Труды СПбГТУ 458 (1995) 132–140

Изотропная часть нелинейных определяющих уравнений идеальной кристаллической решётки

А. М. Кривцов

Кристаллы по своей природе анизотропны. Однако реальные вещества чаще встречаются в виде поликристаллов, механические свойства которых осреднены по всем направлениям. Поэтому выделение изотропной части определяющих уравнений монокристаллов является необходимым шагом при построении теории поликристаллических веществ. Естественно, кроме изотропизации, требуется учёт эффектов, возникающих на границах монокристаллических областей, однако эти вопросы требуют отдельного рассмотрения. Кроме того, интерес к рассматриваемому вопросу вызван ещё и тем, что он позволяет значительно упростить определяющие уравнения монокристалла, сохраняя при этом имеющуюся нелинейную специфику.

1 Обозначения и определения

В качестве отсчётной конфигурации используется недеформируемый кристалл. Обозначим для отсчётной конфигурации: $\underline{r}$ — радиус-вектор произвольной точки кристалла; $\underline{a}_\alpha$ — радиус-вектор атома (узла) решётки, проведённый из рассматриваемого атома (α — номер узла); v_* — объём элементарной ячейки; $\overset{\circ}{\nabla}$ — набла-оператор Гамильтона. В актуальной конфигурации величины $\underline{r}$, $\underline{a}_\alpha$, v_* обозначим, соответственно: $\underline{R}$, $\underline{A}_\alpha$, V_*. Узлы решётки нумеруются относительно рассматриваемого атома, причём таким образом, чтобы выполнялось $\underline{a}_{-\alpha} = -\underline{a}_\alpha$. Модули векторов $\underline{a}_\alpha$, $\underline{A}_\alpha$ обозначим просто a_α, A_α.

Силу $\underline{F}_\alpha$, с которой на рассматриваемый атом действует атом под номером α, представим в виде

$$\underline{F}_\alpha = \Phi(A_\alpha^2)\,\underline{A}_\alpha\,,$$

где Φ — некоторая единая для всех α функция, равная отношению силы взаимодействия между атомами к расстоянию между ними.

В [1] из микроскопических соображений были получены определяющие уравнения идеальной кристаллической решётки при нелинейном упругом деформировании. Их можно представить в следующем обобщённом виде

$$\underline{\underline{T}} = \mathcal{F}(\underline{a}_\alpha, \underline{\underline{G}})\,,$$

где $\underline{\underline{T}}$ — тензор напряжений Коши, $\underline{\underline{G}} = (\overset{\circ}{\nabla}\underline{R})\cdot(\underline{R}\overset{\circ}{\nabla})$ — мера деформации Коши-Грина [2]. Под зависимостью от $\underline{a}_\alpha$ понимается зависимость от всего множества векторов $\underline{a}_\alpha$, определяющего структуру недеформированного кристалла. Условие изотропии определяющего уравнения может быть записано в виде

$$\mathcal{F}(\underline{\underline{Q}}\cdot\underline{a}_\alpha, \underline{\underline{G}}) = \mathcal{F}(\underline{a}_\alpha, \underline{\underline{G}})\,, \qquad \forall \underline{\underline{Q}}$$

Здесь $\underline{\underline{Q}}$ — произвольный тензор поворота. Под изотропной частью $\mathcal{I}(\mathcal{F})$ определяющих уравнений будем понимать среднее от $\mathcal{F}$ по всем $\underline{\underline{Q}}$. Более формальным определением изотропной части может служить изложенный ниже способ вычисления $\mathcal{I}(\mathcal{F})$.

В работе будут рассматриваться определяющие уравнения в двумерном и трёхмерном пространствах. Размерность пространства будем обозначать d: $\;d = 2, 3$.

