

УДК 534.222, 539.2

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СРЕДЫ С ПЛОТНОЙ УПАКОВКОЙ ЧАСТИЦ

И.В. Милосердова, И.С. Павлов, А.И. Потапов

Нижний Новгород

Рассмотрена двумерная модель нанокристаллической среды, представляющая собой гексагональную решетку из упруго взаимодействующих круглых частиц, обладающих трансляционными и вращательной степенями свободы. В длинноволновом приближении выведены линейные уравнения в частных производных, описывающие распространение и взаимодействие волн различных типов в такой среде. Найдена взаимосвязь между константами макроупругости среды и параметрами ее микроструктуры. Проанализированы зависимости скоростей упругих волн от размеров наночастиц. Получены оценки для скорости и критической частоты волны микровращений в некоторых гексагональных кристаллах. Произведено сопоставление разработанной континуальной модели с уравнениями двумерного изотропного континуума Коссера с центрально-симметричными частицами.

1. Введение

Для адекватного описания физико-механических свойств нанокристаллических сред [1, 2] возникает необходимость в построении математических моделей, учитывающих дискретный характер строения вещества, дополнительные степени свободы и геометрические характеристики частиц. Такие модели обеспечивают возможность установления взаимосвязи между эффективными модулями упругости среды и параметрами ее внутренней структуры. При построении моделей среда представляется регулярной решеткой, в узлах которой расположены тела конечных размеров [3, 4]. В отличие от материальных точек, тела обладают не только трансляционными, но и вращательными (ротационными) степенями свободы, обусловленными моментными взаимодействиями между частицами. Такая кинематическая схема существенно расширяет возможности моделирования наноматериалов. В работах [5, 6] подобные модели использовались для решения задач статического деформирования наноструктур. Динамическая модель среды с микроструктурой на основе квадратной решетки обсуждалась в работах [7–9]. В данной работе рассматривается двумерная динамическая модель нанокристаллической среды, представляющая собой гексагональную решетку (с более плотной упаковкой частиц, чем квадратная решетка) из жестких круглых частиц, обладающих двумя трансляционными и одной ротационной степенями свободы. Основными целями работы являются получение уравнений движения и выявление взаимосвязей между физико-механическими свойствами нанокристаллической среды и параметрами ее внутренней структуры.

2. Дискретная модель

Рассматривается двумерная гексагональная решетка, состоящая из однородных круглых зерен (наночастиц) массы M и диаметром d . В начальный момент времени они сосредоточены в узлах решетки, и расстояние между центрами масс соседних частиц вдоль оси Ox равно a (рис. 1).

Учитывается взаимодействие частицы с шестью ближайшими соседями по решетке, центры масс которых лежат в вершинах правильного шестиугольника, вписанного в окружность радиуса a (первая координационная сфера). Для моделирования центральных и нецентральных сил взаимодействия между зернами используется так называемая “пружинная” модель [10, 11]. Введены упругие пружины трех типов: “центральные” (соответствующая пружина на рис. 2 обозначена цифрой 1 и имеет жесткость k_0), “горизонтальные” (2 и 3 с жесткостью k_1) и “диагональные” (4 и 5 с жесткостью k_2) [7, 8, 12].

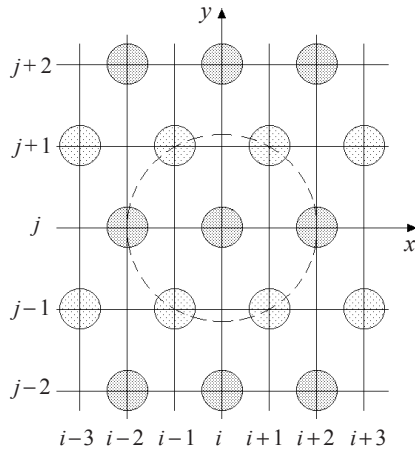


Рис. 1

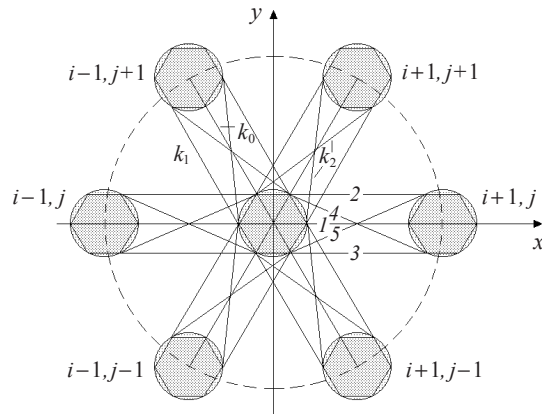


Рис. 2

Силловые взаимодействия при растяжении-сжатии материала определяются центральными и горизонтальными пружинами (см. рис. 2). Пружины с жесткостью k_1 осуществляют также передачу моментов при поворотах частиц. Диагональные пружины характеризуют силловые взаимодействия частиц при сдвиговых деформациях в материале. Следует отметить, что точки соединения пружин k_1 и k_2 совпадают с вершинами правильного шестиугольника, вписанного в частицу.

