Санкт-Петербургский Государственный Политехнический Университет
Физико-Механический факультет, кафедра Теоретической механики

Устойчивость идеальной бесконечной кристаллической решетки

Е. А. Подольская, выпуск 2011 года
научный руководитель
д. ф.-м. н., проф. А. М. Кривцов

- Исследована устойчивость двумерной треугольной решетки при произвольной однородной деформации и ГЦК решетки при растяжении и сжатии в ортогональных направлениях.
- Для описания взаимодействия использован потенциал Морзе, соответствующий в упругости потенциалу Леннарда-Джонса.
- Критерий устойчивости заключался в требовании вещественности частоты упругих волн с любым волновым вектором.
- В двумерной задаче получены две области устойчивости, отвечающие горизонтальной и вертикальной ориентациям решетки.
- В случае диагонального тензора деформаций выяснен смысл границ областей как в терминах коэффициентов волнового уравнения, так и с помощью положительности модулей Юнга и сдвига.
- Проведены вычислительные эксперименты (2D и 3D без сдвига), подтверждающие результаты расчетов.

Обозначения

$\Pi(r) = D\left[e^{-2\theta\left(\frac{r}{a}-1\right)} - 2e^{-\theta\left(\frac{r}{a}-1\right)}\right]$ потенциал Морзе

$\Pi(r) = D\left[\left(\frac{a}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{a}{r}\right)^{6}\right]$ потенциал Леннарда-Джонса

$\underline{A}_k \approx \underline{a}_k \cdot \overset{o}{\nabla}\underline{R}$ длинноволновое приближение

$F_k = F(A_k) = -\Pi'(A_k)$ сила взаимодействия

$C_k = C(A_k) = \Pi''(A_k)$ жесткость связи

$\underline{\underline{A}}_k = \underline{A}_k\underline{A}_k \qquad {}^4\underline{\underline{A}}_k = \underline{A}_k\underline{A}_k\underline{A}_k\underline{A}_k$

$\mathcal{A}_k = -\frac{F_k}{A_k} \qquad \mathrm{B}_k = \frac{1}{A_k^{\,2}}(C_k - \mathcal{A}_k)$

$\underline{\underline{\mathcal{A}}} = \frac{1}{2}\sum_k \mathcal{A}_k\underline{\underline{A}}_k \qquad {}^4\underline{\underline{\mathrm{B}}} = \frac{1}{2}\sum_k \mathrm{B}_k\,{}^4\underline{\underline{A}}_k$

Уравнения движения

$$\boxed{\rho_0\underline{\ddot{u}} = \overset{o}{\nabla}\cdot\underline{\underline{P}}}$$

$\underline{\underline{P}} = \frac{1}{2V_0}\sum_k \Phi_k\underline{a}_k\underline{A}_k$ тензор Пиола

$\rho_0\delta\underline{\ddot{u}} = \overset{o}{\nabla}\cdot\delta\underline{\underline{P}}$ вариация уравнения движения при однородной деформации

$\underline{\upsilon} = \delta\underline{u} \qquad m = \rho_0 V_0$

$$\boxed{m\underline{\ddot{\upsilon}} = {}^4\underline{\underline{C}}\cdots(\nabla\nabla\underline{\upsilon})}$$

${}^4\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{E}}\,\underline{\underline{\mathcal{A}}} + {}^4\underline{\underline{\mathrm{B}}}$

Критерий устойчивости

Ищем решение в виде волны $\underline{\upsilon} = \underline{\upsilon}_0 e^{i\omega t}e^{i\underline{K}\cdot\underline{R}}$

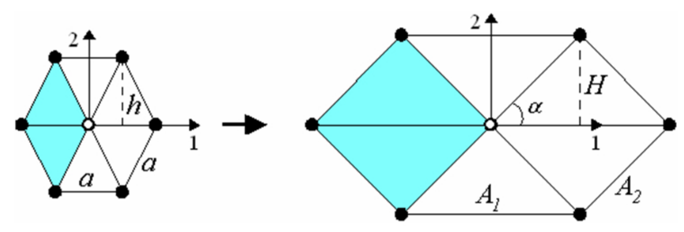
Уравнение имеет решение при $\boxed{\det\left[\underline{\underline{D}} - \Omega\underline{\underline{E}}\right] = 0}$

