physical Review*. – 1968. – V. 165. – №. 3. – P. 951.

- [69] Grekov M., Morozov N. Surface effects and problems of nanomechanics / M. Grekov, N. Morozov // J. Ningbo Univ. – 2012. – V. 25. – №. 1. – P. 60-63.
- [70] Goldman V.V., Horton G.K., Klein M.L. A theoretical study of the lattice dynamics of neon and its isotopes / V.V. Goldman, G.K. Horton, M.L. Klein // Journal of Low Temperature Physics. – 1969. – V. 1. – №. 5. – P. 391-405.
- [71] Gurtin M.E. Two-phase deformations of elastic solids / M.E. Gurtin // Archive for rational mechanics and analysis. – 1983. – V. 84. – №. 1. – P. 1-29.
- [72] Hadamard J. Leçons sur la Propagation des Ondes et les Equations d'Hydrodynamique / J. Hadamard. – Paris. – 1903.
- [73] Hardy R. J. Formulas for determining local properties in molecular-dynamics simulations: Shock waves //The Journal of Chemical Physics. – 1982. – T. 76. – №. 1. – C. 622-628.
- [74] Hooton D.J. A new treatment of anharmonicity in lattice thermodynamics: I / D.J. Hooton // The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science. – 1955. – V. 46. – №. 375. – P. 422-432.
- [75] Hooton D.J. A new treatment of anharmonicity in lattice thermodynamics: II / D.J. Hooton //The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science. – 1955. – V. 46. – №. 375. – P. 433-442.
- [76] Hoover W.G. Molecular dynamics / W.G. Hoover // Molecular Dynamics. – 1986. – V. 258.
- [77] Hundur Y., Hippler R., Guvenc Z.B. Molecular dynamics study of a thermal expansion coefficient: Ti bulk with an elastic minimum image method / Y. Hundur, R. Hippler, Z.B. Guvenc // Chinese Physics Letters. – 2006. – V. 23. – №. 5. – P. 1068.

- [78] Irving J.H., Kirkwood J.G. The statistical mechanical theory of transport processes. IV. The equations of hydrodynamics / J.H. Irving, J.G. Kirkwood // The Journal of chemical physics. – 1950. – V. 18. – №. 6. – P. 817-829.
- [79] Kimminau G. et al. Phonon instabilities in uniaxially compressed fcc metals as seen in molecular dynamics simulations / G. Kimminau et al. // Physical Review B. – 2010. – V. 81. – №. 9. – P. 092102.
- [80] Knowles J.K., Sternberg E. On the failure of ellipticity and the emergence of discontinuous deformation gradients in plane finite elastostatics / J.K. Knowles, E. Sternberg // Journal of Elasticity. – 1978. – V. 8. – №. 4. – P. 329–379.
- [81] Korchuganov A.V. et al. MD simulation of plastic deformation nucleation in stressed crystallites under irradiation / A.V. Korchuganov et al. // Physics of Atomic Nuclei. – 2016. – V. 79. – №. 7. – P. 1193-1198.
- [82] Kukushkin S.A., Osipov A.V. First-order phase transition through an intermediate state / S.A. Kukushkin, A.V. Osipov // Physics of the Solid State. – 2014. – V. 56. – №. 4. – P. 792-800.
- [83] Kukushkin S.A., Osipov A.V. Quantum mechanical theory of epitaxial transformation of silicon to silicon carbide / S.A. Kukushkin, A.V. Osipov // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2017. – V. 50. – №. 46. – P. 464006.
- [84] Lehoucq R.B., Von Lilienfeld-Toal A. Translation of Walter Noll's "Derivation of the fundamental equations of continuum thermodynamics from statistical mechanics" / R.B. Lehoucq // Journal of Elasticity. – 2010. – V. 100. – №. 1-2. – P. 5-24.
- [85] Leach A.R. Molecular modelling: principles and applications. / A.R. Leach. – Pearson education, 2001.
- [86] Lennard-Jones J.E. The determination of molecular fields I. From the variation of the viscosity of a gas with temperature / J.E. Lennard-Jones // Proceedings of the Royal Society of London. – 1924. – V. 106. – №. 441. – P. 463-477.

- [87] Li J. et al. Elastic criterion for dislocation nucleation / J. Li et al. // Materials Science and Engineering: A. – 2004. – V. 365. – №. 1-2. – P. 25-30.
- [88] Lisovenko D.S. et al. Equilibrium structures of carbon diamond-like clusters and their elastic properties / D.S. Lisovenko et al. // Physics of the Solid State. – 2017. – V. 59. – №. 4. – P. 820-828.
- [89] Louwarse M.J., Baerends E.J. Calculation of pressure in case of periodic boundary conditions / M.J. Louwarse, E.J. Baerends // Chemical physics letters. – 2006. – V. 421. – №. 1-3. – P. 138-141.
- [90] MacDonald R. A., MacDonald W.M. Thermodynamic properties of fcc metals at high temperatures / R.A. MacDonald, W.M. MacDonald // Physical review B. – 1981. – V. 24. – №. 4. – P. 1715.
- [91] Milstein F., Rasky D. Theoretical study of shear-modulus instabilities in the alkali metals under hydrostatic pressure / F. Milstein, D. Rasky // Phys. Rev. B. – 1996. – V. 54. – №. 10. – P. 7016–7025.
- [92] Mishin Y. et al. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations / Y. Mishin et al. // Physical Review B. – 2001. – V. 63. – №. 22. – P. 224106.
- [93] Mohazzabi P., Behroozi F. Simple classical calculation of thermal expansion for rare-gas solids / P. Mohazzabi, F. Behroozi // Physical Review B. – 1987. – V. 36. – №. 18. – P. 9820.
- [94] Ogden R.W. Nonlinear elasticity, anisotropy, material stability and residual stresses in soft tissue / R.W. Ogden // Biomechanics of soft tissue in cardiovascular systems. – Springer, Vienna, 2003. – P. 65-108.
- [95] 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.