При движении в плоскости каждая частица имеет три степени свободы: смещение $\mathbf{U}_{i,j} = (u_{i,j}, w_{i,j})$ 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. 3). Кинетическая энергия частицы $N(i, j)$ равна

$$T_{i,j} = \frac{M}{2} (\dot{u}_{i,j}^2 + \dot{w}_{i,j}^2) + \frac{J}{2} \dot{\phi}_{i,j}^2. \quad (1)$$

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

Считается, что смещения частиц малы по сравнению с размерами элементарной ячейки. Взаимодействие зерен при отклонениях от положения равновесия определяется относительными удлинениями пружин. Потенциальная энергия час-

тицы $N = N(i, j)$, обусловленная ее взаимодействием с шестью ближайшими соседями по решетке $(i + p, j + q)$, где $p = \pm 1$ – сдвиг номера по горизонтальной оси, $q = 0, \pm 1$ – сдвиг номера по вертикальной оси, описывается формулой

$$V_{i,j} = \frac{1}{2} \sum_{(p,q)} (k_0 D_{1(p,q)}^2 + k_1 (D_{2(p,q)}^2 + D_{3(p,q)}^2) + k_2 (D_{4(p,q)}^2 + D_{5(p,q)}^2)). \quad (2)$$

Здесь $D_{l(p,q)}$ ($l=1, 2, 3, 4, 5$) – относительные удлинения пружин, соединяющих частицу N с ее соседями. Выражения для удлинений $D_{l(p,q)}$, вычисленные в приближении малости величин $\Delta u_{p,q} = (u_{i+p,j+q} - u_{i,j})/a \sim \Delta w_{p,q} = (w_{i+p,j+q} - w_{i,j})/a \sim \Phi_{i,j} \sim \varepsilon$ (здесь $\varepsilon \ll 1$ – мера деформации ячейки) и $\Phi_{p,q} = (\Phi_{i,j} + \Phi_{i+p,j+q})/2 = \Phi_{i,j} - 0,5a\Delta\Phi \ll \pi/2$, имеют вид:

$$\begin{aligned} D_{1(p,q)} &= \frac{a}{2} (p\Delta u_{p,q} + q\sqrt{3}\Delta w_{p,q}), & D_{1(p,0)} &= pa\Delta u_{p,0}, \\ D_{2,3(p,q)} &= \frac{a}{4} (2p\Delta u_{p,q} + 2q\sqrt{3}\Delta w_{p,q} \mp qd\sqrt{3}\Delta\Phi_{p,q}), \\ D_{2,3(p,0)} &= pa \left(\Delta u_{p,0} \pm \frac{d\sqrt{3}}{4}\Delta\Phi_{p,0} \right), \\ D_{4(p,p)} &= \frac{pa}{2l_{20}} ((a-2d)\Delta u_{p,p} + a\sqrt{3}\Delta w_{p,p} + ad\sqrt{3}\Phi_{p,p}), \\ D_{5(p,p)} &= \frac{pa}{2l_{20}} ((a+d)\Delta u_{p,p} + (a-d)\sqrt{3}\Delta w_{p,p} - ad\sqrt{3}\Phi_{p,p}), \\ D_{4,5(p,0)} &= \frac{a}{2l_{20}} (p(2a-d)\Delta u_{p,0} \pm d\sqrt{3}\Delta w_{p,0} \pm pad\sqrt{3}\Phi_{p,0}), \\ D_{4,5(\mp 1, \pm 1)} &= \frac{a}{2l_{20}} (\mp (a+d)\Delta u_{\mp 1, \pm 1} \pm (a-d)\sqrt{3}\Delta w_{\mp 1, \pm 1} + ad\sqrt{3}\Phi_{\mp 1, \pm 1}), \\ D_{4,5(\pm 1, \mp 1)} &= \frac{a}{2l_{20}} (\pm (a-2d)\Delta u_{\pm 1, \mp 1} \mp (a-d)\sqrt{3}\Delta w_{\pm 1, \mp 1} - ad\sqrt{3}\Phi_{\pm 1, \mp 1}), \end{aligned} \quad (3)$$

где $l_{20} = a^2 - ad + d^2$ – начальная длина пружин k_2 . В выражениях $D_{2,3}$ и $D_{4,5}$ верхние знаки символов \pm и \mp берутся для пружин вида 2 и 4, а нижние – для 3 и 5.

