

Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела

А.М. Кривцов, Н.В. Кривцова

Аннотация

В данной работе излагаются основы метода частиц применительно к его использованию для решения задач механики деформируемого твердого тела. Описываются различные потенциалы взаимодействия; выделяются параметры, характеризующие законы взаимодействия; излагаются основные положения, позволяющие установить связь между микроскопическими параметрами моделирования и макроскопическими параметрами моделируемого объекта.

1 Введение

Нарушение континуальности материалов при сильном деформировании и разрушении создает серьезные сложности в описании подобных процессов в рамках классической механики сплошной среды. С другой стороны, развитие технологий, позволяющих изучать микроструктуру деформируемых тел, привело к накоплению фактов, свидетельствующих о чрезвычайно высокой роли внутренней структуры материала в процессах, сопровождающих его деформирование. Возросший в последнее десятилетие интерес к механическим свойствам нанобъектов потребовал еще более серьезного внимания к влиянию внутренней структуры материала на его механическое поведение. Особый интерес в этой области связан с появлением технологической возможности не только наблюдать и измерять элементы внутренней структуры твердых тел, но и оказывать влияние на эту структуру, а в случае нанотехнологий и создавать необходимые структурные элементы на микроуровне. В этой ситуации особую актуальность приобретает развитие аналитических и компьютерных моделей, которые бы могли адекватно описать механические свойства подобных сред и структур.

Бурное развитие вычислительной техники позволило на новом уровне вернуться к проблеме описания сред с микроструктурой, дополняя компьютерным моделированием решение проблем, недоступных для аналитического решения. Компьютерное моделирование становится важным звеном, занимающим промежуточное положение между теорией и реальным экспериментом. Основываясь на теоретических моделях, компьютерный эксперимент осуществляется в результате численного расчета, где сложность модели может сколь угодно увеличиваться по мере развития вычислительных средств, добиваясь все более точного соответствия условиям экспериментальных исследований. Таким образом, с одной стороны, повышаются возможности теоретических исследований, а с другой стороны, появляется возможность многократно дублировать дорогостоящие экспериментальные исследования. Не имея возможности существовать независимо от аналитической теории, создающей расчетную модель, и эксперимента, обеспечивающего соответствие между моделью и реальностью, компьютерное моделирование оказывается важным звеном, объединяющим теорию и эксперимент.

В данной ситуации большие перспективы могут быть связаны с использованием метода частиц, который в последние десятилетия широко применялся в различных областях

химии и физики, однако относительно мало использовался для моделирования механического поведения твердых тел. Являясь типичным методом компьютерного моделирования, по мере наращивания количественных возможностей вычислительной техники, он позволяет получать качественно новые результаты за счет количественной сложности компьютерной модели. Как принципиально дискретный метод, он не имеет недостатков континуальных моделей, проявляющихся при нарушении сплошности вещества или в результате дискретности его внутренней структуры.

Метод частиц состоит в представлении тела совокупностью взаимодействующих частиц (материальных точек или твердых тел), описываемых законами классической механики. Кроме того, существуют квантово-механические обобщения метода частиц, однако они выходят за рамки данной работы. Одним из наиболее хорошо разработанных вариантов этого метода является метод молекулярной динамики [1], на протяжении последних десятилетий интенсивно использующийся для исследования физико-химических свойств материалов. В классической молекулярной динамике в качестве частиц выступают атомы и молекулы, составляющие материал. В настоящее время потенциалы межатомного взаимодействия для важнейших материалов достаточно хорошо известны, что позволяет моделировать динамику молекулярных соединений с высокой степенью точности. В связи с открытием принципиально новых механических и физических свойств у материалов, имеющих структурные элементы нанометрового масштаба, чрезвычайно повысился интерес к моделированию материалов на микроскопическом масштабном уровне. Метод молекулярной динамики, при сегодняшнем развитии вычислительной техники, позволяет рассматривать объемы материала размером до кубического микрометра, что соответствует примерно миллиарду частиц (куб $1000 \times 1000 \times 1000$ частиц). Таким образом, практически любые наноструктуры могут быть смоделированы с чрезвычайно высокой степенью точности на современных многопроцессорных вычислительных системах. Поэтому данный метод является важнейшим теоретическим инструментом для разработки нанотехнологий в механике материалов.

Для описания больших объемов материала, а тем более, макроскопических объектов, уже невозможно придерживаться молекулярной концепции, и частицы должны представлять собой элементы более крупного масштабного уровня (мезоуровня), такие, как, например, зерна материала. Такой подход начал интенсивно развиваться в последние годы в механике как альтернатива континуальному описанию материалов при сильном деформировании и разрушении. Подобный метод часто, по традиции, также называют молекулярной динамикой, хотя более правильно говорить о динамике мезочастиц.

Несомненное преимущество метода частиц по сравнению с методами, основанными на концепции сплошной среды, заключается в том, что он требует значительно меньше априорных предположений о свойствах материала. Действительно, использование только простейшего потенциала взаимодействия (например, типа Леннарда-Джонса) позволяет моделировать такие сложнейшие эффекты, как пластичность, образование трещин, разрушение, температурное изменение свойств материала, фазовые переходы. Для описания каждого из этих эффектов в рамках сплошной среды требуется отдельная теория, в то время как при моделировании методом частиц эти эффекты получаются автоматически, в результате интегрирования уравнений движения. В частности, необратимость механических процессов достигается за счет перехода механической энергии длинноволновых движений материала в тепловую энергию хаотического движения частиц.

