

Выводы

Результаты расчетов показывают возможность экспериментального измерения термодиффузионного коэффициента для феррожидкости на основе керосина с размерами частиц порядка 10 нм. Разработанная методика позволяет распространить ее на другие коллоидные растворы

для частиц различных размеров с произвольной плавучестью.

Работа поддержана грантом РФФИ «Колебательные конвективные процессы в нано- и микрожидкостях в микрофлюидических системах: анализ и контроль» в рамках регионального конкурса инициативных проектов «Урал-а». Код проекта 13-01-96010.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. – М.: Наука, 1972. – 392 с.
2. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. – М.: Наука, 1974. – 712 с.
3. Gershuni G.Z., Lyubimov D.V. Thermal vibrational convection. – NY: Wiley&Sons, 1998. – 358 p.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики. Т. VI. Гидродинамика. – М.: Физматлит, 2001. – 736 с.
5. Розенцвейг Р. Феррогидродинамика. – М.: Мир, 1989. – 356 с.
6. Shliomis M.I., Smorodin B.L. Onset of convection in colloids stratified by gravity // Phys. Rev. E. – 2005. – V. 71. – P. 036312 (6).
7. Глухов А.Ф., Путин Г.Ф. Установление равновесного барометрического распределения частиц в магнитной жидкости // Сб.

- Гидродинамика. – Пермь: Изд-во Перм. ун-та, 1999. – Вып. 12. – С. 92–103.
8. Смородин Б.Л., Черепанов И.Н. Волновые режимы течения наножидкости в замкнутой полости // Вестн. Пермск. ун-та. Сер. Физика. – 2012. – Вып. 3 (21). – С. 1–5.
9. Самарский А.А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1989. – 616 с.
10. Тарунин Е.Л. Вычислительный эксперимент в задачах свободной конвекции. – Иркутск: Изд-во Иркут. ун-та, 1990. – 225 с.
11. Peterson E.A., Kruger D.A. Field induced agglomeration in magnetic colloids // J. Colloid and Interface Science. – 1977. – V. 62. – № 1. – P. 24–33.

Поступила 02.01.2013 г.

УДК 538.911, 539.32

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПОСОБ РАСЧЕТА УПРУГИХ МОДУЛЕЙ ОБРАЗЦОВ КОНЕЧНЫХ РАЗМЕРОВ С ГПУ-РЕШЕТКОЙ

И.Ю. Зубко, М.В. Симонов

Пермский национальный исследовательский политехнический университет
E-mail: zoubko@pstu.ru

На основе разработанного ранее алгоритма теоретического исследования упругих свойств металлических микро- и нано-монокристаллов с кубическими решетками [1, 2] вычисляются упругие модули образцов конечных размеров с гексагональной плотноупакованной решеткой. Форма образца согласована с симметрией решетки [3]. В качестве потенциала выбирается степенной потенциал Ми. Для исследования упругих свойств используется подход атомарной статики. Задается вид деформационного градиента и определяется текущая конфигурация кристалла. Для расчета упругих модулей в текущей конфигурации кристалла вычисляется полная потенциальная энергия образца, отнесенная к его объему. Приравнивая квадратичные слагаемые в ее разложении в степенной ряд по параметрам деформирования упругому потенциалу, определяются упругие модули образца. Показано, что гексагональная плотноупакованная решетка, состоящая из двух простых подрешеток, не может при заданной аффинной кинематике деформироваться однородно. Для обеспечения минимума потенциальной энергии гексагонального плотноупакованного кристалла в текущей конфигурации необходимо задавать относительное смещение подрешеток, зависящее от параметров деформирования. Получено, что упругие модули гексагонального плотноупакованного кристалла зависят от размеров образца. Эта зависимость имеет горизонтальную асимптоту, соответствующую макроскопическому монокристаллическому телу с известными упругими свойствами, что позволяет провести идентификацию параметров потенциала взаимодействия атомов. Все вычисления в работе выполнены в символьном виде с помощью пакета Wolfram Research «Mathematica».

Ключевые слова:

ГПУ-решетка, микро- и нанокристаллы, вычисление упругих модулей, идентификация параметров потенциала взаимодействия атомов, зависимость механических свойств от размеров тела.

Key words:

HCP-lattice, micro- and nanocrystals, elastic module computation, identification of interatomic potential parameters, dependence of mechanical properties on specimen size.

Аффинное деформирование ГПУ-монокристалла

Для металлов наряду с гранецентрированной (ГЦК) и объемцентрированной кубической (ОЦК) кристаллической решеткой одним из наиболее

распространенных типов является гексагональная плотноупакованная (ГПУ) решетка [4]. Такое строение имеют титан, цинк, цирконий, бериллий, магний и ряд других металлов. Используя изобра-

жение решеток в виде набора шаров, можно представить, что ГПУ-решетка обладает двухслойной периодичностью, последовательность ее слоев по вертикали записывают в виде ...АВАВАВ..., причем слои, условно обозначаемые как А и В, соответствуют наиболее плотному периодическому расположению шаров на плоскости (их центры лежат в узлах периодической сетки из правильных треугольников). Структуры этих слоев не отличаются, но один слой в ГПУ-решетке сдвинут относительно другого так, что атомы слоя А расположены напротив центров пустот слоя В (рис. 1, б, в). Для ГПУ-решетки выделяют две простые подрешетки, они являются объединением слоев атомов типа А или В. ГПУ-решетка в отличие от ГЦК или ОЦК-решетки характеризуется не одним, а двумя межатомными расстояниями. Переменная a используется для обозначения равновесного расстояния между атомами одного слоя, а переменная b – для обозначения равновесного расстояния между одноименными слоями (удвоенное расстояние между слоями А и В).