2 Представление определяющих уравнений в виде ряда

Согласно [1], определяющие уравнения идеальной кристаллической решётки при нелинейном упругом деформировании имеют вид

$$\underline{\underline{T}} = \frac{1}{V_*}(\underline{R}\overset{\circ}{\nabla})\cdot\underline{\underline{\varPhi}}\cdot(\overset{\circ}{\nabla}\underline{R})\,, \qquad \underline{\underline{\varPhi}} = \frac{1}{2}\sum_\alpha \varPhi(\underline{a}_\alpha\underline{a}_\alpha\cdot\cdot\,\underline{\underline{G}})\,\underline{a}_\alpha\underline{a}_\alpha \tag{1}$$

Введём функцию U, являющуюся первообразной $\varPhi$: $U' = \varPhi$. Обозначим

$$W \overset{def}{=} \frac{1}{2}\sum_\alpha U_\alpha\,, \qquad U_\alpha \overset{def}{=} U(\underline{a}_\alpha\underline{a}_\alpha\cdot\cdot\,\underline{\underline{G}}) \tag{2}$$

Тогда $\underline{\underline{\varPhi}} = dW/d\underline{\underline{G}}$ и определяющие уравнения (1) можно записать в виде

$$\underline{\underline{T}} = \frac{1}{V_*}(\underline{R}\overset{\circ}{\nabla})\cdot\frac{dW}{d\underline{\underline{G}}}\cdot(\overset{\circ}{\nabla}\underline{R}) \tag{3}$$

Величину W будем называть силовым потенциалом, она пропорциональна удельной потенциальной энергии деформации э [2]: $W = 2v_*\text{э}$. Для построения изотропной составляющей определяющих уравнений будем использовать разложение силового потенциала в ряд в окрестности отсчётной конфигурации. Вопросы сходимости рядов в данной работе рассматривать не будем. Для разложения в ряд удобно использовать $\underline{\underline{\varepsilon}}$ — тензор конечной деформации Коши-Грина (далее — просто тензор деформации):

$$\underline{\underline{G}} = \underline{\underline{E}} + 2\underline{\underline{\varepsilon}} \quad \Rightarrow \quad \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha \cdot\cdot\, \underline{\underline{G}} = a_\alpha^2 + 2\, \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha \cdot\cdot\, \underline{\underline{\varepsilon}}$$

Разложим U_α в ряд по $\underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha \cdot\cdot\, \underline{\underline{\varepsilon}}$

$$U_\alpha = \sum_{n=0}^{\infty} U_{\alpha n} \, (\underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha \cdot\cdot\, \underline{\underline{\varepsilon}})^n \,, \qquad U_{\alpha n} \overset{def}{=} \frac{2^n}{n!} \, U^{(n)}(a_\alpha^2) \tag{4}$$

Здесь $U^{(n)}$ — производная n-го порядка. Подставив (4) в (2), получим

$$W = \frac{1}{2} \sum_\alpha \sum_{n=0}^{\infty} U_{\alpha n} \, (\underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha \cdot\cdot\, \underline{\underline{\varepsilon}})^n \tag{5}$$

Введём “тензорную степень” для тензора произвольного ранга $\underline{\underline{A}}$

$$\overset{n}{\otimes}\underline{\underline{A}} \overset{def}{=} \underbrace{\underline{\underline{A}}\,\underline{\underline{A}} \ldots \underline{\underline{A}}}_{n}, \qquad \overset{0}{\otimes}\underline{\underline{A}} \overset{def}{=} 1$$

Для $\underline{a}_\alpha$ будем использовать сокращённую запись: ${}^{n}\underline{\underline{a}}_\alpha \overset{def}{=} \overset{n}{\otimes}\underline{a}_\alpha$. Справедливо тождество

$$(\underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha \cdot\cdot\, \underline{\underline{\varepsilon}})^n = {}^{2n}\underline{\underline{a}}_\alpha \odot (\overset{n}{\otimes}\underline{\underline{\varepsilon}}) \tag{6}$$

Здесь знаком $\odot$ обозначена свёртка тензоров, определяемая соотношением

$${}^{n}\underline{\underline{A}} \odot {}^{n}\underline{\underline{B}} = \sum_{k_1, k_2, \ldots, k_n} A_{k_1 k_2 \ldots k_n} B_{k_n k_{n-1} \ldots k_1}$$