Потенциал взаимодействия в динамике частиц играет такую же роль, что и определяющие уравнения в механике сплошной среды. Однако структура потенциала неизмеримо проще, чем у определяющих уравнений, так как он представляет собой скалярную функцию расстояния, в то время как определяющие уравнения представляют собой операторы, в которые входят тензорные характеристики напряженного состояния и деформирования, а также термодинамические величины. Конкретный вид потенциала взаимодействия частиц

определяется из сравнения механических свойств компьютерного и реального материалов. Для простейших характеристик, таких как, например, упругие модули, это сравнение может быть проведено аналитически. В остальных же случаях соответствие устанавливается на основе тестовых компьютерных экспериментов.

Отметим, что для моделирования нелинейных процессов в сплошных средах применяется также семейство методов, в которых частицы используются как численный прием для интегрирования континуальных уравнений динамики сплошной среды, что отличает их от метода частиц, рассматриваемого в данной работе. Это метод частиц в ячейках М. Эванса и Ф. Харлоу, метод крупных частиц О. М. Белоцерковского и Ю. М. Давыдова, метод гидродинамики гладких частиц и другие методы. В перечисленных методах за основу берутся континуальные уравнения сплошной среды, а частицы играют роль дискретных элементов, позволяющих свести уравнения в частных производных к разностной системе обыкновенных дифференциальных уравнений. По своей сути эти методы являются континуальными, дискретность в них чисто вычислительная. Метод частиц и метод молекулярной динамики, рассматриваемые в данной работе, отличаются от перечисленных методов тем, что в них за основу берутся уравнения движения самих частиц (обыкновенные дифференциальные уравнения), определяемые балансом количества движения и потенциалом взаимодействия между частицами, то есть данные методы являются истинно дискретными. Отметим, однако, что, как было показано В. Хувером [2], при определенном выборе параметров моделирования, метод гидродинамики гладких частиц (континуальный) и метод молекулярной динамики (дискретный) могут давать идентичные траектории частиц. Все это свидетельствует о глубинном родстве перечисленных методов и возможной эквивалентности микро- и макроскопических подходов.

Ограниченное применение метода частиц в механике разрушения до настоящего времени связано с тем, что этот метод требует значительных компьютерных ресурсов. Интенсивное развитие многопроцессорных вычислительных систем в России, в частности разработка многопроцессорных вычислительных технологий под руководством А. В. Забродина в Институте прикладной механики им. М. В. Келдыша [3] делает возможным моделирование механических свойств материалов с высокой степенью достоверности. Метод частиц обладает тем преимуществом, что, в силу ограниченности радиуса взаимодействия между частицами, он допускает почти полное распараллеливание процессов, происходящих в смежных областях пространства. Это позволяет эффективно применять данный метод на многопроцессорных вычислительных системах, полностью реализуя их возможности по увеличению быстродействия и управлению большими объемами данных.

2 Уравнения движения

Рассматривается совокупность из N взаимодействующих материальных точек (частиц), находящихся также под действием некоторого внешнего силового поля. Уравнения движения частиц имеют вид

$$m\ddot{\underline{r}}_k = \sum_{n=1}^N \Phi(r_{kn}) \underline{r}_{kn} + \sum_{n=1}^N \Psi(r_{kn}, v_{kn}) \underline{r}_{kn} + \underline{\varphi}(\underline{r}_k) + \underline{\psi}(\underline{r}_k, \underline{v}_k), \quad (1)$$

где \underline{r}_k и \underline{v}_k — векторы положения и скорости k -ой частицы,

$$\underline{r}_{kn} \stackrel{\text{def}}{=} \underline{r}_k - \underline{r}_n, \quad \underline{v}_{kn} \stackrel{\text{def}}{=} \underline{v}_k - \underline{v}_n, \quad r_{kn} \stackrel{\text{def}}{=} |\underline{r}_{kn}|, \quad v_{kn} \stackrel{\text{def}}{=} |\underline{v}_{kn}|, \quad (2)$$

m — масса частицы, $\Phi(r)$ и $\Psi(r, v)$ описывают консервативную и неконсервативную составляющую взаимодействия между частицами, $\underline{\varphi}(\underline{r})$ и $\underline{\psi}(\underline{r}, \underline{v})$ описывают внешнее консервативное и

неконсервативное силовое поле. В уравнениях (1) учитывается только парное взаимодействие между частицами. Рассмотрим подробнее силовые факторы. Консервативная составляющая взаимодействия $\Phi(r)$ определяется следующим образом:

$$\Phi(r) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{r} f(r), \quad f(r) \stackrel{\text{def}}{=} -\Pi'(r), \quad (3)$$

где $f(r)$ — скалярная сила взаимодействия между частицами, $\Pi(r)$ — потенциал взаимодействия. Величина $\Phi(r)$ является важнейшим силовым фактором, во многих задачах по моделированию все остальные силовые факторы в уравнениях (1) отбрасываются, и рассматривается чисто консервативная система взаимодействующих частиц.