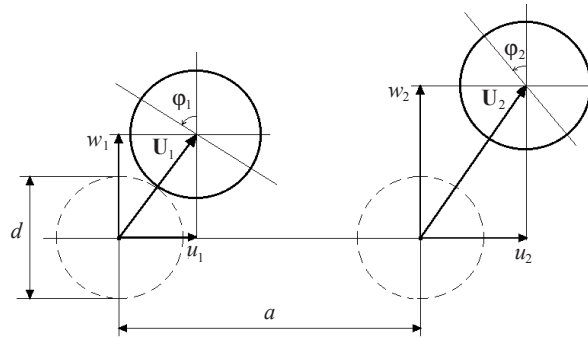


Рис. 3

Используя соотношения (2) и (3), находим выражение для потенциальной энергии, приходящейся на одну частицу, с точностью до слагаемых порядка ε^2 включительно:

$$V_{i,j} = B_1 \left((\Delta u_i)^2 + (\Delta w_j)^2 \right) + B_2 \left((\Delta u_j)^2 + (\Delta w_i)^2 \right) + \frac{d^2}{8} B_3 \left((\Delta \varphi_i)^2 + (\Delta \varphi_j)^2 \right) + B_4 (\Delta u_i \Delta w_j + \Delta u_j \Delta w_i) + B_5 (\Delta w_i \Phi_i - \Delta u_j \Phi_j) + B_5 \varphi_{ij}^2. \quad (4)$$

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 между поперечными и продольными смещениями и поворотами частиц. Коэффициенты B_1, \dots, B_5 , стоящие при этих слагаемых, явным образом выражаются через параметры микромоделей и константы упругостей пружин:

$$B_1 = \frac{9a^2}{8} \left(k_0 + 2k_1 + \frac{2(a^2 - ad) + d^2}{l_{20}^2} k_2 \right),$$

$$B_2 = \frac{3a^2}{8} \left(k_0 + 2k_1 + \frac{2(a^2 - ad) + 5d^2}{l_{20}^2} k_2 \right), \quad B_3 = \frac{9a^2}{8} \left(2k_1 + \frac{a^2}{l_{20}^2} k_2 \right), \quad (5)$$

$$B_4 = \frac{3a^2}{4} \left(k_0 + 2k_1 + \frac{2(a^2 - ad) - d^2}{l_{20}^2} k_2 \right), \quad B_5 = \frac{9a^2 d^2}{2l_{20}^2} k_2.$$

Дифференциально-разностные уравнения, описывающие динамику решетки, могут быть получены из уравнений Лагранжа 2-го рода

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

Здесь $L = \sum_{i,j} (T_{i,j} - V_{i,j})$ – функция Лагранжа, составленная из выражений (1) и (2), $q_{ij}^{(l)}$ – обобщенные координаты ($q_{ij}^{(1)} = u_{ij}$, $q_{ij}^{(2)} = w_{ij}$, $q_{ij}^{(3)} = \varphi_{ij}$), $\dot{q}_{ij}^{(l)}$ – обобщенные скорости. Получающиеся уравнения удобны для численного моделирования отклика системы на внешние динамические воздействия при широком спектре частот, вплоть до критических значений [13–15].

3. Длинноволновое приближение дискретной модели

Для сопоставления предлагаемой математической модели нанокристаллической среды с известными теориями твердого тела целесообразно перейти от дискретного описания к континуальному. 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:

$$u_{i+p,j+q}(t) = u(x + pa, y + qa, t) = u(x, y, t) + a \left(p \frac{\partial u}{\partial x} + q \frac{\partial u}{\partial y} \right) +$$

$$+ \frac{a^2}{2} \left(p^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2pq \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + q^2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \pm \dots \quad (6)$$

Аналогичные разложения используются и для функций $w_{i+p,j+q}(t)$ и $\varphi_{i+p,j+q}(t)$. В зависимости от количества удерживаемых слагаемых в (6) можно рассматривать различные приближения дискретной модели.