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

Решение устойчиво для любого $\underline{K} \in \mathbb{R}^3$ при

$$\boxed{\Omega > 0}$$

2D треугольная решетка



$\det\left[\underline{\underline{D}} - \Omega\underline{\underline{E}}\right] = 0 \Longrightarrow \Omega^2 - \Omega\,\mathrm{tr}\,\underline{\underline{D}} + \det\underline{\underline{D}} = 0$

$$\Omega > 0 \Longrightarrow \begin{cases} \mathrm{tr}\,\underline{\underline{D}} > 0 \\ \det\underline{\underline{D}} > 0 \\ 2\,\mathrm{tr}\,\underline{\underline{D}}^2 \ge \mathrm{tr}^2\underline{\underline{D}} \end{cases}$$

автоматически

$T_{11}K_1^2 + T_{22}K_2^2 > 0$

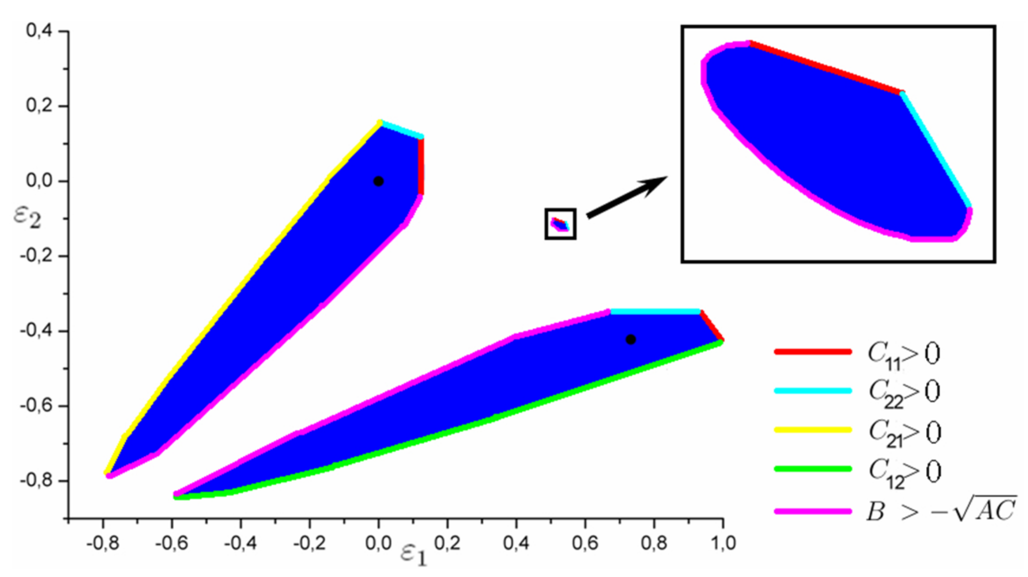
$AK_1^4 + 2BK_1^2K_2^2 + CK_2^4 > 0$

$T_{11} = C_{11} + C_{21} \qquad T_{22} = C_{12} + C_{22}$

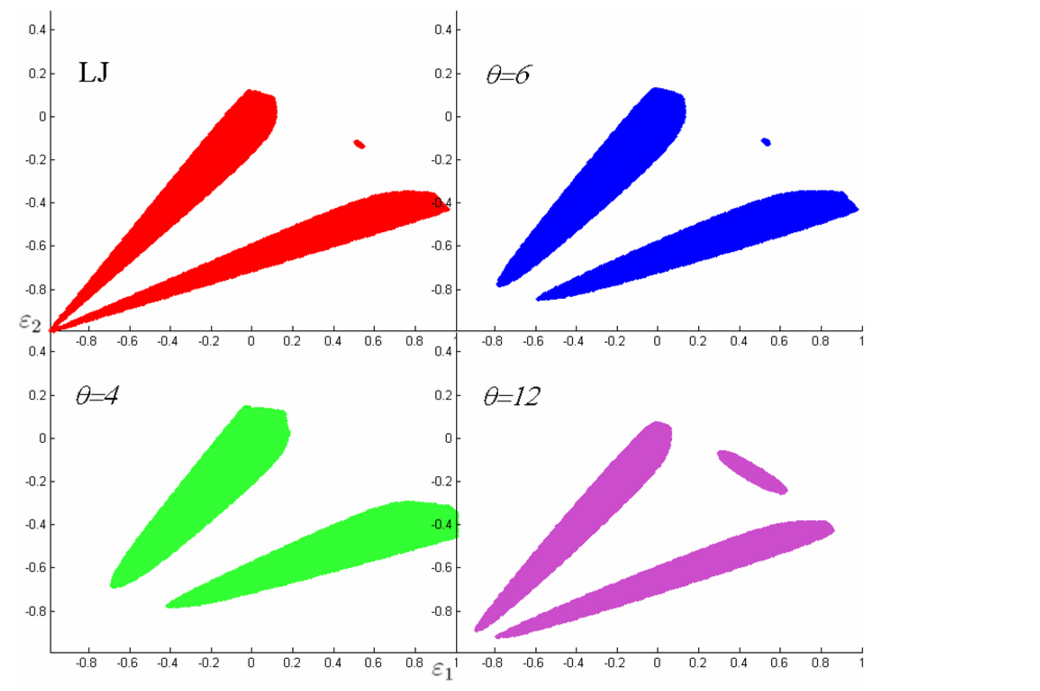
$A = C_{11}C_{21} \qquad C = C_{12}C_{22} \qquad 2B = C_{11}C_{22} + C_{12}C_{21} - 4C_{44}^2$