Неконсервативная составляющая взаимодействия $\Psi(r, v)$ предназначена для описания внутренней диссипации в материале, во многих задачах она может отсутствовать. Внешние силовые поля $\varphi(r)$ и $\psi(r, v)$ обычно используются для двух целей: для задания внешних массовых силовых воздействий (гравитационного, электромагнитного) и для задания силовых граничных условий. В первом случае указанные силы распределены во всем объеме пространства, где проводится расчет, во втором случае они локализованы вблизи некоторых поверхностей, часто являющихся границами области расчета. Кроме того, неконсервативное воздействие $\psi(r, v)$ часто используется для отвода энергии из системы посредством внешней диссипации, простейшим вариантом которой являются силы вязкого трения

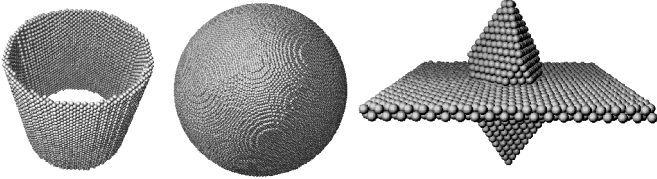
$$\psi(r, v) = -Bv, \quad B > 0. \quad (4)$$

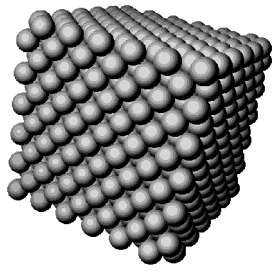
Данное воздействие также используется для поддержания определенного уровня теплового движения в системе, в этом случае коэффициент B в формуле (4) является знакопеременным и зависит от уровня тепловой энергии всей системы [4].

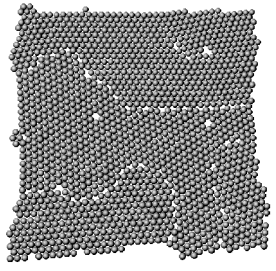
Моделирование методом частиц с математической точки зрения представляет собой решение задачи Коши для уравнений (1). Начальные условия включают в себя координаты и скорости каждой частицы. Генерация начальных условий является отдельной и весьма нетривиальной задачей, так как начальное расположение частиц и их скорости существенно влияют на свойства полученного компьютерного материала. Схематично различные виды начальных условий представлены на рисунке Рис. 2. Задание начальных условий происходит на двух масштабных уровнях, которые условно можно назвать макро- и микроскопическим. На макроскопическом уровне задается внешняя форма объектов моделирования (см. Рис. 2) и их макроскопические скорости. На микроуровне задается вид упаковки частиц (структура материала) и скорости хаотического движения (тепловое движение). Скорость каждой частицы в начальный момент времени складывается из макроскопической скорости, мало изменяющейся от частицы к частице, и случайной компоненты, получаемой при помощи генератора случайных чисел. Случайная компонента характеризуется заданным значением дисперсии или среднеквадратического отклонения, определяющим интенсивность хаотического (теплового) движения.

3 Интегрирование уравнений движения

Существует множество способов численного интегрирования уравнений движения (1). Специфика метода частиц состоит в необходимости интегрирования очень большого числа уравнений, что налагает определенные требования по экономии компьютерной памяти. Кроме того, при расчетах основное время уходит на вычисление силы, действующей на данную частицу — правая часть уравнений (1). Связано это с существенной нелинейностью силы взаимодействия и необходимостью суммирования большого числа слагаемых (прежде всего сил взаимодействия с соседними частицами). Указанное обстоятельство снижает эффективность

	Координаты		Скорости
Макро	Форма объектов 		Скорости объектов Длинные волны
Микро	Внутренняя структура Кристалл Поликристалл Аморфная структура		Тепловое движение





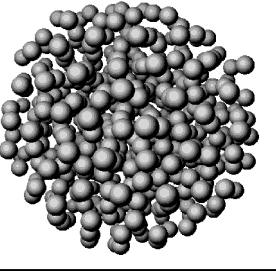


Рис. 1: Виды начальных условий.

методов, требующих на каждом шаге многократного вычисления правой части уравнений (1). С этим, в частности, связано то, что методы Рунге-Кутты редко применяется в методе частиц. Одним из наиболее простых и распространенных методов является алгоритм Верле [5], согласно которому вычисление положения частицы осуществляется по ее предыдущим двум положениям:

$$\underline{r}(t + \tau) = 2\underline{r}(t) - \underline{r}(t - \tau) + \underline{w}(t)\tau^2, \quad (5)$$

где τ — шаг интегрирования, $\underline{w}(t)$ — ускорение частицы, получаемое подстановкой рассчитанных значений $\underline{r}(t)$ в правую часть уравнений (1). Данная схема не требует вычисления скоростей и удобна, если в уравнениях (1) отсутствуют неконсервативные силы. Метод центральных разностей, видимо, впервые примененный в МД Виньярдом [6], определяется уравнениями

$$\begin{aligned} \underline{v}(t + \frac{1}{2}\tau) &= \underline{v}(t - \frac{1}{2}\tau) + \underline{w}(t)\tau, \\ \underline{r}(t + \tau) &= \underline{r}(t) + \underline{v}(t + \frac{1}{2}\tau)\tau \end{aligned} \quad (6)$$

и эквивалентен алгоритму Верле в том смысле, что исключение скоростей из (6) приводит к формуле (5). В отличие от алгоритма Верле, в методе Виньярда на каждом шаге определяются и координаты и скорости частиц. При этом скорости частиц определяются для промежуточных моментов времени. Существуют ряд модификаций метода Верле и центральных разностей, однако большинство из них при формально различной схеме интегрирования дает в точности одинаковые траектории частиц. Более точного расчета позволяют добиться методы типа предиктор-корректор, в частности метод Нордзика [7]. Методы предиктор-корректор позволяют получить значительно более высокую точность при малых шагах интегрирования, чем метод Верле и родственные ему методы. Однако, для достаточно больших шагов интегрирования, которые часто применяются в методе частиц, метод Верле может оказаться

точнее, чем метод Нордзика порядка 3, 4 и 5 [1].