- [96] 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.
- [97] 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 // Nanosyst. Phys. Chem. Math. – 2011. – V. 2. – №. 3. – P. 60-64.
- [98] 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 // Nanosyst. Phys. Chem. Math. – 2011. – V. 2. – №. 2. – P. 84-90
- [99] Redkov A.V., Osipov A.V., Kukushkin S.A. Stability of the surface of an elastically strained multicomponent film in a system with chemical reactions / A.V. Redkov, A.V. Osipov, S.A. Kukushkin // Physics of the Solid State. – 2015. – V. 57. – №. 12. – P. 2524-2531.
- [100] Ruffa A.R. Temperature dependence of the elastic shear moduli of the cubic metals / A.R. Ruffa // Physical Review B. – 1977. – V. 16. – №. 6. – P. 2504.
- [101] Savin A.V., Kivshar Y.S., Hu B. Suppression of thermal conductivity in graphene nanoribbons with rough edges / A.V. Savin, Y.S. Kivshar, B. Hu // Physical Review B. – 2010. – V. 82. – №. 19. – P. 195422.
- [102] Schraad M.W., Triantafyllidis N. Scale effects in media with periodic and nearly periodic microstructures – I. Macroscopic properties / M.W. Schraad, N. Triantafyllidis // Journal of Applied Mechanics. – 1997. – V. 64. – №. 4. – P. 751-762.
- [103] Segletes S.B. A frequency-based equation of state for metals / S.B. Segletes // International journal of impact engineering. – 1998. – V. 21. – №. 9. – P. 747-760.

- [104] Shah P., Chakrabarti P., Chakravarty C. Structure and melting of Morse solids / P. Shah, P. Chakrabarti, C. Chakravarty // Molecular Physics. – 2001. – V. 99. – №. 7. – P. 573-583.
- [105] Sun X.W. et al. Condensed matter: electronic structure, electrical, magnetic, and optical properties: Effect of pressure on the thermal expansion of MgO up to 200 GPa / X.W. Sun et al. // Chinese Physics B. – 2009. – V. 18. – P. 5001-5007.
- [106] Thompson A. P., Plimpton S. J., Mattson W. General formulation of pressure and stress tensor for arbitrary many-body interaction potentials under periodic boundary conditions //The Journal of chemical physics. – 2009. – T. 131. – №. 15. – C. 154107.
- [107] Timon V. et al. Molecular dynamics calculations of the thermal expansion properties and melting points of Si and Ge / V. Timon et al. // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2006. – V. 18. – №. 13. – P. 3489.
- [108] Tsai D.H. The virial theorem and stress calculation in molecular dynamics / D.H. Tsai // The Journal of Chemical Physics. – 1979. – V. 70. – №. 1. – P. 1375–1382.
- [109] Umeno Y., Shimada T., Kitamura T. Dislocation nucleation in a thin Cu film from molecular dynamics simulations: instability activation by thermal fluctuations / Y. Umeno, T. Shimada, T. Kitamura // Physical Review B. – 2010. – V. 82. – №. 10. – P. 104108.
- [110] Umeno Y. et al. Atomistic Model Analysis of Local and Global Instabilities in Crystals at Finite Temperature / Y. Umeno et al. // Key Engineering Materials. – Trans Tech Publications, 2014. – V. 592. – P. 39-42.
- [111] Verlet L. Computer "experiments" on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules / L. Verlet // Physical review. – 1967. – V. 159. – №. 1. – P. 98.

- [112] Vetelino J.F., Namjoshi K.V., Mitra S.S. Mode-Gruneisen Parameters and Thermal-Expansion Coefficient of NaCl, CsCl, and Zinc-Blende-Type Crystals / J.F. Vetelino, K.V. Namjoshi, S.S. Mitra // Journal of Applied Physics. – 1970. – V. 41. – №. 13. – P. 5141-5144
- [113] Vocadlo N.L., Price G.D. The Gruneisen parameter—computer calculations via lattice dynamics / N.L. Vocadlo, G.D. Price // Physics of the earth and planetary interiors. – 1994. – V. 82. – №. 3-4. – P. 261-270.
- [114] Volkov A.E. et al. An explanation of phase deformation tension–compression asymmetry of TiNi by means of microstructural modeling / A.E. Volkov et al. // Journal of Alloys and Compounds. – 2013. – V. 577. – P. S127-S130.
- [115] Wallace D.C., Patrick J.L. Stability of crystal lattices / D.C. Wallace, J.L. Patrick // Phys. Rev. – 1965. – V. 137. – №. 1A. – P. 152–160.
- [116] Wang J., Li J., Yip S., Phillpot S., Wolf D. Mechanical instabilities of homogeneous crystals / J. Wang, J. Li, S. Yip, S. Phillpot, D. Wolf // Phys. Rev. – 1995. – V. 52. – №. 17B. – P. 12627–12635.
- [117] Wen Y.F., Sun J. Structural stability of higher-energy phases in Cu and Cu–Fe alloy revealed by ab initio calculations / Y.F. Wen, J. Sun // Computational Materials Science. – 2013. – V. 79. – P. 463-467.
- [118] Werthamer N.R. Self-consistent phonon formulation of anharmonic lattice dynamics / N.R. Werthamer // Physical Review B. – 1970. – V. 1. – №. 2. – P. 572.
- [119] Zabinska K. Mechanical stability of simple planar lattices / K. Zabinska // Physical Review B. – 1991. – V. 43. – №. 4. – P. 3450.