При исследовании механических свойств образца с ГПУ-решеткой конечных размеров для исключения влияния на результат наложения классов симметрий образца и решетки рассматривается тело, имеющее оси симметрии такого же порядка, что и сама кристаллическая решетка. Для ГПУ-решетки в работе [3] обоснован выбор формы образца в виде прямоугольной призмы с правильным треугольником в основании (рис. 1). В этом случае все боковые грани содержат одинаковое количество атомов.

При вычислении упругих модулей ГПУ-кристалла для него определяются отсчетная и текущая конфигурация, связь между которыми задается аффинором (деформационный градиент в механике сплошных сред). Принимается, что в обеих конфигурациях структура решетки строго задана и расстояние между соседними атомами любой из подрешеток не меняется по образцу. Отсчетная конфигурация кристалла определяется только

значениями параметров a и b , соответствующих минимуму (по двум переменным a и b) удельной потенциальной энергии Φ образца:

$$\Phi \rightarrow \min_{a,b}, \Phi = \sum_{k>j} \sum_j \varphi(\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j) / \text{Mes}(V),$$

$$\mathbf{R}_k, \mathbf{R}_j \in V, \text{Mes}(V) = \sqrt{3} a^2 b N^3 / 4,$$

где $\varphi(\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j)$ – потенциальная энергия взаимодействия пары атомов с радиус-векторами \mathbf{R}_k и \mathbf{R}_j ; V – область, занимаемая исходным образцом; $\text{Mes}(V)$ – ее объем. Поскольку в определении используется потенциальная энергия системы, то равновесные расстояния связаны с параметрами выбранного межатомного потенциала. Для моделирования взаимодействия атомов в металлах с ГПУ-строением выбирается степенной потенциал Леннарда-Джонсовского типа, описывающий для двух атомов свойство отталкиваться на малых и притягиваться на больших расстояниях и содержащий два слагаемых степенного вида с противоположными знаками. Показатели степени (крутизна соответствующих кривых) в этих слагаемых описывают убывание взаимодействия с расстоянием. Такой потенциал называется потенциалом Ми [5, 6]:

$$\varphi(\mathbf{x}) = \beta (n(\alpha/|\mathbf{x}|)^m - m(\alpha/|\mathbf{x}|)^n) / (m - n), \quad m, n \in \mathbb{Z}, \quad (1)$$

где \mathbf{x} – вектор, соединяющий два атома; α – равновесное расстояние для пары атомов; β – энергия, соответствующая глубине потенциальной ямы взаимодействия двух атомов. Для потенциала Леннарда-Джонса $m=12, n=6$.

В работе [3] с помощью силового подхода получены представления параметров ГПУ-решетки a и b через параметр α для различных значений показателей степени m и n потенциала Ми. Показано, что любой паре значений показателей степени m и n в потенциале Ми соответствует определенное отношение параметров кристаллической ГПУ-решетки b/a . При использовании энергетического подхода идентификация параметров потенциала дает иной результат. Например, равновесные параметры решетки магния суть $a^{\text{Мг}}=3,208 \cdot 10^{-4}$ (мкм),

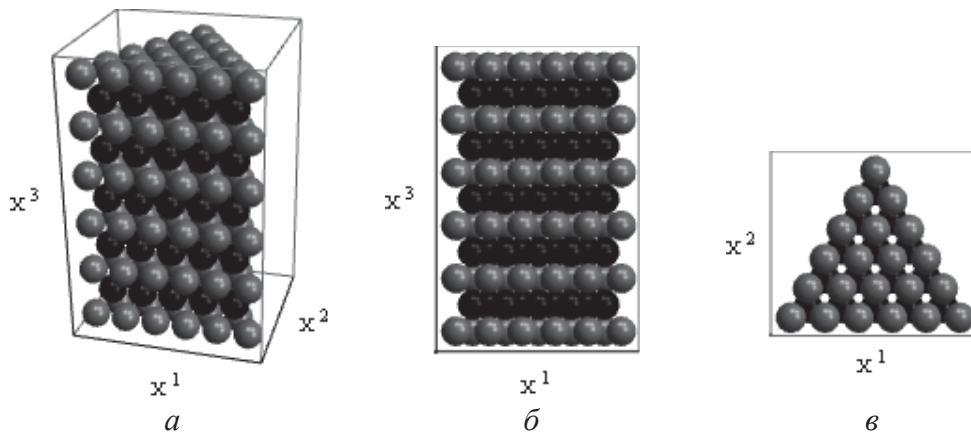


Рис. 1. Образец с ГПУ-решеткой, атомы слоя А изображены серым цветом, атомы слоя В – черным цветом: а) общий вид; б) вид спереди; в) вид сверху

$b^{Mg}=7,610 \cdot 10^{-4}$ (мкм), их отношение равно $b^{Mg}/a^{Mg}=1,6240$. Им соответствуют параметры потенциала Ми $m=12, n=4, \alpha=3,64 \cdot 10^{-4}$ (мкм). Расчеты с этими значениями дают $b^{\circ}/a^{\circ}=1,6245$ (отклонение 0,03 %), $a^{\circ}=0,8823\alpha, b^{\circ}=1,4333\alpha$. Потенциал Леннард-Джонса позволяет получить отношение $b^{\circ}/a^{\circ}=1,6314$ ($a^{\circ}=0,9422\alpha, b^{\circ}=1,5370\alpha$), ближе всех из металлов с ГПУ-решеткой к которому стоит кобальт $b^{Co}/a^{Co}=1,6329$.