При расчете методом частиц большая часть компьютерного времени уходит на вычисление сил взаимодействия между частицами. Для ускорения расчета потенциал взаимодействия обычно обрезается на некотором заданном расстоянии a_{cut} . Тогда, если расстояние между частицами превосходит a_{cut} , то считается, что взаимодействие между частицами пренебрежимо мало и оно не учитывается в расчетах. Однако, при большом количестве частиц, даже вычисление расстояния между ними потребует слишком большого времени, так как число необходимых операций пропорционально квадрату числа частиц. Поэтому для расчетов, производимых в данной работе, пространство разбивается на кубические ячейки с ребром a_{cut} (Рис. 3). Для частиц, находящихся в некоторой ячейке, рассматривается взаимодействие только с частицами из пограничных с ней ячеек. Таким образом удается добиться, что число операций оказывается пропорциональным числу частиц. Данный метод допускает эффективное распараллеливание при использовании многопроцессорных вычислительных систем. Вся область пространства разделяется между процессорами — Рис. 3, на каждом шаге интегрирования процессор проводит вычисление внутри отведенной ему области с захватом граничных ячеек из соседних областей, а затем происходит обмен информацией о частицах, находящихся в пограничных ячейках.

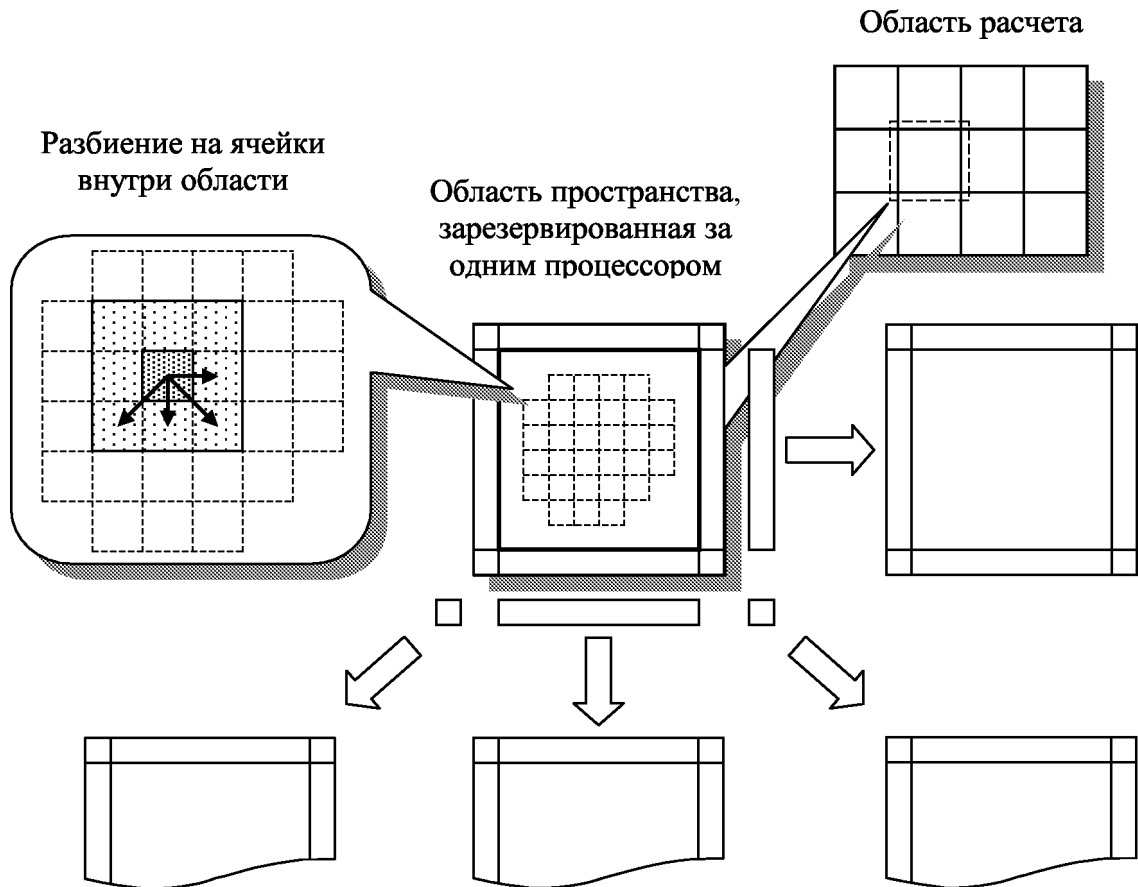


Рис. 2: Реализация расчета: разделение области расчета между процессорами и разбиение области, отведенной для каждого процессора, на ячейки.

4 Потенциалы взаимодействия

В литературе используется большое количество различных потенциалов взаимодействия. Ниже мы рассмотрим ряд наиболее часто встречающихся в литературе потенциалов, и кратко проанализируем их свойства, достоинства и недостатки. Будут введены безразмерные параметры, позволяющие эффективно оценивать свойства потенциалов, сравнивать их друг с другом, а также связывать параметры потенциалов с макроскопическими свойствами моделируемого объекта. Мы ограничимся рассмотрением только парных потенциалов, достаточно полный обзор многочастичных потенциалов имеется, например, в [8].