Здесь $A_{k_1 k_2 \ldots k_n}$, $B_{k_n k_{n-1} \ldots k_1}$ — проекции тензоров ${}^{n}\underline{\underline{A}}$, ${}^{n}\underline{\underline{B}}$ в ортонормированном базисе. Теперь, подставив (6) в (5), получим формулу разложения силового потенциала в ряд по степеням тензора деформации

$$W = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \sum_\alpha U_{\alpha n} \, {}^{2n}\underline{\underline{a}}_\alpha \right) \odot \left(\overset{n}{\otimes}\underline{\underline{\varepsilon}} \right) \tag{7}$$

Тензор напряжений, согласно (3), определяется через силовой потенциал формулой

$$\underline{\underline{T}} = \frac{1}{2V_*} (\underline{R}\, \overset{\circ}{\nabla}) \cdot \frac{dW}{d\underline{\underline{\varepsilon}}} \cdot (\overset{\circ}{\nabla} \underline{R})$$

Определим теперь изотропную часть соотношения (7). В силу линейности операции осреднения, силовой потенциал, соответствующий изотропной части (7), может быть представлен формулой

$$W = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \sum_\alpha U_{\alpha n} \, \mathcal{I}({}^{2n}\underline{\underline{a}}_\alpha) \right) \odot \left(\overset{n}{\otimes}\underline{\underline{\varepsilon}} \right) \tag{8}$$

Здесь $\mathcal{I}$ — оператор изотропизации (осреднения по всем возможным тензорам поворота). Введём $\underline{e}_\alpha$ — орт направления $\underline{a}_\alpha$: $\underline{a}_\alpha = a_\alpha \underline{e}_\alpha$. Обозначим: ${}^n\underline{\underline{e}}_\alpha \overset{def}{=} \overset{n}{\otimes} \underline{e}_\alpha$. Тогда

$$\mathcal{I}({}^{2n}\underline{\underline{a}}_\alpha) = a_\alpha^{2n}\, \mathcal{I}({}^{2n}\underline{\underline{e}}_\alpha) = a_\alpha^{2n}\, \mathcal{I}({}^{2n}\underline{\underline{e}})$$

Здесь $\underline{e}$ — некоторый произвольный орт. Теперь соотношение (7) запишем в виде

$$W = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \sum_\alpha U_{\alpha n}\, a_\alpha^{2n} \right) \mathcal{I}({}^{2n}\underline{\underline{e}}) \odot (\overset{n}{\otimes} \underline{\underline{\varepsilon}}) \tag{9}$$

Обозначим

$$U_n \overset{def}{=} \frac{1}{2} \sum_\alpha U_{\alpha n}\, a_\alpha^{2n}, \qquad k_n(\underline{\underline{\varepsilon}}) \overset{def}{=} \mathcal{I}({}^{2n}\underline{\underline{e}}) \odot (\overset{n}{\otimes} \underline{\underline{\varepsilon}}) \tag{10}$$

Тогда формула (9) принимает вид

$$W = \sum_{n=0}^{\infty} U_n\, k_n(\underline{\underline{\varepsilon}}) \tag{11}$$

Отметим, что коэффициенты U_n зависят только от длин векторов $\underline{a}_\alpha$ (то есть только от структуры кристалла), а k_n — только от $\underline{\underline{\varepsilon}}$ (то есть только от деформации).

Для практического использования формулы (11) необходимо вычислить свёртки $k_n(\underline{\underline{\varepsilon}}) = \mathcal{I}({}^{2n}\underline{\underline{e}}) \odot (\overset{n}{\otimes} \underline{\underline{\varepsilon}})$. В силу изотропии тензора $\mathcal{I}({}^{2n}\underline{\underline{e}})$ они должны быть функциями инвариантов тензора $\underline{\underline{\varepsilon}}$. Относительно легко выразить свёртки $k_n(\underline{\underline{\varepsilon}})$ через собственные числа тензора $\underline{\underline{\varepsilon}}$. Однако, сам по себе процесс вычисления собственных чисел весьма сложен, поэтому гораздо удобнее иметь формулы, выражающие $k_n(\underline{\underline{\varepsilon}})$ через главные инварианты тензора $\underline{\underline{\varepsilon}}$. Получению этих формул и будет посвящена дальнейшая часть работы.