Текущая конфигурация кристалла получается в результате действия на его отсчетную конфигурацию аффинора \mathbf{F} , в результате чего радиус-вектор \mathbf{R}_i каждого атома из отсчетной конфигурации переходит в радиус-вектор $\mathbf{r}_i=\mathbf{F} \cdot \mathbf{R}_i$ текущей конфигурации. При исследовании упругих свойств образца рассматриваются чистое растяжение-сжатие вдоль произвольной оси $l, \mathbf{F}=\mathbf{E}+(\lambda-1)\mathbf{U}$, где l – единичный вектор; λ – кратность удлинения; \mathbf{E} – единичный тензор второго ранга, или простой сдвиг в плоскости с нормалью \mathbf{n} в направлении $\mathbf{b} \mathbf{F}=\mathbf{E}+\gamma\mathbf{bn}$, где γ – интенсивность сдвига. Элементарный объем dV меняется как $dV=JdV$, где $J=\det\mathbf{F}$.

Тензор напряжений Коши σ , определенный в текущей конфигурации, при упругом деформировании металлов (являющимся малым) связан с линейным тензором малых деформаций $\boldsymbol{\varepsilon}=(\mathbf{F}+\mathbf{F}^T)/2-\mathbf{E}$, обобщенным законом Гука

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (2)$$

где тензор четвертого ранга \mathbf{C} – тензор линейно-упругих свойств материала. В силу симметрии $\boldsymbol{\varepsilon}$ и $\boldsymbol{\sigma}$ тензор \mathbf{C} симметричен относительно перестановок внутри первой и последней пар индексов $C_{ijkl}=C_{jikl}=C_{ijlk}$, и закон Гука (2) можно представить в виде

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : (\mathbf{F} - \mathbf{E}). \quad (3)$$

Плотность внутренней энергии (упругий потенциал) для линейно-упругой среды

$$u = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\mathbf{F} - \mathbf{E}) : \mathbf{C} : (\mathbf{F} - \mathbf{E})$$

из термодинамических соображений представляет собой положительно определенную квадратичную форму, то есть $u > 0$ при любых $\boldsymbol{\varepsilon} \neq 0$ и $u = 0$ только при нулевых деформациях $\boldsymbol{\varepsilon} = 0$. Отсюда следует дополнительная симметрия компонент тензора \mathbf{C} относительно перестановки первой и последней пар индексов $C_{ijkl}=C_{klij}$.

Симметрия тензора напряжений Коши следует из уравнения баланса момента количества движения для неполярных сред. В экспериментах с макрообразцами металлов несимметрии тензора напряжений Коши не обнаружено. Но для объектов наноразмера утверждение о симметрии тензора $\boldsymbol{\sigma}$ экспериментально не обосновано и не опровергнуто. Если в качестве исходной формы обобщенного закона Гука принять соотношение (3), в правой части которого фигурирует несимметричный тензор дисторсии $\boldsymbol{\beta}=\mathbf{F}-\mathbf{E}$, появляется возможность исследовать вероятные несимметричные упругие свойства кристаллов наноразмеров. При этом не предполагается априорной симметрии тензора напряжений Коши, то есть согласно структуре соотношения (3) из него не следует симметрия внутри пар индексов компонент тензора линейно-упругих модулей, в общем случае будем рассматривать $C_{ijkl} \approx C_{jikl} \approx C_{ijlk}$.

При разложении тензора дисторсии $\boldsymbol{\beta}$ на сумму $\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\varepsilon}+\boldsymbol{\omega}$ симметричной $\boldsymbol{\varepsilon}$ и кососимметричной $\boldsymbol{\omega}$ частей, из (3) следует равенство $\boldsymbol{\sigma}=\mathbf{C}:\boldsymbol{\varepsilon}+\mathbf{C}:\boldsymbol{\omega}$. В тензоре четвертого ранга \mathbf{C} можно выделить полусимметричную часть $\mathbf{C}^{(s,s)}$, для которой выполняются условия симметрии в парах индексов $C_{ijkl}^{(s,s)}=C_{jikl}^{(s,s)}=C_{ijlk}^{(s,s)}$, «полуантисимметричную» часть $\mathbf{C}^{(a,a)}$, для которой справедливо $C_{ijkl}^{(a,a)}=-C_{jikl}^{(a,a)}=-C_{ijlk}^{(a,a)}$, и две смешанные части $\mathbf{C}^{(s,a)}$ и $\mathbf{C}^{(a,s)}$, для которых принимается $C_{ijkl}^{(s,a)}=C_{jikl}^{(s,a)}=-C_{ijlk}^{(s,a)}$, $C_{ijkl}^{(a,s)}=-C_{jikl}^{(a,s)}=C_{ijlk}^{(a,s)}$. Подставляя $\mathbf{C}=\mathbf{C}^{(s,s)}+\mathbf{C}^{(s,a)}+\mathbf{C}^{(a,s)}+\mathbf{C}^{(a,a)}$ в закон (3), получим:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}^{(s,s)} : \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{C}^{(a,s)} : \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{C}^{(s,a)} : \boldsymbol{\omega} + \mathbf{C}^{(a,a)} : \boldsymbol{\omega},$$

следовательно, несимметричный тензор напряжений разделяется на симметричную $\boldsymbol{\sigma}^{(s)}=\mathbf{C}^{(s,s)}:\boldsymbol{\varepsilon}+\mathbf{C}^{(s,a)}:\boldsymbol{\omega}$ и антисимметричную части $\boldsymbol{\sigma}^{(a)}=\mathbf{C}^{(a,s)}:\boldsymbol{\varepsilon}+\mathbf{C}^{(a,a)}:\boldsymbol{\omega}$. Упругая энергия в «несимметричном случае» представляется в виде

$$u = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C}^{(s,s)} : \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega} : \mathbf{C}^{(a,a)} : \boldsymbol{\omega}. \quad (4)$$

Симметрия по парам индексов здесь учтена в виде $\boldsymbol{\varepsilon}:\mathbf{C}^{(s,a)}:\boldsymbol{\omega}=\boldsymbol{\omega}:\mathbf{C}^{(a,s)}:\boldsymbol{\varepsilon}=0$. Из представления (4) следует, что тензоры $\mathbf{C}^{(s,s)}$ и $\mathbf{C}^{(a,a)}$, составляющие тензор линейно-упругих свойств \mathbf{C} , являются положительно определенными. Сумма тензоров $\mathbf{C}^{(s,a)}$ и $\mathbf{C}^{(a,s)}$ также является положительно определенной.