4.1 Определения

Рассмотрим произвольный парный потенциал $\Pi(r)$. Соответствующая ему сила взаимодействия $f(r)$ определяется как

$$f(r) \stackrel{\text{def}}{=} -\Pi'(r) \quad (7)$$

Обозначим σ , a и b расстояния, на которых обращается в ноль, соответственно, потенциал и его первая и вторая производные:

$$\Pi(\sigma) \equiv 0, \quad \Pi'(a) \equiv -f(a) \equiv 0, \quad \Pi''(b) \equiv -f'(b) \equiv 0. \quad (8)$$

Ниже будем рассматривать только потенциалы, для которых уравнения (8) имеют единственное решение, причем $\sigma < a < b$. Это выполняется для всех простейших потенциалов взаимодействия, таких как потенциал Леннарда-Джонса, Ми, Морзе и др. Примерный вид подобного потенциала и соответствующей ему силы изображен на Рис. 4.1. Основное свойство потенциала состоит в том, что при приближении ($r < a$) частицы отталкиваются, при удалении ($r > a$) — притягиваются, причем при значительном удалении ($r > 2a$) потенциал и сила взаимодействия стремятся к нулю. Расстояние a является равновесным расстоянием между частицами, расстояние b является критическим, при котором наступает разрыв межатомной связи. Отметим, что сказанное строго верно только для двухатомной молекулы и для кристалла, в котором учитывается взаимодействие только ближайших соседей. При учете влияния атомов следующих координационных сфер равновесное и критическое расстояния изменяются, но для потенциалов, достаточно быстро убывающих с расстоянием, эти изменения являются малыми по сравнению с a и b . Введем безразмерный параметр ε_* — относительное удлинение межатомной связи при ее разрыве:

$$\varepsilon_* \stackrel{\text{def}}{=} \frac{b - a}{a}. \quad (9)$$

Важными характеристиками взаимодействия являются

$$D \stackrel{\text{def}}{=} |\Pi(a)|, \quad f_* \stackrel{\text{def}}{=} |f(b)|, \quad (10)$$

— энергия связи и прочность связи (максимальная сила взаимодействия), соответственно.

4.2 Линеаризация

Жесткость межатомной связи в положении равновесия равна

$$C \stackrel{\text{def}}{=} \Pi''(a) \equiv -f'(a). \quad (11)$$

Назовем линеаризованной силой взаимодействия величину

$$f_L(r) = C(a - r). \quad (12)$$

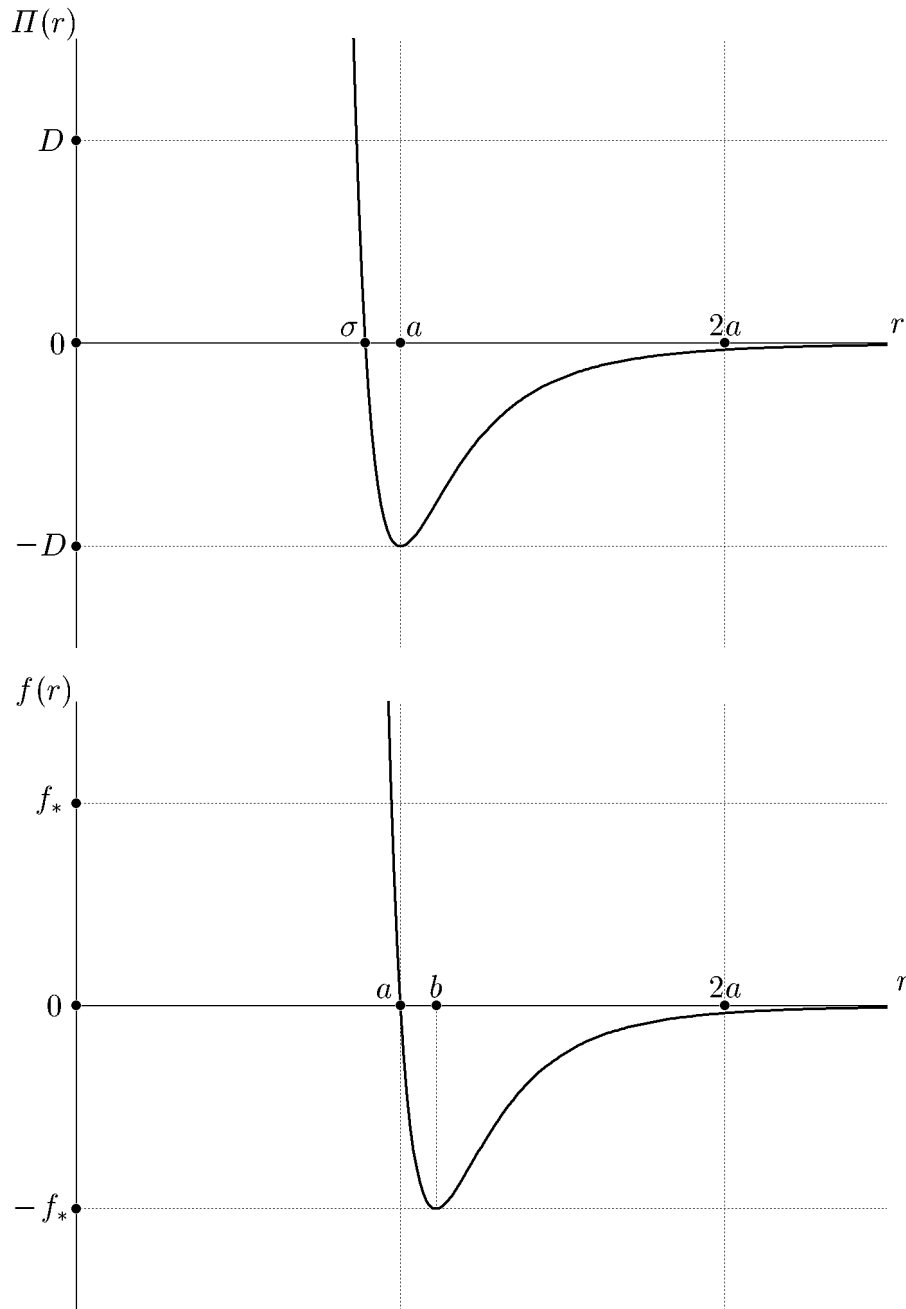


Рис. 3: Потенциал и сила взаимодействия.