3 Изотропные абсолютно симметричные тензоры

Запишем некоторый тензор $\underline{\underline{T}}$ ранга n в ортонормированном базисе $\underline{e}_k$:

$$\underline{\underline{T}} = \sum_{k_1, k_2, \ldots, k_n} T_{k_1 k_2 \ldots k_n}\, \underline{e}_{k_1} \underline{e}_{k_2} \ldots \underline{e}_{k_n}$$

Изомером тензора называется тензор, полученный из данного перестановкой индексов базисных векторов. Под абсолютно симметричным тензором будем понимать тензор, все изомеры которого равны между собой. Изотропные абсолютно симметричные тензоры сокращённо будем называть

ИАС тензорами. Очевидно, что тензор $\mathcal{I}({}^{2n}\underline{\underline{e}})$, который определяет свёртки $k_n(\underline{\varepsilon})$, является ИАС тензором.

Относительно нетрудно доказать следующие два утверждения.

Утверждение 1 *Для каждого ранга n существует единственный с точностью до скалярного множителя ИАС тензор.*

Утверждение 2 *Любой ИАС тензор нечётного ранга равен нулю.*

Рассмотрим тензор $\overset{n}{\otimes}\underline{\underline{E}}$. Он изотропен в силу изотропии $\underline{\underline{E}}$. Абсолютно симметричный тензор, равный сумме $\overset{n}{\otimes}\underline{\underline{E}}$ со всеми возможными его изомерами, обозначим ${}^{2n}\underline{\underline{J}}$. Согласно определению, ${}^{2n}\underline{\underline{J}}$ является ИАС тензором. Обозначим β_n — число различных изомеров тензора $\overset{n}{\otimes}\underline{\underline{E}}$. Несложно показать, что $\beta_n = (2n-1)!!$.

Найдём связь между $\mathcal{I}({}^{2n}\underline{\underline{e}})$ и ${}^{2n}\underline{\underline{J}}$. Согласно утверждению 1, должно выполняться

$$\mathcal{I}({}^{2n}\underline{\underline{e}}) = \gamma_n \, {}^{2n}\underline{\underline{J}}\,, \tag{12}$$

где γ_n — некоторый скалярный коэффициент. Найдём его. Тензор $\mathcal{I}({}^{2n}\underline{\underline{e}})$ можно вычислить по формуле

$$\mathcal{I}({}^{2n}\underline{\underline{e}}) = \frac{1}{S}\int_S {}^{2n}\underline{\underline{e}}'\, dS \tag{13}$$

Здесь S — сфера единичного радиуса в d-мерном пространстве, $\underline{e}'$ — радиус-вектор текущей точки сферы. Обозначим

$$\alpha_n \overset{def}{=} {}^{2n}\underline{\underline{e}} \odot \mathcal{I}({}^{2n}\underline{\underline{e}}) = \frac{1}{S}\int_S (\underline{e}\cdot\underline{e}')^{2n}\, dS \tag{14}$$

Умножив (12) на ${}^{2n}\underline{\underline{e}}$, получим: $\alpha_n = \gamma_n\beta_n$, откуда

$$\gamma_n = \frac{\alpha_n}{\beta_n} = \frac{\alpha_n}{(2n-1)!!}$$

Таким образом, вместо того, чтобы вычислять интеграл (13) от тензорной величины, достаточно найти один скалярный интеграл (14), что уже не представляет особых трудностей. В результате можно получить следующее выражение для γ_n

$$\gamma_n = \frac{1}{(2n+d-2)!!}\,; \qquad d = 2, 3$$

Здесь d — размерность пространства. Теперь формула (10) для свёрток k_n может быть записана уже в более конкретном виде:

$$k_n(\underline{\varepsilon}) = \gamma_n K_n(\underline{\varepsilon})\,, \qquad K_n(\underline{\varepsilon}) \overset{def}{=} {}^{2n}\underline{\underline{J}} \odot (\overset{n}{\otimes}\underline{\varepsilon})$$

