

УДК 534.222, 539.2

УПРУГИЕ ВОЛНЫ В ДВУМЕРНОЙ ЗЕРНИСТОЙ СРЕДЕ**И.С. Павлов***Нижний Новгород*

Рассмотрена двумерная модель зернистой среды, представляющая собой квадратную решетку из упруго взаимодействующих круглых частиц, обладающих трансляционными и вращательными степенями свободы. В первом и втором длинноволновых приближениях выведены линейные уравнения в частных производных, описывающие распространение и взаимодействие волн различных типов в такой среде. Учет микроповоротов частиц и связанных с этим моментных взаимодействий приводит к появлению в среде волны микроповоротов. При "замораживании" микроповоротов уравнения движения вырождаются в двумерные уравнения Ламе для анизотропной среды. Изучены дисперсионные свойства систем первого и второго приближений. Проанализированы зависимости скоростей волн от размеров зерен. Произведено сопоставление разработанной модели в континуальном приближении с уравнениями двумерного континуума Коссера, обладающего макроскопической анизотропией.

1. Введение

В настоящее время интенсивно изучается конденсированное состояние вещества на мезомасштабном (в том числе и наномасштабном) уровне, активно развиваются мезомеханика и физика ультразернистых сред и нанокристаллических материалов [1–3]. Уменьшение размеров зерен рассматривается как эффективный метод изменения свойств твердого тела, приводящий, в частности к увеличению микротвердости, модулей упругости и скорости пластического деформирования материала [2, 3]. Разобраться в таких особенностях невозможно, оставаясь в рамках классической теории упругости, которая исходит из представления, что среда является континуумом материальных точек [4]. В частности, она не позволяет установить взаимосвязи между эффективными модулями упругости среды и параметрами ее внутренней структуры. В связи с этим возникает потребность построения математических моделей сред, которые бы в явном виде учитывали геометрические размеры частиц. Решить такую задачу можно, применив модельный подход, основанный на представлении среды системой взаимодействующих неточечных частиц. Учет дискретности среды можно осуществить двумя способами. В первом из них [5–7] представительный объем среды рассматривается как ансамбль из N соприкасающихся тел. Вводятся в рассмотрение тангенциальные и нормальные силы в области контактов, и из законов Ньютона выводятся уравнения движения частицы. В результате движение представительного объема среды описывается системой из N взаимосвязанных уравнений. При втором способе [8–10] среда представляется как регулярная решетка, в узлах которой расположены не материальные точки, а

тела конечных размеров. В отличие от точек, тела обладают не только трансляционными, но и вращательными (ротационными) степенями свободы, что существенно расширяет кинематические возможности моделей подобного типа. Еще одним существенным отличием от стандартной теории кристаллических решеток [11] является то, что наличие в узлах решетки тел с конечными размерами и формой позволяет достаточно просто ввести в рассмотрение как центральные, так и нецентральные (моментные) взаимодействия между частицами. Учет же микроповоротов относительно центров масс частиц приводит к появлению в средах с зернистой структурой волн микровращений (ротационных или спиновых волн [10, 12]). Для заданной структуры решетки по известным правилам составляются выражения для кинетической и потенциальной энергий, а также функция Лагранжа системы. Затем по известной функции Лагранжа выводятся дифференциально-разностные уравнения движения решетки [12]. Переход от дискретной модели к континуальной производится путем экстраполяции функций, заданных в дискретных точках, непрерывными полями смещений и микроповоротов. Рассматривая экстраполяции различных приближений, можно построить иерархию квазиконтинуальных моделей зернистой среды.

В данной статье обсуждается двумерная модель зернистой среды, представляющая собой квадратную решетку из жестких круглых частиц, обладающих двумя трансляционными и одной ротационной степенями свободы. Пространство между частицами представляет собой безмассовую упругую среду, через которую передаются силовые и моментные воздействия. Основными целями работы являются получение уравнений движения и выявление взаимосвязей между физико-механическими свойствами зернистого материала и параметрами его микроструктуры.

2. Дискретная модель

Рассматривается двумерная квадратная решетка, состоящая из однородных круглых гранул массы M и диаметром d . В исходном состоянии ($t = 0$) они сосредоточены в узлах решетки, и расстояние между центрами масс соседних гранул как вдоль оси x , так и вдоль оси y равно a (рис. 1).

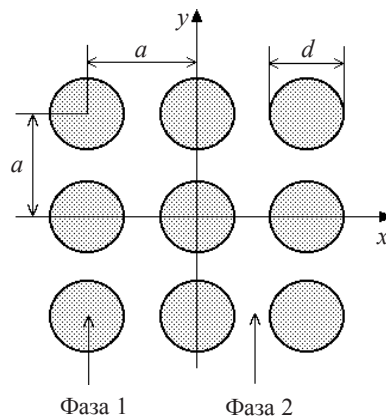


Рис. 1

При движении в плоскости каждая частица имеет три степени свободы: смещение центра масс частицы с номером $N = N(i, j)$ по осям x и y (трансляционные степени

свободы $u_{i,j}$ и $w_{i,j}$) и поворот относительно центра масс (ротационная степень свободы $\phi_{i,j}$) (рис. 2).