Введем безразмерный параметр k_* , характеризующий нелинейность взаимодействия и равный отношению линейризованной силы взаимодействия к ее точному значению в точке разрыва

$$k_* \stackrel{\text{def}}{=} f_L(b)/f(b) = C(b-a)/f_*. \quad (13)$$

Отметим, что для межатомных взаимодействий, как правило, $k_* > 1$. Близость данного параметра к единице означает, что материал ведет себя физически линейным образом вплоть до разрушения. Если k_* сильно отличается от единицы, то это означает, что соответствующий материал даже при упругом деформировании требует использования физически нелинейных уравнений.

4.3 Динамические характеристики

Рассмотрим колебание частицы массы m под действием линеаризованной силы (12)

$$m\ddot{u} = -Cu, \quad u \stackrel{\text{def}}{=} r - a. \quad (14)$$

Обозначим

$$\omega_0 \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{C/m}, \quad T_0 = 2\pi\sqrt{m/C}. \quad (15)$$

Очевидно, ω_0 и T_0 — частота и период колебаний осциллятора (14). Для двухатомной молекулы, связанной взаимодействием Леннарда-Джонса, частота и период малых колебаний соответственно равны

$$\omega = \sqrt{2}\omega_0, \quad T = T_0/\sqrt{2}. \quad (16)$$

Для бесконечной одномерной цепочки максимальная частота и соответствующий ей минимальный период колебаний равны

$$\omega = 2\omega_0, \quad T = T_0/2. \quad (17)$$

Значения (17) соответствуют колебаниям, при которых соседние частицы движутся в противофазе, а частицы, расположенные через одну, совершают одинаковые движения.

Минимальная скорость, которую надо сообщить частице, находящейся в равновесии в неподвижном потенциальном поле (7), чтобы она могла уйти на бесконечность (скорость диссоциации), очевидно, равна

$$v_d = \sqrt{2D/m}. \quad (18)$$

Скорость распространения длинных волн в бесконечной цепочке определяется формулой

$$v_0 = \sqrt{a^2C/m} = a\omega_0. \quad (19)$$

Введем безразмерный параметр, характеризующий отношение скорости распространения длинных волн к скорости диссоциации

$$k_v \stackrel{\text{def}}{=} v_0/v_d. \quad (20)$$

4.4 Безразмерные параметры

Выше были введены три безразмерных параметра: ε_* — относительное удлинение межатомной связи при ее разрыве, k_* — мера нелинейности взаимодействия, k_v — отношение скорости распространения длинных волн к скорости диссоциации. В общем случае указанные безразмерные параметры связаны с потенциалом взаимодействия формулами

$$\varepsilon_* = \frac{b}{a} - 1, \quad k_* = (b - a) \frac{\Pi''(a)}{\Pi'(b)}, \quad k_v = \sqrt{-\frac{a^2\Pi''(a)}{2\Pi(a)}}; \quad (21)$$

где

$$a \stackrel{\text{def}}{=} r \Big|_{\Pi'=0}, \quad b \stackrel{\text{def}}{=} r \Big|_{\Pi''=0}. \quad (22)$$

Скорость убывания потенциала на расстоянии может быть охарактеризована безразмерным коэффициентом

$$k_2 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\Pi(a)}{\Pi(2a)}. \quad (23)$$

Для потенциала, быстро убывающего с расстоянием $k_2 \gg 1$. Коэффициент Грюнайзена бесконечной одномерной цепочки в окрестности положения равновесия определяется формулой [9]

$$\Gamma \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{a\Pi'''(a)}{2\Pi''(a)}. \quad (24)$$

Коэффициент Грюнайзена является безразмерным параметром, характеризующим нелинейность взаимодействия. В отличие от параметра k_* , он характеризует локальную нелинейность при данном значении $r = a$, в то время как параметр k_* характеризует глобальную нелинейность на участке $a < r < b$. Коэффициент Γ также определяет коэффициент теплового расширения кристалла. В более общем случае коэффициент Грюнайзена может рассматриваться как функция межатомного расстояния $\Gamma = \Gamma(r/a)$ или удельного объема кристалла.

В заключение приведем альтернативные формулы для параметров k_* и k_v :

$$k_* = \frac{C}{f_*} (b - a) = \frac{Ca}{f_*} \varepsilon_*, \quad k_v = a \sqrt{\frac{C}{2D}}. \quad (25)$$

Далее рассмотрим различные потенциалы взаимодействия и вычислим соответствующие им размерные и безразмерные параметры.

4.5 Потенциал Леннарда-Джонса

Потенциал и сила взаимодействия Леннарда-Джонса имеют вид

$$\Pi(r) = D \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right], \quad f(r) = \frac{12D}{a} \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{13} - \left(\frac{a}{r} \right)^7 \right]. \quad (26)$$

где D — энергия связи, a — длина связи (расстояние, на котором обращается в ноль сила взаимодействия). Прочность и жесткость связи, соответственно, равны

$$f_* = \frac{504}{169} \sqrt[6]{\frac{7}{13}} \frac{D}{a} \approx 2.7 \frac{D}{a}, \quad C = 72 \frac{D}{a^2}. \quad (27)$$

Безразмерные параметры: ε_* , k_* , k_v (21) для взаимодействия Леннарда-Джонса равны

$$\varepsilon_* = \sqrt[6]{\frac{13}{7}} - 1 \approx 0.109, \quad k_* = \frac{169}{7} \sqrt[6]{\frac{13}{7}} \varepsilon_* \approx 2.91, \quad k_v \equiv 6. \quad (28)$$