4 Представление свёртки $K_n(\underline{\underline{\varepsilon}})$ через степенные инварианты тензора $\underline{\underline{\varepsilon}}$

Рассмотрим степенные инварианты тензора деформации

$$J_k \overset{def}{=} \operatorname{tr}(\underline{\underline{\varepsilon}}^k) = \underline{\underline{E}} \cdot\cdot\, \underline{\underline{\varepsilon}}^k\,; \qquad k = 1, 2, \ldots, n$$

Система инвариантов $J_1,\ J_2,\ \ldots J_n$ избыточна, любые d из них образуют полную систему инвариантов. Согласно определению тензора ${}^{2n}\underline{\underline{J}}$, свёртка $K_n(\underline{\underline{\varepsilon}}) = {}^{2n}\underline{\underline{J}} \odot (\overset{n}{\otimes}\underline{\underline{\varepsilon}})$ может быть представлена как полином от J_k. Любой одночлен, входящий в этот полином, представляет собой произведение некоторого натурального числового коэффициента на $\prod\limits_{k=1}^{n} J_k^{m_k}$. Здесь $m_k \geq 0$ — степень, в которой J_k входит в одночлен. При этом должно выполняться $\sum\limits_{k=1}^{n} k m_k = n$. Используя комбинаторные рассуждения, можно получить следующее значение для коэффициента при $\prod\limits_{k=1}^{n} J_k^{m_k}$:

$$(2n)!!\ \prod_{k=1}^{n} \frac{1}{m_k!\,(2k)^{m_k}}$$

Откуда получаем выражение для свёртки K_n $(n \geq 1)$

$$K_n(\underline{\underline{\varepsilon}}) = (2n)!! \sum_{\sum_{k=1}^{n} k m_k = n}\ \prod_{k=1}^{n} \frac{1}{m_k!} \left(\frac{J_k}{2k}\right)^{m_k} \tag{15}$$

Большой знак суммы означает суммирование по всем возможным наборам $m_k \geq 0$, удовлетворяющим соотношению $\sum\limits_{k=1}^{n} k m_k = n$. Отметим, что полученные формулы для K_n справедливы для пространства любой размерности. Выпишем результаты вычисления по формуле (15) для $n \leq 5$:

$$K_1 = J_1, \quad K_2 = J_1^2 + 2J_2, \quad K_3 = J_1^3 + 6J_1J_2 + 8J_3\,,$$
$$K_4 = J_1^4 + 12J_1^2J_2 + 12J_2^2 + 32J_1J_3 + 48J_4\,,$$
$$K_5 = J_1^5 + 20J_1^3J_2 + 60J_1J_2^2 + 80J_1^2J_3 + 160J_2J_3 + 240J_1J_4 + 384J_5$$

5 Производящая функция

Сравним формулу (15) со следующей формулой для коэффициентов ряда, полученного подстановкой одного степенного ряда в другой

$$\left\{ \sum_{p=1}^{\infty} C_p \left(\sum_{q=1}^{\infty} a_q x^q \right)^p \right\}_n = \sum_{\sum_{k=1}^{n} k m_k = n} m!\, C_m \prod_{k=1}^{n} \frac{a_k^{m_k}}{m_k!}\,, \qquad m_k \geq 0 \tag{16}$$

Здесь $m = \sum\limits_{k=1}^{n} m_k$. Фигурными скобками с индексом n обозначен коэффициент при x^n в результирующем ряде. Используя (16), можно представить свёртку $K_n(\underline{\underline{\varepsilon}})$ в виде

$$K_n = (2n)!! \left\{ \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p!} \left(\sum_{q=1}^{\infty} \frac{J_q}{2q} x^q \right)^p \right\}_n \tag{17}$$

Ряды в (17) легко сворачиваются, откуда получаем

$$K_n = (2n)!! \left\{ K(\underline{\underline{\varepsilon}} x) \right\}_n , \qquad K(\underline{\underline{\varepsilon}} x) \overset{def}{=} \exp\left(-\frac{1}{2} \operatorname{tr} \ln(\underline{\underline{E}} - \underline{\underline{\varepsilon}} x) \right) \tag{18}$$