Кососимметричная часть дисторсии $\boldsymbol{\omega}$ при малых деформациях, характерных для упругого отклика металлов, описывает поворот образца как жесткого тела. Для определения соответствующих компонент тензора линейно-упругих свойств $\mathbf{C}^{(s,a)}$, $\mathbf{C}^{(a,s)}$ и $\mathbf{C}^{(a,a)}$ необходимо, чтобы возникла реакция образца на задаваемый тензором $\boldsymbol{\omega}$ поворот. Она возможна только при наличии связи между атомами образца и некоторого его окружения, например, такая ситуация может реализоваться в поликристалле при повороте некоторого зерна относительно своих соседей. Таким образом, для монокристалла могут быть определены упругие модули, входящие в тензор $\mathbf{C}^{(s,s)}$, а модули $\mathbf{C}^{(a,a)}$, $\mathbf{C}^{(s,a)}$ и $\mathbf{C}^{(a,s)}$ отражают взаимодействия зерен в поликристалле и зависят от различия во взаимной ориентации и относительного расположения зерен.

Строение несимметричного тензора упругих свойств ГПУ-монокристалла

При наложении ортогонального преобразования (например, поворота образца) компонент тензора \mathbf{C} преобразуются по закону $\mathbf{C}^*=\mathbf{C}_{ijk}(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}^i)(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}^j)(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}^k)(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{e}^l)$, где \mathbf{Q} – собственно ортогональный тензор. Если преобразование \mathbf{Q} принадлежит группе L_C симметрии тензора линейно упругих свойств, то справедливо равенство $\mathbf{C}^*=\mathbf{C}$. Это условие дает систему дополнительных ограничений на компоненты тензора \mathbf{C} :

$$C_{mnpq} = C_{ijkl} Q_m^i Q_n^j Q_p^k Q_q^l, \quad i, j, k, l = \overline{1,3}. \quad (5)$$

В работе [7] установлен изоморфизм 21-мерного пространства упругих модулей для 3-мерной среды и эрмитова пространства той же размерности для симметричного тензора C . Введенные в [7] соотношения позволяют проводить анализ его строения для различных классов симметрии материала. Например, для ГПУ-монокристалла получено 5 независимых ненулевых компонент

$$C_{1111}, C_{1122}, C_{1133}, C_{2323}, C_{3333}. \quad (6)$$

Для несимметричного тензора C требуется проводить отдельное исследование.

В качестве осей координат выберем оси, связанные с кристаллической решеткой, как показано на рис. 1. Базисные векторы, соответствующие этим осям, будем обозначать как e_i , $i=1,3$. Тогда группа симметрии L_C будет содержать помимо тождественного преобразования E и инверсии $-E$ преобразования поворота $Q_{e_3}^{2\pi/3}$ вокруг оси e_3 на угол $2\pi/3$ и преобразования зеркальной симметрии R_1 и R_3 относительно плоскостей с нормальными e_1 , e_3 . Анализ системы (5) с тензорами $Q_{e_3}^{2\pi/3}$, R_1 и R_3 с учетом симметрии по парам индексов дает 8 ненулевых независимых компонент:

$$C_{1111}, C_{1122}, C_{1133}, C_{2323}, C_{2332}, C_{3232}, C_{3333}. \quad (7)$$

Наложение условия симметрии внутри пар индексов приводит к обычному набору (6) компонент полусимметричного тензора линейно-упругих свойств, полученному в [7].

Постановка численных экспериментов для определения упругих модулей

При наложении на образец заданной аффинной деформации с помощью (1) вычисляется потенциальная энергия исследуемого образца с ГПУ-решеткой. Упругая энергия материала сопоставляется с вычисленной потенциальной энергией ГПУ-образца. В опыте на трехосное растяжение-сжатие вдоль выбранных координатных осей (рис. 1) с кратностями удлинения λ_i , $i=1,3$ упругая энергия принимает вид:

$$u = \frac{1}{2} C_{1111} (\lambda_1 - 1)^2 + \frac{1}{2} C_{1111} (\lambda_2 - 1)^2 + C_{1122} (\lambda_1 - 1)(\lambda_2 - 1) + \frac{1}{2} C_{3333} (\lambda_3 - 1)^2 + C_{1133} (\lambda_1 - 1)(\lambda_3 - 1) + C_{1133} (\lambda_2 - 1)(\lambda_3 - 1). \quad (8)$$

Причем

$$C_{1111} > 0, C_{3333} > 0, C_{1111} + C_{1122} > 0, C_{1111} + C_{3333} + 2C_{1133} > 0.$$

При простом сдвиге, для которого $\beta_{12}=\gamma$ (остальные компоненты $\beta_{ij}=0$), и при простом сдвиге, для которого $\beta_{21}=\gamma$ (остальные $\beta_{ij}=0$), упругая энергия одинакова:

$$u = \frac{1}{2} (C_{1111} - C_{1122} - C_{1212}) \gamma^2, \quad C_{1111} - C_{1122} - C_{1212} > 0. \quad (9)$$

В серии опытов на простой сдвиг образца, в которых одна из следующих компонент тензора дисторсии отлична от нуля: $\beta_{13}=\gamma$ или $\beta_{31}=\gamma$, или $\beta_{23}=\gamma$, или $\beta_{32}=\gamma$, а остальные равны нулю $\beta_{ij}=0$, выражения для упругой энергии также совпадают:

$$u = \frac{1}{2} C_{2332} \gamma^2, \quad C_{2332} > 0. \quad (10)$$

Таким образом, с использованием энергетического подхода можно определить только 6 упругих модулей $-C_{1111}, C_{1122}, C_{1133}, C_{1212}, C_{2332}, C_{3333}$. Для симметричного случая справедливо соотношение $C_{1212}=(C_{1111}-C_{1122})/2$ [7], которое может быть проверено для ГПУ-монокристалла конечного размера с помощью прямого расчета.