Разрыв связи достигается при $r = (1 + \varepsilon_*)a \approx 1.11a$ — таким образом, закон взаимодействия Леннарда-Джонса допускает 11% удлинение межатомной связи. Используя формулы (23) и (24), вычислим коэффициент k_2 , характеризующий скорость убывания потенциала на расстоянии, и коэффициент Грюнайзена Γ одномерной цепочки

$$k_2 = \frac{2^5}{1 - 2^{-7}} \approx 32, \quad \Gamma = \frac{21}{2} = 10.5. \quad (29)$$

Потенциал Леннарда-Джонса является двухпараметрическим, поэтому он имеет очень ограниченные возможности для вариации макроскопических параметров моделируемого им материала. Фактически, он позволяет удовлетворить значению только одного макроскопического параметра — это, например, модуль упругости или предел прочности в статике, скорость распространения продольных волн или откольная скорость в динамике. Отношение между указанными параметрами остается неизменным. С другой стороны, данный потенциал весьма точно описывает свойства ряда веществ (прежде всего, кристаллических инертных газов), а также достаточно точно описывает силы взаимодействия Ван-дер-Ваальса, играющие важную роль в твердых телах. К несомненному достоинству потенциала Леннарда-Джонса относится также его вычислительная простота, не требующая вычисления иррациональных и трансцендентных функций. Потенциал Леннарда-Джонса широко применяется как классический модельный потенциал, особенно в работах, в которых основной задачей является исследование общих физических закономерностей, а не получение точных количественных результатов.

Отметим, что в литературе часто встречается альтернативная форма записи формулы (26) для потенциала Леннарда-Джонса

$$\Pi(r) = 4D \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (30)$$

где $\sigma = a/\sqrt[6]{2}$ — расстояние, на котором обращается в ноль потенциал взаимодействия.

4.6 Потенциал Ми

Потенциал и сила взаимодействия Ми имеют вид

$$\Pi(r) = \frac{D}{n-m} \left[m \left(\frac{a}{r} \right)^n - n \left(\frac{a}{r} \right)^m \right], \quad f(r) = \frac{nm}{n-m} \frac{D}{a} \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{n+1} - \left(\frac{a}{r} \right)^{m+1} \right]. \quad (31)$$

Прочность и жесткость связи, соответственно, равны

$$f_* = mn \sqrt[n-m]{\frac{(m+1)^{m+1}}{(n+1)^{n+1}} \frac{D}{a}}, \quad C = mn \frac{D}{a^2}. \quad (32)$$

Безразмерные параметры ε_* , k_* , k_v (21) для взаимодействия Ми равны

$$\varepsilon_* = \sqrt[n-m]{\frac{n+1}{m+1}} - 1, \quad k_* = \sqrt[n-m]{\frac{(n+1)^{n+1}}{(m+1)^{m+1}} \varepsilon_*}, \quad k_v = \sqrt{\frac{mn}{2}}. \quad (33)$$

Используя формулы (23) и (24), вычислим коэффициент k_2 , характеризующий скорость убывания потенциала на расстоянии, и коэффициент Грюнайзена Γ одномерной цепочки

$$k_2 = \frac{n-m}{n2^{-m} - m2^{-n}}, \quad \Gamma = \frac{1}{2} (n+m+3). \quad (34)$$

Потенциал Ми является четырехпараметрическим, что дает значительно большую, чем для потенциала Леннарда-Джонса, свободу в подборе параметров. Однако относительная сложность зависимости свойств потенциала от параметров m , n и ряд других причин привели к достаточно редкому использованию данного потенциала при моделировании.

4.7 Потенциал Морзе

Потенциал и сила взаимодействия Морзе имеют вид

$$\Pi(r) = D \left[e^{-2\alpha(r-a)} - 2e^{-\alpha(r-a)} \right], \quad f(r) = 2\alpha D \left[e^{-2\alpha(r-a)} - e^{-\alpha(r-a)} \right]. \quad (35)$$

Согласно определениям (10) и (11), энергия связи для потенциала Морзе равна D , а максимальная сила взаимодействия f_* и жесткость связи C могут быть вычислены по формулам

$$f_* = (\alpha D)/2, \quad C = 2\alpha^2 D. \quad (36)$$

Безразмерные параметры ε_* , k_* , k_v (21) для взаимодействия Морзе равны

$$\varepsilon_* = \frac{1}{\alpha a} \ln 2, \quad k_* = 4 \ln 2, \quad k_v = \alpha a. \quad (37)$$

Используя формулы (23) и (24), вычислим коэффициент k_2 , характеризующий скорость убывания потенциала на расстоянии, и коэффициент Грюнайзена Γ одномерной цепочки

$$k_2 = \frac{e^{\alpha a}}{2 - e^{-\alpha a}}, \quad \Gamma = \frac{3}{2} \alpha a. \quad (38)$$

Приведем значения безразмерных параметров для частного случая $\alpha a = 6$, при котором потенциал Морзе оказывается близок к потенциалу Леннарда-Джонса

$$\varepsilon_* = \frac{1}{6} \ln 2, \quad k_* = 4 \ln 2, \quad k_v = 6, \quad k_2 = \frac{e^6}{2 - e^{-6}}, \quad \Gamma = 9. \quad (39)$$

Сравнение с соответствующими значениями для потенциала ЛД (Леннарда-Джонса) даны в таблице 4.7. Выбор $\alpha a = 6$ связан с тем, что в этом случае оказываются равными параметры k_v , что позволяет добиться для этих потенциалов равенства трех важнейших размерных параметров: равновесного расстояния a , жесткости связи C и энергии связи D . Из таблицы видно, что значения всех остальных безразмерных параметров, кроме k_2 , оказываются близки, что свидетельствует о близости свойств этих двух потенциалов. Параметр k_2 значительно больше для потенциала Морзе, что свидетельствует о его значительно более быстром затухании (у потенциала Морзе затухание экспоненциальное, в то время как у ЛД — степенное).