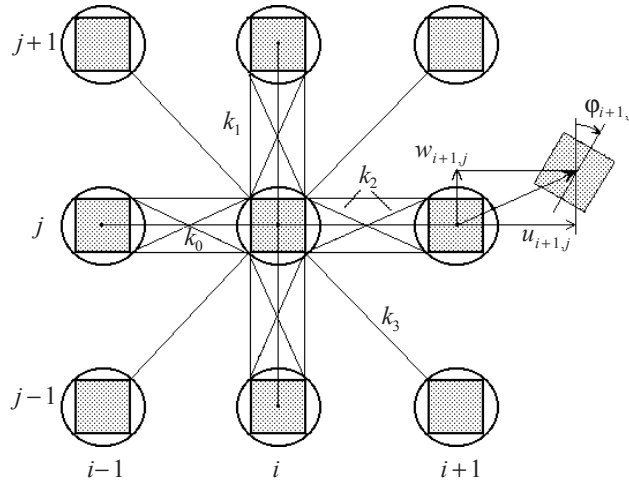


Рис. 2

Кинетическая энергия частицы $N(i,j)$ равна

$$T_{i,j} = \frac{M}{2}(\dot{u}_{i,j}^2 + \dot{w}_{i,j}^2) + \frac{J}{2}\dot{\phi}_{i,j}^2. \quad (2.1)$$

Здесь $J = Md^2/8$ – момент инерции частицы относительно оси, проходящей через центр масс. Точка сверху обозначает производную по времени.

Считается, что частица N взаимодействует лишь с восемью ближайшими соседями по решетке, центры масс четырех из которых лежат на горизонтальной и вертикальной прямых, а других четырех – на диагоналях (см. рис.2). Первые четыре частицы, центры масс которых расположены на окружности радиуса a , в дальнейшем будем называть частицами первой координационной сферы, а остальные – частицами второй координационной сферы (их центры находятся на окружности радиуса $a\sqrt{2}$), причем центры обеих окружностей совпадают с частицей N . Центральные и нецентральные взаимодействия соседних гранул моделируются упругими пружинами четырех типов [10, 12–14]. Центральные пружины с жесткостью k_0 совместно с горизонтальными и вертикальными пружинами с жесткостью k_1 определяют силовые взаимодействия при растяжении-сжатии материала. Пружины типа k_1 осуществляют также передачу моментов при поворотах частиц. Диагональные пружины с жесткостью k_2 характеризуют силовые взаимодействия частиц при сдвиговых деформациях в материале. И, наконец, пружины с жесткостью k_3 моделируют взаимодействие с зернами второй координационной сферы.

Считается, что смещения зерен малы по сравнению с размерами элементарной ячейки, построенной на двух взаимно перпендикулярных векторах длины a . Взаимодействие частиц при отклонениях от положения равновесия определяется относительными удлинениями пружин. Потенциальная энергия частицы N , обусловленная ее взаимодействием с восемью ближайшими соседями по решетке, описывается формулой

$$U_N = \frac{k_0}{2} \sum_{n=1}^4 D_{0n}^2 + \frac{k_1}{2} \sum_{n=1}^8 D_{1n}^2 + \frac{k_2}{2} \sum_{n=1}^8 D_{2n}^2 + \frac{k_3}{2} \sum_{n=1}^4 D_{3n}^2,$$

где D_{ln} ($l=0, 1, 2, 3$) – относительные удлинения пружин, соединяющих частицу с ее соседями. Выражения для удлинений D_{ln} , вычисленные в приближении малости величин $\Delta u_i = (u_{i,j} - u_{i-1,j})/a \sim \Delta w_i = (w_{i,j} - w_{i-1,j})/a \sim \Phi_{i,j} \sim \varepsilon \ll 1$ (здесь ε – мера деформации ячейки) и $\Phi_i = (\varphi_{i,j} + \varphi_{i-1,j})/2 = \varphi_{i,j} - 0,5 a \Delta \varphi_i \ll \pi/2$, приведены в работах [13, 14]. С помощью этих соотношений, в которых учтены лишь линейные слагаемые для удлинений пружин, выводится следующее выражение для потенциальной энергии, приходящейся на одну частицу с номером $N = N(i, j)$, с точностью до слагаемых порядка ε^2 включительно:

$$U_{i,j} = B_1((\Delta u_i)^2 + (\Delta w_j)^2) + B_2((\Delta u_j)^2 + (\Delta w_i)^2) + \frac{d^2}{8} B_3((\Delta \varphi_i)^2 + (\Delta \varphi_j)^2) + B_4(\Delta u_i \Delta w_j + \Delta u_j \Delta w_i) + B_5(\Delta w_i \Phi_i - \Delta u_j \Phi_j) + B_6 \Phi_{ij}^2. \quad (2.2)$$

Здесь первые два слагаемых с коэффициентами B_1 и B_2 описывают энергию продольных и сдвиговых деформаций, третье и шестое – энергию, связанную с нецентральными (моментными) взаимодействиями частиц, а четвертое и пятое – энергию связи поперечных смещений с продольными смещениями и поворотами частиц соответственно. Коэффициенты B_1, \dots, B_6 , стоящие при этих слагаемых, явным образом выражаются через параметры микромодеи и константы упругостей пружин:

$$B_1 = \frac{a^2}{2} \left(k_0 + 2k_1 + \frac{2h^2}{r^2} k_2 + k_3 \right), \quad B_2 = \frac{a^2}{2} \left(\frac{d^2}{r^2} k_2 + k_3 \right),$$

$$B_3 = a^2 \left(k_1 + \frac{a^2}{r^2} k_2 \right), \quad B_4 = a^2 k_3, \quad B_5 = B_6 = \frac{a^2 d^2}{r^2} k_2,$$

где $h = a - d/\sqrt{2}$ и $r = \sqrt{0,5d^2 + h^2}$ – начальные длины горизонтальных и диагональных пружин соответственно. Дифференциально-разностные уравнения, описывающие динамику решетки, могут быть получены из уравнений Лагранжа 2-го рода