Если в разложениях (6) ограничиться учетом слагаемых лишь порядка $O(a)$, то двумерная плотность функции Лагранжа L (лагранжиан) примет вид:

$$L = \frac{\rho}{2} (u_t^2 + w_t^2 + R^2 \varphi_t^2) - \frac{\rho}{2} [c_1^2 (u_x^2 + w_y^2) + c_2^2 (w_x^2 + u_y^2) + R^2 c_3^2 (\varphi_x^2 + \varphi_y^2) + s^2 (u_x w_y + u_y w_x) + 2\beta (w_x - u_y) \varphi + 2\beta \varphi^2]. \quad (7)$$

С помощью вариационного принципа Гамильтона–Остроградского из лагранжиана (7) находится система дифференциальных уравнений первого приближения, описывающая динамические процессы в нанокристаллической среде:

$$\begin{aligned} u_{tt} &= c_1^2 u_{xx} + c_2^2 u_{yy} + s^2 w_{xy} - \beta \varphi_y, \\ w_{tt} &= c_2^2 w_{xx} + c_1^2 w_{yy} + s^2 u_{xy} + \beta \varphi_x, \\ R^2 \varphi_{tt} &= R^2 c_3^2 (\varphi_{xx} + \varphi_{yy}) + \beta (u_y - w_x - 2\varphi). \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь введены обозначения: $c_i = \sqrt{2B_i / \rho a^2}$ ($i = 1 \div 3$) – скорости распространения соответственно продольной, сдвиговой волн и волны микровращений $\varphi(x, y, t)$; $s = \sqrt{2B_4 / \rho a^2}$ – коэффициент связи между продольными и сдвиговыми деформациями; $\beta = B_5 / \rho a^2$ – параметр линейной связи микроповоротов с поперечной и продольной волнами; $R = \sqrt{J/M} = d / \sqrt{8}$ – радиус инерции микрочастиц среды относительно центра масс; $\rho = 2M / a^2 \sqrt{3}$ – плотность двумерной среды с гексагональной симметрией. Заметим, что последнее равенство указывает на то, что гексагональная решетка представляет собой более плотную упаковку по сравнению с квадратной решеткой, у которой $\rho = M/a^2$ [7, 8].

Система (8) описывает динамику среды с наноструктурой с учетом локальных взаимодействий зерен и отличается от уравнений классической теории упругости [16, 17] появлением дополнительного уравнения для волны микровращений (ротационной волны). При континуальном подходе подобное уравнение возникает как следствие закона сохранения момента количества движения, когда вводятся в рассмотрение внутренние моменты частиц среды [18]. Следует отметить, что третье уравнение (8) отличается от первых двух, так как имеет однородное в пространстве и осциллирующее с частотой $\omega_0 = \sqrt{2|\beta|/R^2}$ решение. Такую частоту называют минимальной или критической, поскольку при частотах $\omega \leq \omega_0$ волны микровращений не распространяются [7].

Коэффициенты уравнений (8) выражаются через силовые постоянные k_0, k_1, k_2 и диаметр частиц d :

$$\tilde{n}_1^2 = \frac{9}{4\rho} \left(k_0 + 2k_1 + \frac{2(a^2 - ad) + d^2}{a^2 - ad + d^2} k_2 \right),$$

$$\tilde{n}_2^2 = \frac{3}{4\rho} \left(k_0 + 2k_1 + \frac{2(a^2 - ad) + 5d^2}{a^2 - ad + d^2} k_2 \right), \quad \tilde{n}_3^2 = \frac{9}{4\rho} \left(2k_1 + \frac{a^2}{a^2 - ad + d^2} k_2 \right),$$

$$s^2 = \frac{3}{2\rho} \left(k_0 + 2k_1 + \frac{2(a^2 - ad) - d^2}{a^2 - ad + d^2} k_2 \right), \quad \beta = \frac{9d^2}{2\rho(a^2 - ad + d^2)} k_2. \quad (9)$$

Заметим, что следствием равенств (9) являются соотношения

$$s^2 = c_1^2 - c_2^2, \quad \beta = \frac{1}{2}(3\tilde{n}_2^2 - \tilde{n}_1^2), \quad (10)$$

свидетельствующие о том, что из 5 коэффициентов уравнений (8) лишь 3 являются независимыми. Первое равенство (10) выражает связь между константами, характерную для классической теории упругости изотропных сред. Из (10) также вытекает соотношение $2c_2^2 = s^2 + 2\beta$, которое выполняется в квадратной решетке с аналогичным набором кинематических переменных и подобной схемой силовых взаимодействий [7].

Анализ соотношений (9) показывает, что квадраты скоростей волн прямо пропорциональны константам взаимодействия k_0 , k_1 и k_2 . В отличие от классической теории упругости, в нанокристаллических (зернистых) средах имеет место зависимость скоростей распространения продольных (c_1), сдвиговых (c_2) и ротационных (c_3) волн от размера частиц. Так, на рис. 4 и 5 приведены зависимости отношений скоростей c_2/c_1 и c_3/c_1 от относительного размера частиц d/a при $k_1/k_0 = 0,1$ и трех значениях k_2/k_0 : 0,2, 0,5 и 0,9. Если функция c_2/c_1 монотонно возрастает с увеличением d/a , то c_3/c_1 имеет максимум при некотором значении d/a .