$$\boxed{T_{11} > 0 \quad T_{22} > 0 \quad A > 0 \quad C > 0 \quad B > -\sqrt{AC}}$$

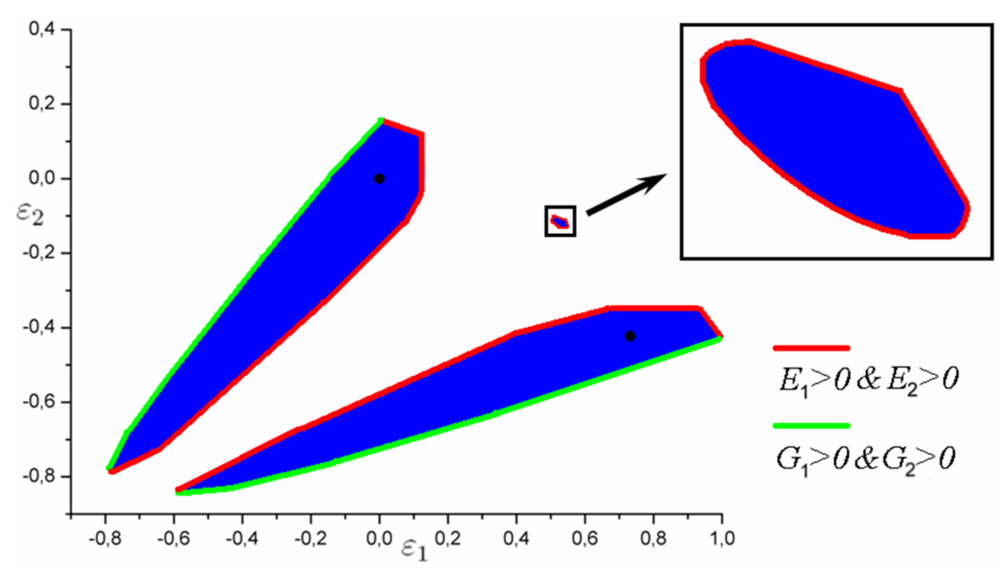
K_1, K_2 — компоненты волнового вектора



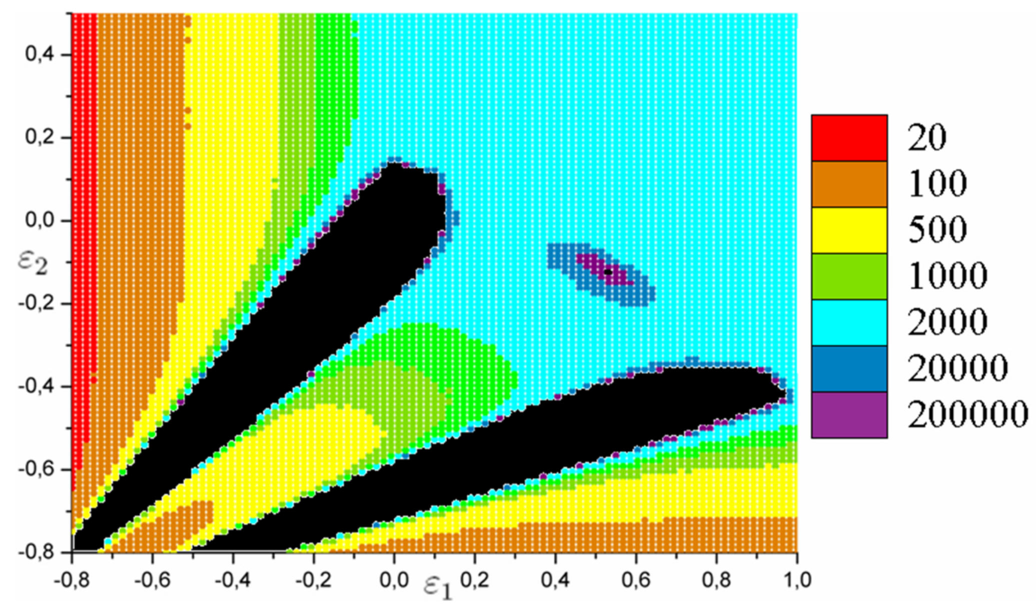
Форма и количество областей зависят от потенциала