Возникновение несимметрии упругого отклика в виде $C_{1212} \approx (C_{1111} - C_{1122})/2$ может проявиться только при деформировании, содержащем сдвиги в плоскости $x'Ox^2$. Если происходит простой сдвиг с компонентами дисторсии $\beta_{12}=\gamma$, остальные $\beta_{ij}=0$, или простой сдвиг, в котором $\beta_{21}=\gamma$, остальные компоненты $\beta_{ij}=0$, то из (3) и (7):

$$\begin{cases} \sigma_{12} = (C_{1111} - C_{1122} - C_{1212}) \gamma, \\ \sigma_{21} = C_{1212} \gamma \end{cases}$$

или

$$\begin{cases} \sigma_{12} = C_{1212} \gamma, \\ \sigma_{21} = (C_{1111} - C_{1122} - C_{1212}) \gamma, \end{cases}$$

остальные компоненты равны нулю. При простом сдвиге влияние «несимметричных» компонент тензора упругих модулей приводит к появлению кососимметричной части тензора напряжений $\sigma^{(s)}$.

Ее аксиальный вектор $\sigma_x = \frac{1}{2} \epsilon : \sigma^{(s)}$ в этих двух случаях равен

$$\sigma_x = \{0; 0; \frac{1}{2} (C_{1111} - C_{1122} - 2C_{1212}) \gamma\}$$

или

$$\sigma_x = \{0; 0; -\frac{1}{2} (C_{1111} - C_{1122} - 2C_{1212}) \gamma\}.$$

То есть при $C_{1111} - C_{1122} - 2C_{1212} > 0$ в качестве реакции образца на простой сдвиг может возникнуть момент, стремящийся повернуть образец в направлении, противоположном сдвигу. Для симметричной части тензора напряжений $\sigma^{(s)}$ в обоих случаях справедливо $\sigma_{12}^{(s)} = \sigma_{21}^{(s)} = 1/2 (C_{1111} - C_{1122}) \gamma$, остальные $\sigma_{ij}^{(s)} = 0$, что соответствует закону Гука (2).

Вычислительный эксперимент с помощью подхода атомарной статики

Для теоретического исследования физических свойств конденсированных сред на микро- и наноровнях нередко применяется дискретный подход, основанный на прямом моделировании движения частиц, вызванного их взаимодействием и приложенными внешними воздействиями. Наиболее распространенным является метод молекулярной динамики (МД), при использовании которого для каждой частицы (атома или молекулы) численно решаются уравнения движения (уравнения баланса количества движения и момента количества движения), содержащие силы и моменты взаимодействия выбранной частицы со всеми остальными частицами тела или с частицами из некоторой ее окрестности [5, 6, 8]. Силы взаимодействия частиц вводятся с помощью потенциалов межатомного взаимодействия. Получаемые количественные ре-

зультаты зависят от заранее заданных числовых значений параметров потенциалов.

В данной статье применяется подход, основанный на методе атомарной статистики. В основе подхода лежит рассмотрение статистики взаимодействующих частиц при явном задании структуры кристаллической решетки. Для проведения расчетов используется потенциал Ми (1). Применение статической постановки и точного задания положений атомов в кристаллической решетке позволяет получить аналитическое решение задачи по определению упругих свойств образца конечного размера для произвольных значений параметров потенциала, рассматриваемых как переменные исследуемых функций (упругих модулей). Точные выражения для упругих модулей получаются для объемов материала с небольшим числом атомов N на ребре образца (от 3 до 20). Для получения макроскопических значений параметров по этим точным решениям делается предельный переход $N \rightarrow \infty$. Это позволяет идентифицировать параметры потенциала.

При действии аффинора на отсчетную конфигурацию кристалла, задаваемую параметрами решетки a и b , слои А и В ГПУ-образца деформируются одновременно, что приводит к нарушению симметрии расположения атомов типа В в лунках между атомами типа А (рис. 2, а). Нарушение однородности расположения атомов решетки при наложении общей однородной деформации кристалла более детально показано для отдельного треугольника, образованного атомами типа А, в лунке между которыми расположен атом типа В. Положение C' атома типа В после такого деформирования (полупрозрачный шар на рис. 2, в) не соответствует центру C'' описанной окружности треугольника из атомов типа А. Новый центр C''' определяется геометрически (черный шар на рис. 2, в). Тогда при растяжении в плоскости x^1Ox^2 дополнительное смещение атома типа В относительно атомов типа А, зависящее от кратностей удлинения λ_1 и λ_2 , приводит к уменьшению потенциальной энергии системы атомов:

$$C'C'' = |\Delta x^2| = a|\lambda_1^2 - \lambda_2^2|/4\sqrt{3}\lambda_2. \quad (11)$$

Следовательно, решетка ГПУ-кристалла, состоящая из двух простых подрешеток типа А и В, при заданной аффинной кинематике (предписанном деформационном градиенте) не всегда может деформироваться однородно.