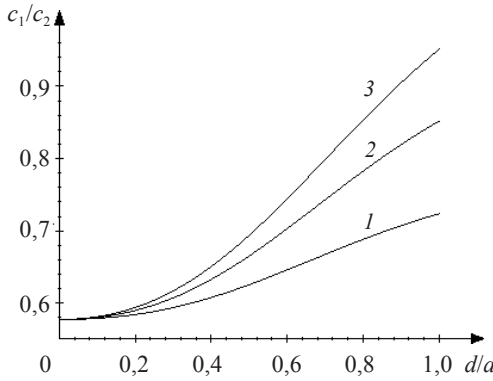


Рис. 4

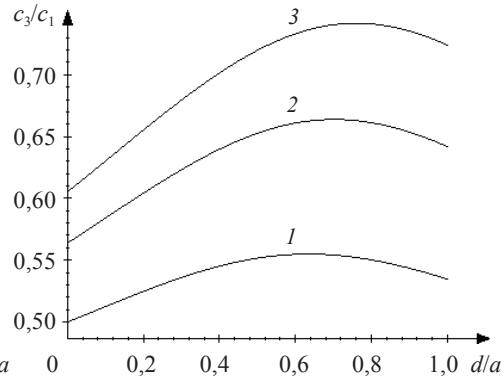


Рис. 5

На рис. 6 изображена монотонно возрастающая зависимость критической частоты $\omega_0 = \sqrt{2|\beta|/R^2} = 4\sqrt{|\beta|}/d$, нормированной на c_1/d , от размера зерна. Проведенный анализ также позволяет при известном размере наночастиц определить значения констант взаимодействия по заданному соотношению между скоростями поперечных и продольных волн (см. рис. 4) и использовать полученные данные для оценки скорости ротационной волны (см. рис. 5) и критической частоты (см. рис. 6). На рис. 4–6 кривые 1 соответствуют значению $k_2/k_0 = 0,2$, кривые 2 – значению $k_2/k_0 = 0,5$, кривые 3 – значению $k_2/k_0 = 0,9$.

В свою очередь, параметры силового взаимодействия частиц k_0 , k_1 и k_2 можно

выразить через макро-характеристики среды:

$$k_2 = \frac{\rho(a^2 - ad + d^2)}{9d^2}(3c_2^2 - c_1^2),$$

$$k_1 = \frac{\rho}{9}\left(2\tilde{n}_3^2 - \frac{\beta a^2}{d^2}\right), \quad k_0 = \frac{4\rho}{9}\left(\tilde{n}_1^2 - c_3^2 + \frac{\beta a^2}{2d^2}\right). \quad (11)$$

Таким образом, выражения (9), (10) и (11) устанавливают взаимно-однозначные соответствия между параметрами микромодели и макро-характеристиками зернистой среды. Эту взаимосвязь можно использовать, в частности, для диагностики наноматериалов по данным волновых экспериментов.

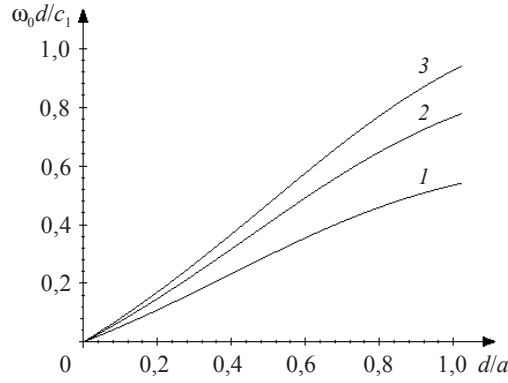


Рис. 6

4. Влияние микроструктуры на константы макроупругости

Исследуем влияние наноструктуры среды на эффективные константы макроупругости. В низкочастотной области, когда можно пренебречь вращательными степенями свободы частиц (то есть $\varphi = 0$), уравнения (8) совпадают с двумерными уравнениями Ламе для анизотропной среды с гексагональной симметрией [18]:

$$\rho_V u_{tt} = C_{11}u_{xx} + C_{66}u_{yy} + \frac{1}{2}(C_{11} + C_{12})w_{xy},$$

$$\rho_V w_{tt} = C_{66}w_{xx} + C_{11}w_{yy} + \frac{1}{2}(C_{11} + C_{12})u_{xy}. \quad (12)$$