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{ij}^{(l)}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_{ij}^{(l)}} = 0,$$

где $L = \sum_{i,j} (T_{i,j} - U_{i,j})$ – функция Лагранжа, составленная из выражений (2.1) и (2.2); $q_{ij}^{(l)}$ – обобщенные координаты ($q_{ij}^{(1)} = u_{ij}$, $q_{ij}^{(2)} = w_{ij}$, $q_{ij}^{(3)} = \varphi_{ij}$); $\dot{q}_{ij}^{(l)}$ – производные по времени от обобщенных координат (обобщенные скорости). Такие уравнения удобны, например, для численного моделирования отклика системы на внешние динамические воздействия. Однако для сопоставления предлагаемой математической модели зернистой среды с известными теориями твердого тела целесообразно перейти от дискретного описания к континуальному.

3. Длинноволновые аппроксимации дискретной модели

В случае длинноволновых возмущений, когда $\lambda \gg a$ (где λ – характерный пространственный масштаб деформации), от дискретных переменных i и j можно перейти к непрерывным пространственным переменным $x = ia$ и $y = ja$. При этом функции, заданные в дискретных точках, интерполируются непрерывными функциями и их частными производными:

$$u_{i\pm 1, j\pm 1}(t) = u(x \pm a, y \pm a, t) = u(x, y, t) \pm a \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{a^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \pm \frac{a^3}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + 3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial y} + 3 \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial y^2} + \frac{\partial^3 u}{\partial y^3} \right) + \dots \quad (3.1)$$

Аналогичные разложения используются и для функций $w_{i\pm 1, j\pm 1}(t)$ и $\varphi_{i\pm 1, j\pm 1}(t)$. В зависимости от количества удерживаемых слагаемых в (3.1) можно рассматривать различные приближения дискретной модели зернистой среды.

Первое приближение (континуальная модель). Если в разложениях (3.1) ограничиться учетом слагаемых лишь порядка $O(a)$, что соответствует локальной теории упругости, то двумерная плотность функции Лагранжа L (лагранжиан) среды примет вид:

$$L = \frac{\rho}{2} (u_t^2 + w_t^2 + R^2 \varphi_t^2) - \frac{\rho}{2} [c_1^2 (u_x^2 + w_y^2) + c_2^2 (w_x^2 + u_y^2) + R^2 c_3^2 (\varphi_x^2 + \varphi_y^2) + s^2 (u_x w_y + u_y w_x) + 2\beta (w_x - u_y) \varphi + 2\beta \varphi^2]. \quad (3.2)$$

С помощью вариационного принципа Гамильтона–Остроградского из лагранжиана (3.2) выводится система дифференциальных уравнений первого приближения, описывающая динамические процессы в зернистой среде:

$$\begin{aligned} u_{tt} &= c_1^2 u_{xx} + c_2^2 u_{yy} + s^2 w_{xy} - \beta \varphi_y, \\ w_{tt} &= c_2^2 w_{xx} + c_1^2 w_{yy} + s^2 u_{xy} + \beta \varphi_x, \\ \varphi_{tt} &= c_3^2 (\varphi_{xx} + \varphi_{yy}) + \frac{\beta}{R^2} (u_y - w_x - 2\varphi). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Здесь введены обозначения: $c_i = \sqrt{2B_i / \rho a^2}$ ($i = 1 \div 3$) – скорости распространения соответственно продольной, сдвиговой волн и волны микровращений, $s = \sqrt{2B_4 / \rho a^2}$ – коэффициент линейной связи между продольными и сдвиговыми волнами, $\beta = B_5 / \rho a^2$ – параметр линейной связи волны микровращений с поперечной и продольной, $R = \sqrt{J / M} = d / \sqrt{8}$ – радиус инерции микрочастиц среды относительно центра масс, $\rho = M / a^2$ – среднее значение плотности двумерной зернистой среды.

Система (3.3) описывает динамику зернистой среды с учетом локальных взаимодействий гранул и отличается от уравнений классической теории упругости [15] появлением дополнительного уравнения для волны микровращений. При контину-

альном подходе оно возникает из закона сохранения момента количества движения, когда вводятся в рассмотрение внутренние моменты частиц среды [16]. Следует отметить, что третье уравнение (3.3), описывающее микроповороты частиц, принципиально отличается от первых двух. Оно имеет однородное в пространстве и осциллирующее во времени решение, удовлетворяющее уравнению $\varphi_{tt} + \omega_0^2 \varphi = 0$, где $\omega_0 = \sqrt{2\beta/R^2}$ – собственная частота микроповоротов.

Коэффициенты уравнений (3.3) выражаются через силовые постоянные k_0, k_1, k_2, k_3 и диаметр частиц d :

$$\rho c_1^2 = k_0 + 2k_1 + \frac{2h^2}{r^2} k_2 + k_3, \quad \rho c_2^2 = \frac{d^2}{r^2} k_2 + k_3, \quad \rho c_3^2 = 2 \left(k_1 + \frac{a^2}{r^2} k_2 \right),$$

$$\rho s^2 = 2k_3, \quad \rho \beta = \frac{d^2}{r^2} k_2. \quad (3.4)$$

Заметим, что следствием второго, четвертого и пятого равенств (3.4) является соотношение $2c_2^2 - s^2 = 2\beta$. Это говорит о том, что из 5 коэффициентов уравнений (3.3) лишь 4 являются независимыми. Кроме того, из четвертого соотношения (3.4) вытекает необходимость учета взаимодействия с частицами второй координатной сферы. Если его не учитывать, то обращается в ноль величина ρs^2 , что противоречит теории упругости.