При растяжении-сжатии вдоль оси Ox_3 однородность ГПУ-решетки не нарушается и дополнительного смещения слоев В относительно слоев А не требуется. Полученное точное решение (11) для смещения центрального атома в треугольнике может не обеспечивать минимум потенциальной энергии для более сложной системы атомов ГПУ-монокристалла. Две ненулевые компоненты взаимного смещения слоев ГПУ-кристалла в плоскости x^1Ox^2 являются двумя дополнительными степенями свободы кристаллической решетки при де-

формировании кристалла. Поиск этих (малых) смещений для ГПУ-кристалла рассматриваемой формы проводится с помощью разложения в степенной ряд полной потенциальной энергии образца Φ по искомым параметрам с точностью до членов второй степени. Для этого в текущей конфигурации атомам типа А предписывается смещение $\{\delta_1 a; \delta_2 a; 0\}$, а атомам типа В – смещение $\{-\delta_1 a; -\delta_2 a; 0\}$ с произвольными δ_1, δ_2 . При деформации растяжения-сжатия вдоль осей $Ox^i, i=1,3$ зеркальная симметрия кристалла относительно плоскости x^2Ox^3 не нарушается и смещение $\delta_1=0$, определения требует только параметр δ_2 . Положения атомов $\hat{\mathbf{r}}_i^{(A)}$ и $\hat{\mathbf{r}}_i^{(B)}$ слоев А и В соответственно в текущей конфигурации находятся как

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}}_i^{(A)} &= \mathbf{r}_i^{(A)} + \{0; \delta_2 a; 0\} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{R}_i^{(A)} + \{0; \delta_2 a; 0\}, \\ \hat{\mathbf{r}}_i^{(B)} &= \mathbf{r}_i^{(B)} - \{0; \delta_2 a; 0\} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{R}_i^{(B)} - \{0; \delta_2 a; 0\}. \end{aligned}$$

Для заданного размера образца при известных из [3] значениях равновесных параметров ГПУ-решетки a, b и произвольных параметрах $\alpha, \beta, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ и δ_2 находится выражение для полной потенциальной энергии образца. Это выражение раскладывается в степенной ряд по кратностям удлинения $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ в окрестности $\lambda_i=1$ и по смещению δ_2 в окрестности $\delta_2=0$. В этом ряду берутся только члены, линейные по малым λ_i-1 , и члены до второй степени включительно по δ_2 . Минимум получаемой квадратичной функции по δ_2 определяется как вершина параболы. В результате смещение δ_2 выражается как функция только от параметров λ_1 и λ_2 . В частности, для образца с $N=6$ атомами потенциал Леннард-Джонса дает функцию

$$\delta_2 \approx 0,1817(\lambda_1 - \lambda_2),$$

причем при равных кратностях удлинения $\lambda_1=\lambda_2$ (всестороннее расширение в плоскости x^1Ox^2) дополнительное смещение, как и следовало ожидать, равно нулю. При увеличении числа атомов на ребре образца коэффициенты при $\lambda_1-\lambda_2$ возрастают и образуют сходящуюся числовую последовательность. В пределе при числе атомов на ребре $N \rightarrow \infty$, соответствующем макроуровню, получается зависимость

$$\delta_2^\infty \approx 0,1994(\lambda_1 - \lambda_2).$$

При учете малости отклонения кратностей удлинения от 1 из (11) следует соотношение, которое отличается от полученной оценки для всего образца:

$$\delta_2 = |\Delta x^2|/2a \approx (\lambda_1 - \lambda_2)/4\sqrt{3} \approx 0,1444(\lambda_1 - \lambda_2).$$

При наложении аффинной кинематики вычисляется потенциальная энергия

$$\begin{aligned} \hat{\Phi} &= \sum_{k \neq j} \sum_j \varphi(\hat{\mathbf{r}}_k - \hat{\mathbf{r}}_j) / \text{Mes}(\hat{V}), \\ \hat{\mathbf{r}}_k, \hat{\mathbf{r}}_j &\in \hat{V}, \quad \text{Mes}(\hat{V}) = J \text{Mes}(V) \end{aligned}$$

деформированного ГПУ-образца, деленная на объем деформированного образца \hat{V} , раскладывается в степенной ряд по параметрам деформирова-

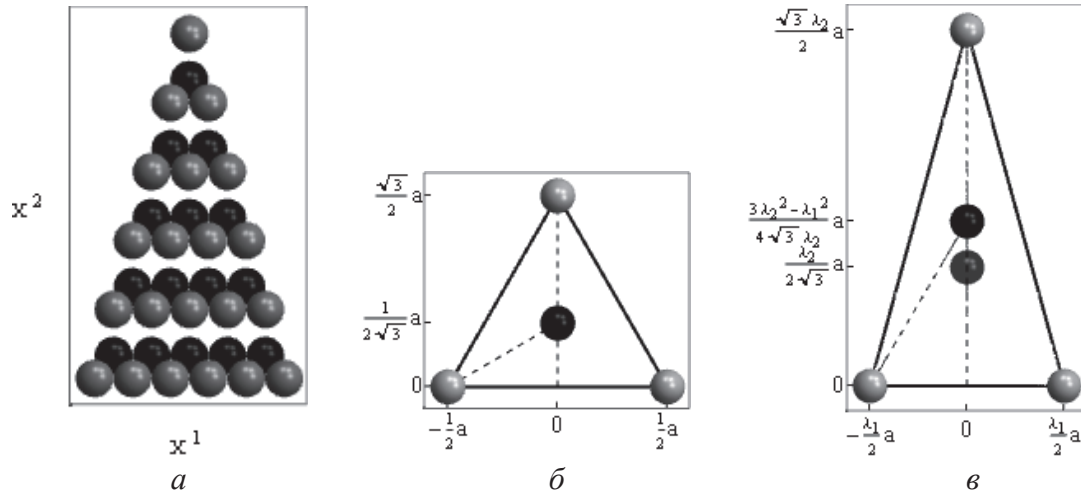


Рис. 2. Неоднородная структура при растяжении ГПУ-решетки в плоскости $x'Ox^2$ ($\lambda_2 > \lambda_1$): а) слои А и В; б) «элементарный треугольник» атомов до деформации (шары уменьшены); в) «элементарный треугольник» после деформации, полупрозрачный шар соответствует положению атома типа В без дополнительного смещения (11)