Здесь tr — операция взятия следа тензора, а логарифм тензорного аргумента определяется рядом

$$\ln(\underline{\underline{E}} + \underline{\underline{A}}) \overset{def}{=} \sum_{q=1}^{\infty} \frac{(-1)^{q-1}}{q} \underline{\underline{A}}^q$$

Скалярная функция $K(\underline{\underline{\varepsilon}} x)$ является (с точностью до множителя при x) экспоненциальной производящей для величин K_n. Далее, для краткости, будем её просто называть производящей функцией. Рассмотрим производящую функцию подробнее. Она относительно легко может быть выражена через главные инварианты тензора $\underline{\underline{\varepsilon}}$, что нам позволит в конечном итоге выразить через главные инварианты и свёртки $K_n(\underline{\underline{\varepsilon}})$.

Запишем спектральное разложение тензора деформации:

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \sum_{k=1}^{d} \varepsilon_k \, \underline{e}_k \underline{e}_k \tag{19}$$

Здесь ε_k — собственные числа, $\underline{e}_k$ — собственные векторы, образующие ортонормированный базис. Подставим (19) в формулу (18) и тогда мы получим выражение производящей функции через собственные числа тензора $\underline{\underline{\varepsilon}}$

$$K(\underline{\underline{\varepsilon}} x) = \prod_{k=1}^{d} \frac{1}{\sqrt{1 - \varepsilon_k x}} \tag{20}$$

Рассмотрим характеристический полином тензора деформации

$$\mathcal{P}_{\underline{\underline{\varepsilon}}}(x) = \det(\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{E}} x) = \prod_{k=1}^{d} (\varepsilon_k - x) \tag{21}$$

Сравнивая (20) и (21), получаем

$$K(\underline{\underline{\varepsilon}} x) = \left((-x)^d \, \mathcal{P}_{\underline{\underline{\varepsilon}}}\left(\tfrac{1}{x}\right) \right)^{-\frac{1}{2}}$$

С другой стороны, характеристический полином может быть выражен через главные инварианты тензора $\underline{\underline{\varepsilon}}$, которые мы обозначим I_k. Имеем (здесь $I_0 \equiv 1$)

$$\mathcal{P}_{\underline{\underline{\varepsilon}}}(x) = \sum_{k=0}^{d} I_k \, (-x)^{d-k}$$

Откуда получаем

$$K(\underline{\underline{\varepsilon}} x) = \left(\sum_{k=0}^{d} I_k \, (-x)^k \right)^{-\frac{1}{2}} \tag{22}$$

Таким образом, мы выразили производящую функцию через главные инварианты тензора $\underline{\underline{\varepsilon}}$, а следовательно, у нас появилась возможность выразить через них величины K_n. Этому будет посвящён следующий параграф.

6 Представление свёртки $K_n(\underline{\underline{\varepsilon}})$ через главные инварианты тензора $\underline{\underline{\varepsilon}}$

Запишем формулу (22) в виде

$$K(\underline{\underline{\varepsilon}} x) = \left(1 - \sum_{k=1}^{d} (-1)^{k-1} I_k \, x^k \right)^{-\frac{1}{2}} \tag{23}$$

Справедливо разложение

$$(1-x)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{p=0}^{\infty} æ_n \, x^n \,, \qquad æ_p = \frac{(2p-1)!!}{(2p)!!}$$

Тогда (23) можно представить в виде

$$K(\underline{\underline{\varepsilon}} x) = \sum_{p=0}^{\infty} æ_p \left(\sum_{k=1}^{d} (-1)^{k-1} I_k \, x^k \right)^p \tag{24}$$

Применив теперь формулу (16) для подстановки ряда в ряд, и учитывая конечность внутреннего ряда в (24), получим

$$K_n(\underline{\underline{\varepsilon}}) = (2n)!! \sum_{\sum_{k=1}^{d} k m_k = n} (-1)^{n-m} \; m! \; æ_m \prod_{k=1}^{d} \frac{I_k^{m_k}}{m_k!}$$

Здесь $m_k \geq 0$, $m = \sum_{k=1}^{d} m_k$, $æ_m = (2m-1)!!/(2m)!!$. Это и есть искомая формула представления свёртки $K_n(\underline{\underline{\varepsilon}})$ через главные инварианты тензора $\underline{\underline{\varepsilon}}$.