Как показывают формулы (3.4), квадраты скоростей волн прямо пропорциональны константам межчастичного взаимодействия k_0, k_1, k_2 и k_3 . Связь между скоростями волн и относительным размером частиц d/a является более сложной. Так, на рис. 3 изображена монотонно убывающая зависимость безразмерной скорости продольных волн c_1/c_0 от параметра d/a при значениях констант взаимодействия $k_1/k_0 = 0,1, k_3/k_0 = 0,3$ и трех значениях k_2/k_0 : 0,2, 0,5 и 0,9 ($c_0 = \sqrt{k_0/\rho}$ – скорость продольных волн в решетке частиц с учетом лишь центральных взаимодействий).

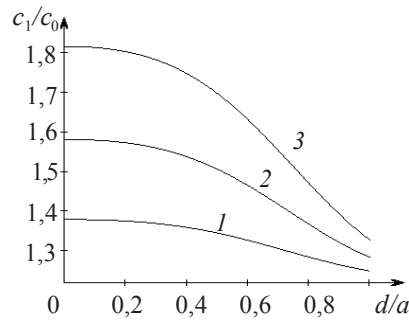


Рис. 3

Зависимости отношений скоростей c_2/c_1 и c_3/c_1 от относительного размера частиц при тех же значениях констант межчастичного взаимодействия приведены соответственно на рис. 4 и 5. Если первая функция монотонно возрастает с увеличением d/a , то c_3/c_1 имеет максимум при некоторых значениях k_2/k_0 и d/a . На рис. 3–5 кривые 1 соответствуют значению $k_2/k_0 = 0,2$, кривые 2 – значению $k_2/k_0 = 0,5$, кривые 3 – значению $k_2/k_0 = 0,9$.

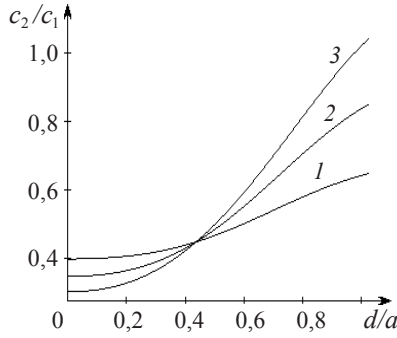


Рис. 4

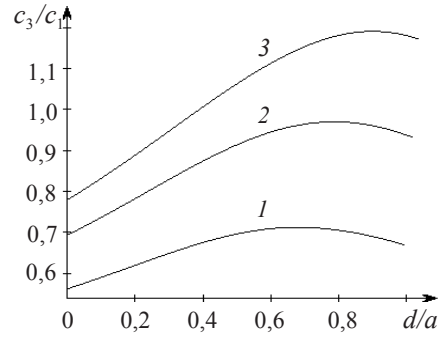


Рис. 5

В свою очередь, параметры силового взаимодействия частиц k_0 , k_1 , k_2 и k_3 можно выразить через макро-характеристики среды:

$$k_3 = \frac{\rho s^2}{2}, \quad k_2 = \rho \beta \frac{r^2}{d^2} = \frac{\rho r^2}{2d^2} (2c_2^2 - s^2), \quad (3.5)$$

$$k_1 = \frac{\rho}{2} \left(c_3^2 - \frac{a^2}{d^2} (2c_2^2 - s^2) \right), \quad k_0 = \rho (c_1^2 - c_2^2 - c_3^2) + \frac{\rho a \sqrt{2}}{d} (2c_2^2 - s^2).$$

Таким образом, выражения (3.4) и (3.5) устанавливают взаимно-однозначные соответствия между параметрами микромодели и макро-характеристиками зернистой среды. Эту взаимосвязь можно использовать, в частности, для диагностики материалов с микроструктурой по данным волновых экспериментов.

Второе приближение (квазиконтинуальная модель). Если в разложениях (3.1) учесть слагаемые до порядка $O(a^2)$ включительно (это соответствует градиентному приближению нелокальной теории упругости [4, 17]), то двумерная плотность функции Лагранжа L примет вид:

$$L = \frac{\rho}{2} (u_t^2 + w_t^2 + R^2 \varphi_t^2) - \frac{\rho}{2} [c_1^2 (u_x^2 + w_y^2) + c_2^2 (w_x^2 + u_y^2) + R^2 c_3^2 (\varphi_x^2 + \varphi_y^2) + s^2 (u_x w_y + u_y w_x) + 2\beta (w_x - u_y) \varphi + 2\beta \varphi^2 + \frac{a^2}{4} (c_1^2 (u_{xx}^2 + w_{yy}^2) + c_2^2 (w_{xx}^2 + u_{yy}^2) + R^2 c_3^2 (\varphi_{xx}^2 + \varphi_{yy}^2) + s^2 (u_{xx} w_{yy} + u_{yy} w_{xx}))].$$

В данном приближении система дифференциальных уравнений, описывающая взаимодействие продольных, поперечных и спиновых волн в зернистой среде, имеет вид:

$$u_{tt} = c_1^2 u_{xx} + c_2^2 u_{yy} + s^2 w_{xy} - \beta \varphi_y + \frac{a^2}{4} (c_1^2 u_{xxxx} + c_2^2 u_{yyyy} + s^2 w_{xxyy}),$$

$$w_{tt} = c_2^2 w_{xx} + c_1^2 w_{yy} + s^2 u_{xy} + \beta \varphi_x + \frac{a^2}{4} (c_2^2 w_{xxxx} + c_1^2 w_{yyyy} + s^2 u_{xxyy}), \quad (3.6)$$

$$\varphi_{tt} = c_3^2 (\varphi_{xx} + \varphi_{yy}) + \frac{\beta}{R^2} (u_y - w_x - 2\varphi) + \frac{a^2}{4} c_3^2 (\varphi_{xxxx} + \varphi_{yyyy}).$$

Уравнения (3.6) отличаются от (3.3) наличием дополнительных слагаемых, содержащих старшие производные.