ния при сохранении членов до второй степени включительно. Линейные слагаемые в этом разложении оказываются нулевыми. Квадратичные слагаемые приравняются соответствующему упругому потенциалу (8)–(10). В частности, для образца с $N=6$ атомами на ребре при трехосном растяжении-сжатии образца с использованием потенциала Леннард-Джонса потенциальная энергия (учитывалось, что $\bar{V} = \sqrt{3} a^2 b N^3 \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 / 4$) равна

$$u - u_0 \approx (97,7144(\lambda_1 - 1)^2 + 92,0764(\lambda_1 - 1)(\lambda_2 - 1) + 97,7144(\lambda_2 - 1)^2 + 67,9871(\lambda_1 - 1)(\lambda_3 - 1) + 67,9871(\lambda_2 - 1)(\lambda_3 - 1) + 118,4084(\lambda_3 - 1)^2) \beta / \alpha^3,$$

где u_0 – потенциальная энергия в недеформированном состоянии. Сопоставляя $u - u_0$ с (8), получим значения упругих модулей для ГПУ-образца с $N=6$ атомами на ребре:

$$C_{1111} = 195,43 \beta / \alpha^3, \quad C_{1122} = 92,08 \beta / \alpha^3, \\ C_{1122} = 92,08 \beta / \alpha^3, \quad C_{3333} = 236,82 \beta / \alpha^3.$$

При реализации простого сдвига, при котором $\beta_{12} = \gamma$ (остальные компоненты $\beta_{ij} = 0$), и при простом сдвиге, при котором $\beta_{21} = \gamma$ (остальные компоненты $\beta_{ij} = 0$), для ГПУ-образца при $N=6$ атомах найдены дополнительные смещения $\delta_1 = 0,1893\gamma$, $\delta_2 = 0$. Выражения для упругой энергии, полученные в этих опытах, совпадают:

$$u - u_0 \approx 25,84 \gamma^2 \beta / \alpha^3 = \frac{1}{2} (C_{1111} - C_{1122} - C_{1212}) \gamma^2,$$

следовательно,

$$C_{1111} - C_{1122} - C_{1212} = 51,68 \beta / \alpha^3$$

и

$$C_{1212} = 51,68 \beta / \alpha^3 = \frac{1}{2} (C_{1111} - C_{1122}).$$

В опытах на простой сдвиг, в которых одна из следующих компонент тензора дисторсии ненулевая: $\beta_{13} = \gamma$ или $\beta_{31} = \gamma$, или $\beta_{23} = \gamma$, или $\beta_{32} = \gamma$, а остальные равны нулю $\beta_{ij} = 0$, для ГПУ-образца с $N=6$ атомами на

ребре дополнительные смещения слоев атомов, обеспечивающие минимум потенциальной энергии в деформированной конфигурации, оказываются нулевыми $\delta_1 = \delta_2 = 0$. При этом выражения для упругой энергии совпадают $u - u_0 \approx 25,97 \gamma^2 \beta / \alpha^3 = 1/2 C_{2332} \gamma^2$, следовательно, $C_{2332} = 51,93 \beta / \alpha^3$.

При повторении расчетов для различных N упругие модули образуют числовые последовательности, быстро сходящиеся с ростом размеров образца. В пределе $N \rightarrow \infty$ получены значения макроскопических упругих модулей для ГПУ-монокристалла

$$C_{1111}^\infty \approx 305,71 \beta / \alpha^3, \quad C_{1122}^\infty \approx 144,87 \beta / \alpha^3, \quad C_{1133}^\infty \approx 98,59 \beta / \alpha^3, \\ C_{3333}^\infty \approx 353,88 \beta / \alpha^3, \quad C_{1111}^\infty - C_{1122}^\infty - C_{1212}^\infty \approx 80,06 \beta / \alpha^3, \\ C_{2332}^\infty \approx 73,80 \beta / \alpha^3, \quad \text{то есть } C_{1212}^\infty \approx 80,77 \beta / \alpha^3.$$

В симметричном случае

$$C_{1212}^\infty = (C_{1111}^\infty - C_{1122}^\infty) / 2 \approx 80,42 \beta / \alpha^3 \quad (\text{отличие менее } 0,5 \%).$$

То есть расчеты части упругих модулей (7) с помощью потенциала Леннард-Джонса показали, что ГПУ-монокристалл обладает симметричными упругими свойствами.

При использовании потенциала Ми с параметрами, соответствующими магнию, получены следующие значения упругих модулей при $N=6$:

$$C_{1111} \approx 218,52 \beta / \alpha^3, \quad C_{1122} \approx 110,38 \beta / \alpha^3, \quad C_{1133} \approx 84,58 \beta / \alpha^3, \\ C_{1212} \approx 54,07 \beta / \alpha^3 = (C_{1111} - C_{1122}) / 2, \quad C_{2332} \approx 60,35 \beta / \alpha^3.$$

При $N \rightarrow \infty$ получены значения макроскопических упругих модулей ГПУ-кристалла:

$$C_{1111}^\infty \approx 521,90 \beta / \alpha^3, \quad C_{1122}^\infty \approx 262,49 \beta / \alpha^3, \\ C_{1133}^\infty \approx 175,34 \beta / \alpha^3, \quad C_{3333}^\infty \approx 603,14 \beta / \alpha^3, \\ C_{1212}^\infty \approx 129,95 \beta / \alpha^3 \approx (C_{1111}^\infty - C_{1122}^\infty) / 2 = 129,71 \beta / \alpha^3, \\ C_{2332}^\infty \approx 120,05 \beta / \alpha^3.$$