Запишем её для $d = 2, 3$ — двумерного и трёхмерного пространств.

$$
\begin{aligned}
d = 2: \qquad & K_n = (2n)!! \sum_{p+2q=n} (-1)^q \, æ_{p+q} \, \frac{(p+q)!}{p!\, q!} \, I_1^p \, I_2^q \\
d = 3: \qquad & K_n = (2n)!! \sum_{p+2q+3s=n} (-1)^q \, æ_{p+q+s} \, \frac{(p+q+s)!}{p!\, q!\, s!} \, I_1^p \, I_2^q \, I_3^s
\end{aligned}
\tag{25}
$$

Здесь $p, \; q, \; s \geq 0$. Приведём результаты расчётов для $d = 3, \; n \leq 5$.

$$
\begin{aligned}
& K_1 = I_1, \quad K_2 = 3I_1^2 - 4I_2, \quad K_3 = 3\,(5I_1^3 - 12 I_1 I_2 + 8 I_3)\,, \\
& K_4 = 3\,(35 I_1^4 - 120 I_1^2 I_2 + 48 I_2^2 + 96 I_1 I_3)\,, \\
& K_5 = 15\,(63 I_1^5 - 280 I_1^3 I_2 + 240 I_1 I_2^2 + 240 I_1^2 I_3 - 192 I_2 I_3)
\end{aligned}
$$

7 Итоги

Выпишем полученные формулы для изотропной части определяющих уравнений кристаллической решётки

$$
\underline{\underline{T}} = \frac{1}{2V_*} (\underline{R}\, \overset{\circ}{\nabla}) \cdot \frac{dW}{d\underline{\underline{\varepsilon}}} \cdot (\overset{\circ}{\nabla} \underline{R})\,, \qquad W = \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n \, U_n \, K_n(\underline{\underline{\varepsilon}})\,;
$$

$$
\gamma_n = \frac{1}{(2n+d-2)!!}\,, \qquad U_n = \frac{2^{n-1}}{n!} \sum_{\alpha} U^{(n)}(a_\alpha^2)\, a_\alpha^{2n}\,, \qquad K_n(\underline{\underline{\varepsilon}}) = {}^{2n}\underline{\underline{J}} \odot (\overset{n}{\otimes} \underline{\underline{\varepsilon}})
$$

Здесь $d = 2, 3$ — размерность пространства; $U(r)$ — первообразная функции $\frac{1}{r} F(r)$, где $F(r)$ — сила взаимодействия между атомами; $U^{(n)}$ — производная порядка n. Свёртки $K_n(\underline{\underline{\varepsilon}})$ могут быть вычислены по формулам (15) через степенные инварианты J_k или по формулам (25) через главные инварианты I_k тензора $\underline{\underline{\varepsilon}}$ (тензора конечной деформации Коши-Грина).

Отметим, что коэффициенты U_n определяются исключительно геометрией кристаллической решётки и не зависят от деформации. Величины $K_n(\underline{\underline{\varepsilon}})$, наоборот, определяются исключительно деформацией и не зависят от геометрии решётки. Причём $K_n(\underline{\underline{\varepsilon}})$ есть известные функции инвариантов тензора $\underline{\underline{\varepsilon}}$. Таким образом, мы имеем явное выражение для силового потенциала W (пропорционального удельной потенциальной энергии деформации) через главные инварианты тензора деформации.

Литература

[1] Кривцов А.М. К теории сред с микроструктурой //Тр.СПбГТУ. N 443, 1992. С.9-17.

[2] Лурье А.И. Нелинейная теория упругости. М.: Наука, 1980. 512 с.