4. Дисперсионные свойства упругих волн

Проведем сравнительный анализ волновых свойств систем (3.3) и (3.6) в случае распространения одномерных волн вдоль оси x . При этом волновой вектор $\mathbf{k}=(k_x, k_y)$ имеет лишь одну ненулевую компоненту $-k_x$. Рассмотрим дисперсионное соотношение системы (3.6):

$$\left(\omega^2 - c_1^2 k_x^2 + \frac{a^2}{4} c_1^2 k_x^4 \right) \left[\omega^4 + \left(\left(\frac{a^2}{4} k_x^2 - 1 \right) (c_2^2 + c_3^2) k_x^2 - \omega_0^2 \right) \omega^2 + c_2^2 c_3^2 \left(\frac{a^2}{4} k_x^2 - 1 \right)^2 k_x^4 - \omega_0^2 c_2^2 k_x^2 \left(\frac{a^2}{4} k_x^2 - 1 \right) - \frac{\beta}{2} \omega_0^2 k_x^2 \right] = 0, \quad (4.1)$$

где ω – частота колебаний. Из равенства (4.1) можно получить дисперсионное соотношение для уравнений (3.6), если пренебречь слагаемыми, пропорциональными a^2 . Дисперсионные кривые для систем (3.3) и (3.6) представлены, соответственно, на рис. 6 и 7 (на обоих рисунках L – продольная, T – поперечная, R – ротационная моды, $k_0 = \omega_0/c_2$, $c_1/c_2 = 1,8$, $c_3/c_2 = 0,7$, $\beta/c_2^2 = 0,3$; на рис. 7 $a\omega_0/c_2 = 0,4$).

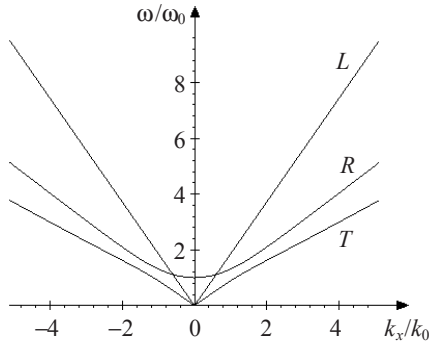


Рис. 6

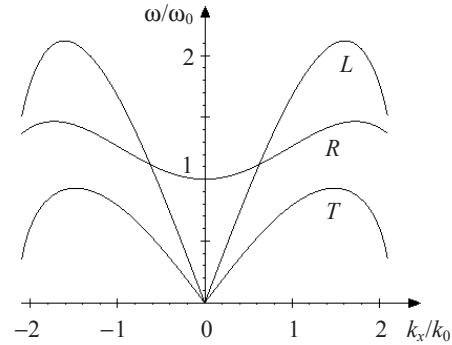


Рис. 7

Из этих рисунков видно, что при частотах $\omega \leq \omega_0$ микровращения представляют собой локализованные возмущения и не распространяются. У продольной волны во втором приближении появляется высокочастотная дисперсия, которая не учитывается локальной теорией [10]. Следовательно, второе приближение позволяет учесть дисперсию продольных волн, экспериментально наблюдающуюся в алюминиевых сплавах [18] и композитах [19]. Заметим, что к аналогичным уравнениям приводит и учет нелокальности взаимодействия частиц среды [17]. Отличие состоит в том, что в (3.6) все коэффициенты перед старшими производными находятся из разложения (3.1) и всегда положительные, а в уравнениях нелокальной теории коэффициенты определяются также константами силового взаимодействия с частицами третьей и четвертой координационных сфер и могут быть отрицательными [17].

5. Влияние микроструктуры на константы макроупругости

Исследуем влияние микроструктуры на эффективные константы макроупругости в рамках модели первого приближения (3.3). Для выявления физико-механического смысла входящих в нее коэффициентов удобно провести сопоставление

уравнений (3.3) с известными континуальными моделями. Так, например, в низкочастотной области, когда можно пренебречь вращательными степенями свободы частиц (то есть $\varphi=0$), уравнения (3.3) совпадают с двумерными уравнениями Ламе для анизотропной среды с кубической симметрией [20]:

$$\begin{aligned}\rho_V u_{tt} &= C_{11} u_{xx} + C_{44} u_{yy} + (C_{12} + C_{44}) w_{xy}, \\ \rho_V w_{tt} &= C_{44} w_{xx} + C_{11} w_{yy} + (C_{12} + C_{44}) u_{xy}.\end{aligned}\quad (5.1)$$

Здесь $\rho_V = \rho/a$ – “объемная” плотность среды. Из сравнения коэффициентов в (3.3) и (5.1) находится связь между скоростями распространения продольной (c_1) и сдвиговой (c_2) волн и параметром s , с одной стороны, и упругими постоянными второго порядка C_{11} , C_{12} и C_{44} , с другой:

$$c_1^2 = \frac{C_{11}}{\rho_V}, \quad c_2^2 = \frac{C_{44}}{\rho_V}, \quad s^2 = \frac{C_{12} + C_{44}}{\rho_V}.\quad (5.2)$$