Из экспериментов для магния известны значения упругих модулей [9]:

$$C_{1111}^{\text{Mg}} = 59,76 \text{ (ГПа)}, \quad C_{1122}^{\text{Mg}} = 26,12 \text{ (ГПа)}, \quad C_{1133}^{\text{Mg}} = 21,63 \text{ (ГПа)}, \\ C_{2332}^{\text{Mg}} = 61,68 \text{ (ГПа)}, \quad C_{2323}^{\text{Mg}} = 16,34 \text{ (ГПа)},$$

по которым можно идентифицировать параметр β

потенциала Ми. Принимая, что $C_{1111}^{Mg} = C_{1111}^{\infty}$, получим $\beta = 4,2118 \cdot 10^{-10}$ (Дж), тогда $\beta/\alpha^3 = 0,1145$ (ГПа), то есть

$C_{1111}^{\infty} = 59,76$ (ГПа), $C_{1122}^{\infty} = 30,05$ (ГПа), $C_{1133}^{\infty} = 20,08$ (ГПа), $C_{3333}^{\infty} = 69,06$ (ГПа), $C_{2323}^{\infty} = 13,75$ (ГПа), $C_{2332}^{\infty} = 14,88$ (ГПа).

Наибольшее отклонение в вычисленных с помощью указанных параметров модулях от экспериментальных значений составляет 16 % (для модуля C_{2332}). Такое отклонение связано с недостаточной точностью предельного перехода $N \rightarrow \infty$ и с тем, что расчеты проводились для идеально чистого металла, а экспериментальные данные получены для технически чистого магния, содержащего примеси.

Выводы

В работе продемонстрированы возможности энергетического способа по вычислению упругих модулей образцов конечных размеров с ГПУ-решеткой в рамках подхода атомарной статики. В статьях [9, 10] с помощью силового (и моментного [10]) способа описания взаимодействия атомов найдены упругие модули бесконечных монокристаллов с ГПУ-решеткой при рассмотрении взаимодействия произвольного атома с атомами из одной [10] или нескольких [9] координационных сфер. В отличие от указанных работ здесь использовался энергетический подход сопоставления упругой энергии деформируемого сплошного тела и потенциальной энергии деформированного монокристалла, отнесенной к его объему в текущей конфигурации. Исследовались кристаллы конечных размеров, учитывалось взаимодействие каждого атома кристалла со всеми остальными атомами образца. Потенциальная энергия определялась на осно-

ве классических двухчастичных (безмоментных) потенциалов степенного вида. Показано, что ГПУ-решетка, состоящая из двух вложенных простых подрешеток, при заданной аффинной кинематике не может деформироваться однородно. Для обеспечения минимума потенциальной энергии ГПУ-кристалла в текущей конфигурации необходимо задавать относительные смещения подрешеток, которые были найдены как функции от параметров деформирования тела. Показано, что упругие свойства материала с ГПУ-решеткой зависят от размеров образца. Макроскопические упругие модули получены за счет предельного перехода (стремление размера кристалла к бесконечности). Это позволяет идентифицировать параметры потенциала по макроскопическим свойствам материалов. В отличие от работ [9, 10] здесь не предполагалось априорной симметрии тензора напряжений Коши и тензора линейно-упругих свойств C . Показано, что в этом случае упругий отклик материала с ГПУ-решеткой должен описываться 8 независимыми ненулевыми упругими модулями. С помощью энергетического подхода можно найти только 6 из них. Показано, что при независимом вычислении компонент C_{1111} , C_{1122} и C_{1212} они оказываются связанными равенством $C_{1212} = (C_{1111} - C_{1122})/2$, которое соответствует симметричному тензору C для ГПУ-решетки. На примере магния показан способ идентификации всех параметров используемого потенциала Ми.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ № 1220-0-880-0-1052-а и № 1110-0-119-9-6033-р-Урал-а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зубко И.Ю., Трусов П.В. Определение упругих постоянных ГЦК-монокристаллов с помощью потенциала межатомного взаимодействия // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2011. – № 1. – С. 147–169.
2. Зубко И.Ю., Мелентьева О.В., Морозова В.П., Кочуров В.И. Вывод упругого закона монокристаллов металлов из потенциала межатомного взаимодействия // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – 2011. – № 4. – Ч. 5. – С. 2181–2183.
3. Симонов М.В., Зубко И.Ю. Определение равновесных параметров решетки различных ГПУ-монокристаллов с помощью потенциала межатомного взаимодействия Ми // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2012. – № 3. – С. 204–217.
4. Васильев Д.М. Физическая кристаллография. – М.: Металлургия, 1981. – 248 с.
5. Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. – М.: Физматлит, 2007. – 304 с.
6. Кривцов А.М. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов. – СПб.: Изд. СПбГПУ, 2010. – 144 с.
7. Черных К.Ф. Введение в анизотропную упругость. – М.: Наука, 1988. – 190 с.
8. Метод молекулярной динамики в физической химии / под редакцией Ю.К. Товбина. – М.: Наука, 1996. – 334 с.
9. Баранов М.А., Дубов Е.А., Дятлова И.В., Черных Е.В. Атомно-дискретное описание влияния анизотропных межатомных взаимодействий на упругие свойства ГПУ-металлов // Физика твердого тела. – 2004. – Т. 46. – № 2. – С. 212–217.
10. Кривцов А.М., Подольская Е.А. Моделирование упругих свойств кристаллов с гексагональной плотноупакованной решеткой // Механика твердого тела. – 2010. – № 3. – С. 77–86.

Поступила 03.05.2013 г.