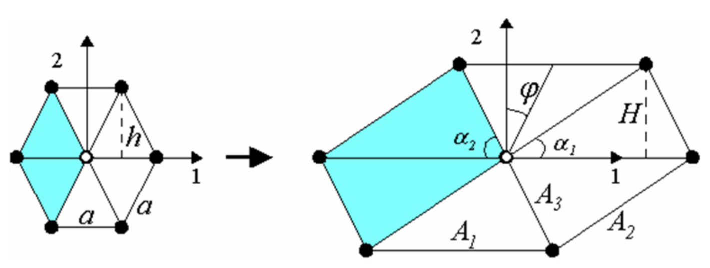
Границы областей также определяются положительностью модулей Юнга и сдвига



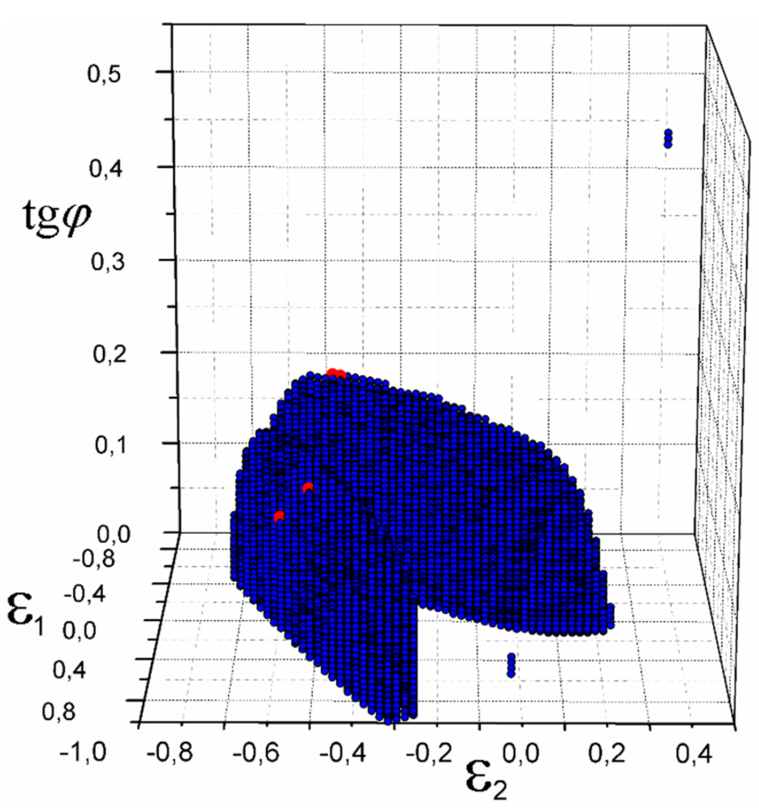
Результаты молекулярно-динамического моделирования
Количество шагов интегрирования до разрушения