Используя соотношения (3.4) и (5.2), коэффициенты матрицы упругих постоянных можно выразить через параметры микроструктуры материала:

$$\begin{aligned}C_{11} &= \frac{k_0 + 2k_1 + k_3}{a} + \frac{2(a\sqrt{2} - d)^2}{d^2 + (a\sqrt{2} - d)^2} \frac{k_2}{a}, \\ C_{12} &= \frac{k_3}{a} - \frac{2d^2}{d^2 + (a\sqrt{2} - d)^2} \frac{k_2}{a}, \\ C_{44} &= \frac{k_3}{a} + \frac{2d^2}{d^2 + (a\sqrt{2} - d)^2} \frac{k_2}{a}.\end{aligned}\quad (5.3)$$

Из последних двух выражений (5.3) следует, что при любых значениях размеров зерен $d > 0$ выполняется неравенство $C_{44} > C_{12}$. Однако в кубических кристаллах часто встречаются ситуации, когда $C_{44} < C_{12}$. Расширить границы применимости данной модели можно, например, за счет учета внутренних напряжений в материале [21]. Следует также отметить, что даже при отсутствии микроповоротов частиц “память” о зернистой структуре среды остается в виде зависимостей эффективных модулей упругости от параметров микроструктуры. Так, при стремлении размера зерна к нулю из (4.3) вытекает равенство $C_{12} = C_{44}$, являющееся соотношением Коши для кристаллов с кубической симметрией. Одним из условий выполнения этого равенства является наличие в среде лишь центральных сил взаимодействия между частицами [17, 22], то есть $k_1 = k_2 = 0$. Если среда состоит из материальных точек, то из (5.3) следует, что модули упругости равны $C_{11}^0 = k_0 + k_3$, $C_{12}^0 = C_{44}^0 = k_3$.

Выражения силовых констант микромодели через модули упругости среды имеют вид:

$$\begin{aligned}k_3 &= \frac{a}{2}(C_{44} + C_{12}), \quad k_2 = \frac{a}{4}(C_{44} - C_{12}) \left(1 + 2 \left(\frac{a}{d} - \frac{\sqrt{2}}{2} \right)^2 \right), \\ k_0 + 2k_1 &= aC_{11} - \frac{a}{2}(C_{44} + C_{12}) - a(C_{44} - C_{12}) \left(\frac{a}{d} - \frac{\sqrt{2}}{2} \right)^2.\end{aligned}\quad (5.4)$$

Эти соотношения могут быть полезны при построении дискретных моделей сред по известным модулям упругости и характерным размерам частиц.

6. Сопоставление с теорией Коссера

Представляет интерес сравнение уравнений (3.3) с уравнениями динамики двумерного континуума Коссера [12, 15], состоящего из центрально-симметричных частиц, лагранжиан которого имеет вид:

$$L = \frac{\rho_V}{2}(u_i^2 + w_i^2 + R^2\varphi_i^2) - \frac{1}{2} \left[B_{11}(u_x^2 + w_y^2) + \left(B_{44} + \frac{\kappa}{2} \right) (w_x^2 + u_y^2) + \gamma(\varphi_x^2 + \varphi_y^2) + \left(B_{12} + B_{44} - \frac{\kappa}{2} \right) (u_x w_y + u_y w_x) + 2\kappa(w_x - u_y)\varphi + 2\kappa\varphi^2 \right]. \quad (6.1)$$

Здесь B_{11} , B_{12} и B_{44} – константы макроупругости второго порядка, а γ и κ – феноменологические константы, характеризующие микроструктуру среды.

Из сопоставления лагранжианов (3.2) и (6.1) видно, что акустические характеристики среды можно выразить через упругие постоянные второго порядка и константы микроструктуры:

$$c_1^2 = \frac{B_{11}}{\rho_V}, \quad c_2^2 = \frac{2B_{44} + \kappa}{2\rho_V}, \quad s^2 = \frac{2B_{12} + 2B_{44} - \kappa}{2\rho_V}, \quad c_3^2 = \frac{\gamma}{\rho_V R^2}, \quad \beta = \frac{\kappa}{\rho_V}. \quad (6.2)$$

Обратная к (6.2) зависимость с учетом связи $2c_2^2 - s^2 = 2\beta$ имеет вид:

$$B_{11} = \rho_V c_1^2, \quad B_{12} = \frac{\rho_V s^2}{2}, \quad B_{44} = \frac{\rho_V}{4}(2c_2^2 + s^2), \quad \kappa = \rho_V \beta, \quad \gamma = \rho_V c_3^2. \quad (6.3)$$

Следует отметить, что введенные в (6.1) константы макроупругости второго порядка (B_{ij}) и константы Ламе (C_{ij}), вообще говоря, отличаются друг от друга. Действительно, положив в (6.1) $\varphi = 0$, находим $B_{11} = C_{11}$, $B_{44} + \kappa/2 = C_{44}$, $B_{12} - \kappa/2 = C_{12}$. Из равенств (6.3) вытекает соотношение

$$B_{44} - B_{12} = \frac{\kappa}{2}.$$

Оно свидетельствует о том, что нарушение соотношения Коши для кристаллов с кубической симметрией (то есть условие центрально-симметричного взаимодействия) обусловлено параметром микроструктуры κ , отвечающим за связь между микроповоротами частиц и сдвиговыми деформациями. От него также зависит значение критической частоты волны микровращений $\omega_0 = \sqrt{2\kappa/\rho_V R^2}$.