Здесь $\rho_V = \rho/a$ – “объемная” плотность среды. Из сопоставления коэффициентов в уравнениях (8) и (12) находится связь между скоростями распространения продольной (c_1) и сдвиговой (c_2) волн, с одной стороны, и упругими постоянными второго порядка C_{11} , C_{12} и C_{66} , с другой:

$$c_1^2 = \frac{C_{11}}{\rho_V}, \quad c_2^2 = \frac{C_{66}}{\rho_V} = \frac{C_{11} - C_{12}}{2\rho_V}. \quad (13)$$

Используя соотношения (9) и (13), упругие постоянные можно выразить через параметры микроструктуры материала:

$$\begin{aligned}
C_{11} &= \frac{9}{4} \left(k_0 + 2k_1 + \frac{2(a^2 - ad) + d^2}{a^2 - ad + d^2} k_2 \right), \\
C_{12} &= \frac{3}{4} \left(k_0 + 2k_1 + \frac{2(a^2 - ad) - 7d^2}{a^2 - ad + d^2} k_2 \right).
\end{aligned} \tag{14}$$

Из (14) следует, что для среды, состоящей из материальных точек ($d = 0$), $C_{11}^0 = 9(k_0 + 2k_1 + 2k_2)/4 = 3C_{12}^0$. При ненулевых значениях размера зерен

$$\tilde{N}_{11} - 3\tilde{N}_{12} = \frac{18d^2}{a^2 - ad + d^2} k_2,$$

и, следовательно, при положительном параметре k_2 выполняется соотношение $C_{11} > 3C_{12}$. Однако для многих кристаллов с гексагональной симметрией $C_{11} < 3C_{12}$. Это возможно, если допустить, что силовая константа k_2 может принимать отрицательные значения. Последнее приводит к тому, что в выражении для потенциальной энергии (4) коэффициент B_5 при слагаемых с ротационными степенями свободы является отрицательным. Такая ситуация наблюдается, например, у молекулярных кристаллов [10]. Следует также отметить, что даже при отсутствии микроповоротов частиц модули макроупругости (14) сохраняют информацию о структуре среды, но воспользоваться этой информацией часто бывает непросто.

Из равенств (14) могут быть получены обратные зависимости:

$$\begin{aligned}
k_2 &= \frac{\rho_V a (1 - h + h^2)}{18h^2} (C_{11} - 3C_{12}), \\
k_0 + 2k_1 &= \frac{\rho_V a}{18} \left[7C_{11} + 3C_{12} + \frac{4(h-1)}{h^2} (C_{11} - 3C_{12}) \right],
\end{aligned} \tag{15}$$

где $h = d/a$ – относительный размер частицы. Нормированные параметры силовых взаимодействий определяются по формулам, вытекающим из равенств (15):

$$\begin{aligned}
\frac{k_1}{a} &= \frac{\rho_V}{18(K+2)} \left[7C_{11} + 3C_{12} + \frac{4(h-1)}{h^2} (C_{11} - 3C_{12}) \right], \\
\frac{k_2}{a} &= \frac{\rho_V (1 - h + h^2)}{18h^2} (C_{11} - 3C_{12}).
\end{aligned} \tag{16}$$

Здесь $K = k_0/k_1$ – отношение между центральными и нецентральными силами взаимодействия. Формулы (16) могут быть полезны для оценки величин силовых констант, входящих в дискретные модели нанокристаллических сред, если известны модули макроупругости и характерные размеры частиц.

Из (9) и (16) можно получить выражение для скорости волны микровращений:

$$c_3 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{(K+2)\rho_V} \left(7C_{11} + 3C_{12} + \frac{8h-6+K}{2h^2} (C_{11} - 3C_{12}) \right)}.$$

В качестве примера в таблице приведены вычисленные по известным данным [19] теоретические оценки значения скорости распространения ротационной волны

и ее критической частоты для некоторых кристаллов с гексагональной симметрией: кобальта (Co), кадмия (Cd), магния (Mg), цинка (Zn) и бериллия (Be). При вычислениях принималось $h = 0,9$ и $K = 10$.