2D треугольная решетка с учетом сдвига



$0 \le \varphi \le 30°$



3D ГЦК решетка

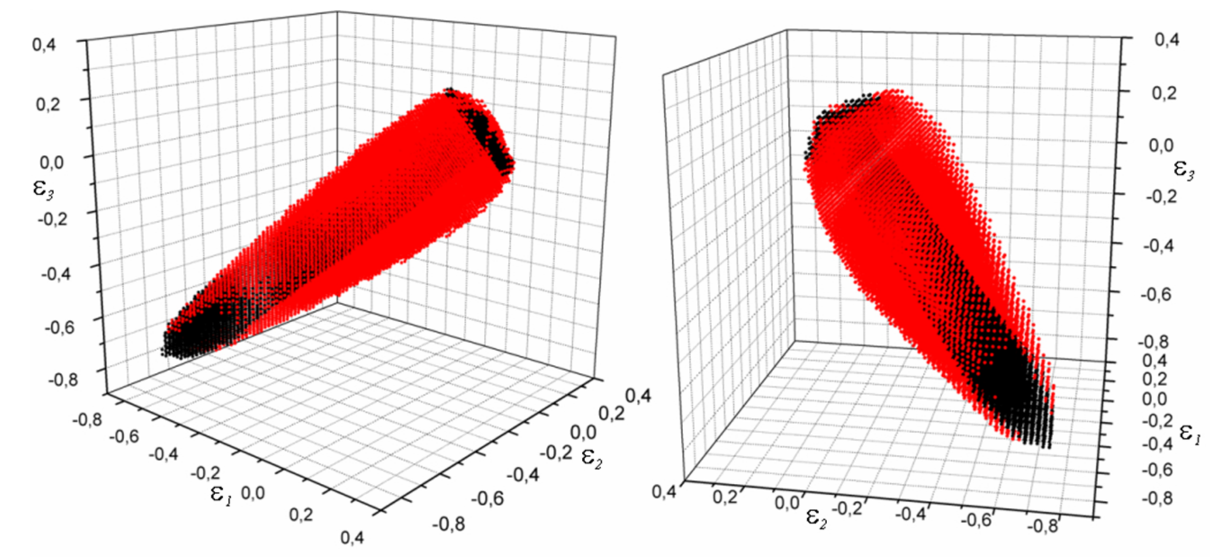
$\det\left[\underline{\underline{D}} - \Omega\underline{\underline{E}}\right] = 0 \Longrightarrow a\Omega^3 + b\Omega^2 + c\Omega + d = 0$

$a = 1 \quad b = -\mathrm{tr}\,\underline{\underline{D}} = -I_1$

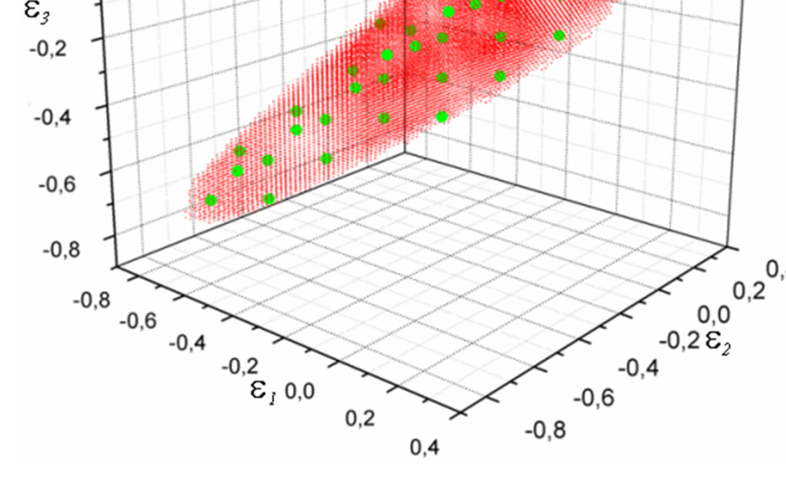
$c = \frac{1}{2}\left(\mathrm{tr}^2\underline{\underline{D}} - \mathrm{tr}\,\underline{\underline{D}}^2\right) = I_2$

$d = -\det\underline{\underline{D}} = -I_3$

$$\Longrightarrow \begin{cases} I_1 > 0 \\ I_2 > 0 \\ I_3 > 0 \\ I_1^{\,2} - 3I_2 \ge 0 \end{cases}$$



Результаты молекулярно-динамического моделирования



Направление дальнейших исследований

- Сдвиг в ГЦК решетке
- Фазовый переход ГЦК—ОЦК
- Моментное взаимодействие
- Диссипативные эффекты