С помощью выражений (6.3) и (3.4) можно выразить константы среды Коссера через параметры микроструктуры:

$$B_{11} = \frac{k_0 + 2k_1 + k_3}{a} + \frac{2(a\sqrt{2} - d)^2}{d^2 + (a\sqrt{2} - d)^2} \frac{k_2}{a}, \quad B_{12} = \frac{k_3}{a},$$

$$B_{44} = \frac{k_3}{a} + \frac{d^2}{d^2 + (a\sqrt{2} - d)^2} \frac{k_2}{a},$$

$$\kappa = \frac{2d^2}{d^2 + (a\sqrt{2} - d)^2} \frac{k_2}{a}, \quad \gamma = 2 \left(\frac{k_1}{a} + \frac{2a^2}{d^2 + (a\sqrt{2} - d)^2} \frac{k_2}{a} \right).$$

Похожие соотношения были получены в работе [12], однако там частицы считались точечными, и потому отсутствовала зависимость констант от размеров зерен.

7. Оценка параметров спиновой волны

Близкими аналогами волн микровращений в твердых телах с зернистой структурой являются спиновые волны в ферромагнетиках [23] и волны директора в жидких кристаллах [24]. Поскольку до сих пор прямых экспериментальных доказательств существования волн микровращений в твердых телах не получено, то вызывает интерес оценка значений скорости и критической частоты такой волны в зернистой среде. Из (3.4) следует, что скорость c_3 следующим образом зависит от параметров микроструктуры:

$$\rho_V c_3^2 = 2 \left(\frac{k_1}{a} + \frac{2a^2}{d^2 + (a\sqrt{2} - d)^2} \frac{k_2}{a} \right). \quad (7.1)$$

Из (7.1) с помощью соотношений (5.4) можно получить выражение для скорости спиновой волны:

$$c_3^2 = \frac{2}{\rho_V (K + 2)} \left[C_{11} - C_{44} + \frac{K + 4\sqrt{2}p}{2p^2} (C_{44} - C_{12}) \right],$$

где $K = k_0/k_1$ – отношение между центральными и нецентральными взаимодействиями, $p = d/a$ – относительный размер частицы. В таблице приведены вычисленные по известным экспериментальным данным (при комнатной температуре) значения скорости спиновой волны, а также приведенной частоты спиновой волны $\omega_0 d = \sqrt{8(C_{44} - C_{12})/\rho_V}$ для некоторых кубических кристаллов [25].

Параметры структуры		Кристалл		
		LiF	NaF	NaBr
Плотность, кг/м ³ (экспериментальные данные)	ρ_V	2600	2800	3200
Упругие постоянные, 10 ⁹ Н/м ² (экспериментальные данные)	C_{11}	113,00	97,00	32,55
	C_{12}	48,00	25,60	13,14
	C_{44}	63,00	28,00	13,26
Скорости волн, м/с	c_1	6593	5890	3190
	c_2	4922	3162	2036
	c_3	3264	2283	1026
Нормированная критическая частота спиновых волн, м/с $\omega_0 d = \sqrt{8(C_{44} - C_{12})/\rho_V}$	$\omega_0 d$	46150	6860	300
Критическая частота, 10 ⁹ с ⁻¹ , при $d = 100$ нм	ω_0	461,5	68,6	3
Нормированные параметры силовых взаимодействий между зёрнами, 10 ⁹ Н/м ²	k_0/a	45,876	58,174	16,109
	k_1/a	4,588	5,817	1,611
	k_2/a	4,974	0,796	0,040
	k_3/a	55,500	26,800	26,660

При вычислениях принималось $p=0,9$ и $K=10$ (центральные взаимодействия доминируют). Как показали расчеты, при значениях $0,9 < p < 0,99$ величина c_3 изменяется менее чем на 10%. Из таблицы видно, что для всех рассмотренных материалов скорость спиновой волны является наименьшей. Оценки показывают, что в нанокристаллической среде с диаметром зерна $d=100$ нм = 10^{-7} м критические частоты лежат в интервале от $\omega_0 \approx 461,5 \cdot 10^9$ с⁻¹ (для LiF) до $\omega_0 \approx 3 \cdot 10^9$ с⁻¹ (для NaBr).

8. Заключение

При моделировании зернистой среды цепочкой материальных точек, связанных пружинами с различной жесткостью, учитываются лишь центральные взаимодействия частиц, когда силы направлены вдоль линии, соединяющей центры масс частиц. Такие модели не позволяют корректно исследовать сдвиговые деформации в зернистых средах, так как для этого необходимо учитывать микроповороты и моментные взаимодействия частиц, вызванные, например, наличием нецентральных сил взаимодействия.

В данной статье разработана двумерная математическая модель зернистой среды, которая отличается от классической теории упругости наличием нового уравнения для волны микровращений. По структуре полученные уравнения совпадают с уравнениями анизотропного континуума Коссера с центрально-симметричными частицами. Однако в отличие от теории Коссера в предложенной модели коэффициенты явным образом зависят от размеров частиц и параметров их силового взаимодействия. Это позволяет теоретически проанализировать наблюдающиеся в экспериментах зависимости скорости продольной волны от размеров зерен, а рассмотрение математической модели второго приближения приводит к появлению дисперсии продольных волн, экспериментально наблюдавшейся в алюминиевых сплавах и композитах.