Таблица

Параметры структуры		Кристалл				
		Co	Cd	Mg	Zn	Be
Плотность, кг/м ³ (экспериментальные данные)	ρ_V	8900	8642	1740	7140	1816
Упругие постоянные, 10 ⁹ Н/м ² (экспериментальные данные)	C_{11}	307,0	114,5	58,6	161,1	292,3
	C_{12}	165,0	39,5	25,0	34,2	26,7
Скорости волн, м/с	c_1	5873	3640	58,03	4750	12687
	c_2	2824	2083	3107	2981	8551
	c_3	1774	1467	2110	2184	6420
Нормированная критическая частота ротационных волн, м/с	$\omega_0 d$	9192	1361	6140	5725	21619
Нормированные параметры силовых взаимодействий между зернами, 10 ⁹ Н/м ²	k_0/a	126,71	42,68	22,84	55,62	93,58
	k_1/a	12,671	4,268	2,284	5,562	9,358
	k_2/a	-11,734	-0,250	-1,024	3,651	13,244

Из таблицы видно, что для всех рассмотренных материалов скорость ротационной волны является наименьшей, а критические частоты $\omega_0 = \sqrt{8|3\tilde{n}_2^2 - \tilde{n}_1^2|}/d$ лежат в гиперзвуковом диапазоне. Так, если принять, что размер кристаллита $d = 10$ нм = 10^{-8} м, то критические частоты лежат в интервале от $\omega_0 \approx 1,361 \cdot 10^{11}$ с⁻¹ (для кадмия) до $\omega_0 \approx 2,162 \cdot 10^{12}$ с⁻¹ (для бериллия). Следовательно, в звуковом и ультразвуковом диапазонах волнами микровращений можно пренебречь. Однако для исследования высокочастотных процессов их учет может оказаться принципиальным.

5. Сопоставление модели с континуумом Коссера

Лагранжиан двумерного изотропного и центрально-симметричного континуума Коссера имеет вид [4, 16]:

$$L = \frac{\rho_V}{2}(u_t^2 + w_t^2 + R^2\varphi_t^2) - \frac{1}{2}\left[(\lambda + 2\mu)(u_x^2 + w_y^2) + \left(\mu + \frac{\kappa}{2}\right)(w_x^2 + u_y^2) + \gamma(\varphi_x^2 + \varphi_y^2) + \left(\lambda + \mu - \frac{\kappa}{2}\right)(u_x w_y + u_y w_x) + 2\kappa(w_x - u_y)\varphi + 2\kappa\varphi^2\right]. \quad (17)$$

Здесь λ и μ – постоянные упругости Ламе, а γ и κ – параметры микроструктуры, которые в теорию вводятся феноменологически и должны быть определены из экспериментов.

Предлагаемая в работе теория позволяет вычислить эти постоянные через параметры микромоделей. Так, сопоставляя лагранжианы (7) и (17), находим, что

$$c_1^2 = \frac{\lambda + 2\mu}{\rho_V}, \quad c_2^2 = \frac{2\mu + \kappa}{2\rho_V}, \quad s^2 = \frac{2\lambda + 2\mu - \kappa}{2\rho_V}, \quad c_3^2 = \frac{\gamma}{\rho_V R^2}, \quad \beta = \frac{\kappa}{\rho_V},$$

а обратная зависимость имеет вид:

$$\lambda = \frac{\rho_V(\tilde{n}_1^2 - \tilde{n}_2^2)}{2}, \quad \mu = \frac{\rho_V(\tilde{n}_1^2 + \tilde{n}_2^2)}{4}, \quad \kappa = \rho_V\beta, \quad \gamma = \rho_V c_3^2. \quad (18)$$

С помощью выражений (18) и (9) упругие постоянные Коссера можно выразить через параметры микромодеи:

$$\lambda = \frac{3}{4} \left(\frac{k_0 + 2k_1}{a} + \frac{2(a^2 - ad) - d^2}{a^2 - ad + d^2} \frac{k_2}{a} \right), \quad \mu = \frac{3(k_0 + 2k_1 + 2k_2)}{4a}, \quad (19)$$

$$\kappa = \frac{9d^2}{2(a^2 - ad + d^2)} \frac{k_2}{a}, \quad \gamma = \frac{9}{4} \left(\frac{2k_1}{a} + \frac{a^2}{a^2 - ad + d^2} \frac{k_2}{a} \right).$$

Из равенств (19) вытекает соотношение $\lambda - \mu = \kappa/2$, указывающее на то, что в предлагаемой модели упругие постоянные λ и μ связаны через параметр κ , отвечающий за взаимодействие между микроповоротами частиц и сдвиговыми деформациями.

Соотношения (19) совместно с (16) позволяют получать количественные оценки коэффициентов, входящих в разложение внутренней энергии в теории Коссера, для различных материалов (см., например, табл.). Ранее проведение таких оценок было невозможно. Отметим, что похожие соотношения получены в работе [4], однако там не вводился размер частиц в явном виде, и потому зависимость материальных констант от него оставалась невыясненной.

6. Заключение

Разработана двумерная динамическая модель нанокристаллической среды. По структуре полученные уравнения (8) совпадают с уравнениями двумерного континуума Коссера. 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 скоростей продольной и поперечной волн от размеров зерен. Приведены количественные оценки, показывающие, что в реальных кристаллических средах скорость ротационных волн должна быть меньше скоростей трансляционных волн, а их критическая частота лежит в гиперзвуковой области. Для звуковых и ультразвуковых частот, когда можно пренебречь вращательными степенями свободы частиц, уравнения (8) вырождаются в уравнения Ламе для среды с гексагональной симметрией (12). При этом “память” о ее структуре остается в виде зависимостей между макроскопическими характеристиками среды и параметрами микромодеи (14).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 04-02-17156) и Фонда содействия отечественной науке.

Литература

1. Гусев, А.И. Нанокристаллические материалы / А.И. Гусев, А.А. Ремпель. – М.: Физматлит, 2001. – 224 с.
2. Кобаяси, Н. Введение в нанотехнологию. – Пер. с японск. / Н. Кобаяси. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2005. – 134 с.
3. Maugin, G.A. Nonlinear Waves in Elastic Crystals / G.A. Maugin – Oxford University Press, U.K., 1999.

4. *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.
5. Описание кристаллической упаковки частиц с учетом моментных взаимодействий / Е.А. Иванова [и др.] // *Изв. РАН. Механика твердого тела*. – 2003. – № 4. – С. 110–127.
6. Об определении упругих модулей наноструктур: теоретические расчеты и методика экспериментов / Е.А. Иванова [и др.] // *Изв. РАН. Механика твердого тела*. – 2005. – № 4. – С. 75–85.
7. *Павлов, И.С.* Упругие волны в двумерной зернистой среде / И.С. Павлов // *Проблемы прочности и пластичности: Межвуз. сб. / Н. Новгород: Изд-во ННГУ*. – 2005. – Вып. 67. – С. 119–131.
8. *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*. – 2006. – V. 43, N 20. – P. 6194–6207.
9. *Павлов, И.С.* Моделирование сред с микро- и наноструктурой двумерной решеткой из неточечных частиц / И.С. Павлов // IX Всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике. Аннот. докл. Т. III (Н. Новгород, 22–28 августа 2006). Нижний Новгород, ННГУ. – 2006. – С. 166.
10. *Китайгородский, А.И.* Молекулярные кристаллы. / А.И. Китайгородский. – М.: Наука, 1971. – 424 с.
11. *Mechanics of Micropolar Media* / Eds. O.Brulin and R.K.T. Hsieh. – World-Scientific, Singapore, 1982.
12. *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.
13. *Косевич, А.М.* Теория кристаллической решетки (физическая механика кристаллов) / А.М. Косевич. – Харьков: Вища школа, 1988. – 304 с.
14. *Potapov, A.I.* Nonlinear wave interactions in 1D crystals with complex lattice / A.I. Potapov, I.S. Pavlov, G.A. Maugin // *Wave Motion*. – 1999. – V. 29. – P. 297–312.
15. *Vasiliev, A.A.* Multi-field continuum theory for medium with microscopic rotations / A.A. Vasiliev, S.V. Dmitriev, A.E. Miroshnichenko // *Int. J. of Solids and Structures*. – 2005. – V. 42. – P. 6245–6260.
16. *Новацкий, В.* Теория упругости. Гл. 13. Теория несимметричной упругости / В. Новацкий. – М.: Мир, 1975.
17. *Седов, Л.И.* Механика сплошной среды / Л.И. Седов. – М.: Наука, 1970. Т.1. – 536 с.
18. *Такер, Дж.* Гиперзвук в физике твердого тела / Дж. Такер, В. Рэмpton. – М.: Мир, 1975.
19. *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.

[8.09.2006]

THE MATHEMATICAL MODEL FOR A NANOCRYSTALLINE MEDIUM WITH DENSE PACKING OF PARTICLES

I.V. Miloserdova, I.S. Pavlov, A.I. Potapov

A two-dimensional model for a nanocrystalline medium is considered that represents a hexagonal lattice consisting of elastically interacting round particles possessing translational and rotational degrees of freedom. Linear differential equations are derived in the long-wavelength approximation that describe propagation and interaction of waves of various types in such a medium. The interrelation between the macro-elasticity constants of the medium and the parameters of its microstructure is revealed. The dependence of elastic wave velocities on the sizes of nanoparticles is analyzed. Estimates for the velocity and the critical frequency of the microrotation wave in some hexagonal crystals are obtained. The developed continuum model is compared with the equations of the two-dimensional isotropic Cosserat continuum with centrally symmetric particles.