Хотя до сих пор прямых экспериментальных доказательств существования спиновых волн в твердых телах не получено, проведенные в работе оценки показывают, что в кубических кристаллах скорость таких волн, как правило, меньше скоростей трансляционных волн, а критическая частота этой волны лежит в гиперзвуковой области. Для низких частот, когда можно пренебречь вращательными степенями свободы частиц, уравнения (3.3) вырождаются в известные уравнения Ламе для среды с кубической симметрией (5.1). При этом “память” о ее зернистой структуре остается в виде зависимостей между макроскопическими характеристиками среды и параметрами микромоделей.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантами РФФИ (проект № 04-02-17156) и Президента Российской Федерации для поддержки ведущих научных школ (проект № НШ-1638.2003.8).

Литература

1. Физическая мезомеханика и компьютерное моделирование материалов / Под ред. В.Е. Панина: В 2-х т. – Новосибирск: Наука, 1995. – 297 с. и 320 с.
2. *Валиев, Р.З.* Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией / Р.З. Валиев, И.В. Александров. – М.: Логос, 2000. – 272 с.
3. *Гусев, А.И.* Нанокристаллические материалы / А.И. Гусев, А.А. Ремпель. – М.: Физматлит, 2001. – 224 с.
4. *Кунин, И.А.* Теория упругих сред с микроструктурой / И.А. Кунин. – М.: Наука, 1975. – 416 с.

5. *Christoffersen, J.* A micromechanical description of granular material behavior / J. Christoffersen, M.M. Mehrabadi, S.A. Nemat-Nasser // *ASME, J. Appl. Mech.* – 1981. – V. 48, – P. 339–344.
6. *Богданов, А.Н.* Нелинейные сдвиговые волны в зернистой среде / А.Н. Богданов, А.Т. Скворцов // *Акустический журнал.* – 1992. – Т. 38. – Вып. 3. – С. 408–412.
7. *Chang, C.S.* A micromechanical-based micro-polar theory for deformation of granular solids / C.S. Chang, L. Ma // *Int. J. Solids and Structures.* – 1994. – V. 28. – P. 67–87.
8. *Pouget, J.* Lattice model for elastic ferroelectric crystals: continuum approximation / J. Pouget, A. Askar, G.A. Maugin // *Phys. Rev. B.* – 1986. – V. 33. – P. 6304–6325.
9. *Драгунов, Т.Н.* Ангармонические взаимодействия упругих и ориентационных волн в одномерных кристаллах / Т.Н. Драгунов, И.С. Павлов, А.И. Потапов // *Физика твердого тела.* – 1997. – Т. 39, №1. – С.137–144.
10. *Лисина, С.А.* Нелинейная гранулированная среда с вращением частиц. Одномерная модель / С.А. Лисина, А.И. Потапов, В.Ф. Нестеренко // *Акустический журнал.* – 2001. – Т. 47, №5. – С. 685–693.
11. *Борн, М.* Динамическая теория кристаллических решеток / М. Борн, Х. Кунь. – М.: ИЛ, 1958.
12. *Suiker, A.S.J.* Comparison of wave propagation characteristics of the Cosserat continuum model and corresponding discrete lattice models / A.S.J. Suiker, A.V. Metrikine, R. de Borst // *Int. J. of Solids and Structures.* – 2001. – V. 38. – P. 1563–1583.
13. *Павлов, И.С.* Гранулированная среда с вращением частиц. Двумерная модель / И.С. Павлов // *Проблемы прочности и пластичности: Межвуз. сб. / Н. Новгород: Изд-во ННГУ.* – 2003. – Вып. 65. – С. 50–61.
14. *Pavlov, I.S.* A 2D Granular Medium With Rotating Particles / I.S. Pavlov, A.I. Potapov G.A, Maugin // *Int. J. of Solids and Structures.* – 2005 (in print).
15. *Новацкий, В.* Теория упругости. Гл. 13. Теория несимметричной упругости / В. Новацкий. – М.: Мир, 1975.
16. *Седов, Л.И.* Механика сплошной среды. Т. 1 / Л.И. Седов. – М.: Наука, 1970. – 536 с.
17. *Косевич, А.М.* Теория кристаллической решетки (физическая механика кристаллов) / А.М. Косевич. – Харьков: Вища школа, 1988. – 304 с.
18. *Савин, Г.Н.* Распространение упругих волн в твердом теле с микроструктурой / Г.Н. Савин, А.А. Лукашев, Е.М. Лыско // *Прикладная механика.* – 1970. – Т. 6, №7. – С. 48–52.
19. *Ерофеев, В.И.* Наблюдение дисперсии упругих волн в зернистом композите и математическая модель для ее описания / В.И. Ерофеев, В.М. Родюшкин // *Акустический журнал.* – 1992. – Т. 38, №6. – С. 1116–1117.
20. *Федоров, В.И.* Теория упругих волн в кристаллах / В.И. Федоров. – М.: Наука, 1965. – 388 с.
21. Nonlinear interactions of solitary waves in a 2D lattice / A.I. Potapov [et al.] // *Wave Motion.* – 2001. – V. 34, №1. – P. 83–95.
22. *Фейнман, Р.* Фейнмановские лекции по физике. Т. 7. Физика сплошных сред / Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс. – М.: Мир, 1977. – 288 с.
23. *Ахиезер, А.И.* Спиновые волны / А.И. Ахиезер, В.Г. Барьяхтар, С.В. Пелетминский. – М.: Наука, 1967.
24. *Lam, L.* Solitons in Liquid Crystals / L. Lam, J. Prost (eds.). – Springer Verlag, New York Inc., 1992.
25. *Францевич, И.Н.* Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов: Справочник / И.Н. Францевич, Ф.Ф. Воронов, С.А. Бакута / Под ред. И.Н. Францевича. – Киев: Наукова думка, 1982. – 286 с.

[16.09.2005]