Потенциал	ε_*	k_*	k_v	k_2	Γ	ε_*/k_*
Леннарда-Джонса	0.109	2.91	6	32.3	10.5	0.0374
Морзе ($\alpha a = 6$)	0.116	2.77	6	202.	9	0.0417
Морзе / ЛД	1.06	0.95	1	6.3	0.86	1.12

Таблица 1: Сравнение значений безразмерных параметров для потенциалов Леннарда-Джонса и Морзе

Потенциал Морзе является трехпараметрическим, что позволяет удовлетворять значению двух независимых макроскопических параметров, таких как, например, модуль упругости и предел прочности в статике, скорость распространения продольных волн и откольная скорость в динамике. Простота и наглядность вычисления параметров потенциала делает его весьма удобным для использования. Данный потенциал широко применяется в литературе. Еще одним его достоинством по сравнению с потенциалом ЛД является более быстрое затухание на расстоянии, что удобно, если при моделировании необходимо учитывать взаимодействие только ближайших частиц. Недостатком потенциала Морзе по сравнению с ЛД является необходимость вычисления экспоненты и квадратного корня (для $r = \sqrt{T \cdot r}$), что может приводить к замедлению расчетов.

4.8 Модифицированный потенциал

Часто возникает необходимость изменить степень дальнего действия потенциала, сохранив при этом его основные свойства. Для этого может использоваться следующий модифицированный потенциал

$$\tilde{\Pi}(r) \stackrel{\text{def}}{=} \Pi(\kappa(r - a) + a), \quad (40)$$

где Π — некоторый произвольный потенциал взаимодействия. При $\kappa = 1$, исходный и модифицированный потенциалы совпадают, при $\kappa > 1$ модифицированный потенциал “сжат” по оси x по сравнению с исходным, при $\kappa < 1$ модифицированный потенциал “растянут”. Отметим, что $\tilde{\Pi}(a) \equiv \Pi(a)$, а следовательно сжатие и растяжение потенциала происходит относительно точки равновесия $r = a$. Соответствующая сила взаимодействия равна $\tilde{f}(r) \stackrel{\text{def}}{=} -\tilde{\Pi}'(r)$, следовательно

$$\tilde{f}(r) = \kappa f(\kappa(r - a) + a). \quad (41)$$

Очевидно, что $\tilde{f}(a) \equiv 0$. Приведем формулы, устанавливающие связь параметров модифицированного потенциала с параметрами исходного потенциала

$$\tilde{D} = D, \quad \tilde{f}_* = \kappa f_*, \quad \tilde{C} = \kappa^2 C; \quad (42)$$

$$\tilde{\varepsilon}_* = \frac{1}{\kappa} \varepsilon_*, \quad \tilde{k}_* = k_*, \quad \tilde{k}_v = \kappa k_v, \quad \tilde{k}_2 = \frac{\Pi(2a)}{\Pi(a+\kappa a)} k_2, \quad \tilde{\Gamma} = \kappa \Gamma. \quad (43)$$

Отметим, что модифицированный потенциал, полученный из потенциала Морзе, является потенциалом Морзе с измененным значением $\tilde{\alpha} = \kappa\alpha$. Модифицированный потенциал, полученный из потенциала Леннарда-Джонса при $\kappa = \alpha/6$, эквивалентен потенциалу Морзе, определяемому параметром α . Под эквивалентностью здесь понимается, что указанные потенциалы имеют одинаковое значение параметра k_v , а стало быть, у них могут совпадать три важнейших размерных параметра: равновесное расстояние a , жесткость связи C и энергии связи D . Таким образом, использование модифицированного потенциала позволяет обобщить взаимодействие Леннарда-Джонса, сделав его трехпараметрическим, по аналогии с потенциалом Морзе.

4.9 Сплайновые потенциалы

Для ускорения численных расчетов приходится ограничивать взаимодействие частиц некоторым радиусом обрезания потенциала. Часто просто полагается, что для $r > a_{\text{cut}}$, где a_{cut} — радиус обрезания, потенциал обращается в ноль. Однако это приводит к нарушению непрерывности в точке $r = a_{\text{cut}}$ для потенциала и его производных. Для устранения этой проблемы часто используются сплайновые потенциалы, некоторые из которых будут рассмотрены ниже.

Сплайновый потенциал в работе [10] определяется следующим образом:

$$\tilde{\Pi}(r) = \begin{cases} \Pi(r), & 0 < r \leq b; \\ -a_2 (a_{\text{cut}}^2 - r^2)^2 + a_3 (a_{\text{cut}}^2 - r^2)^3, & b < r \leq a_{\text{cut}}; \\ 0, & a_{\text{cut}} < r; \end{cases} \quad (44)$$

где

$$a_2 = \frac{5b^2 - a_{\text{cut}}^2}{8b^3 (a_{\text{cut}}^2 - b^2)} f_*, \quad a_3 = \frac{3b^2 - a_{\text{cut}}^2}{12b^3 (a_{\text{cut}}^2 - b^2)^2} f_*; \quad (45)$$

$$a_{\text{cut}}^2 = b^2 \left(5 - \sqrt{16 + \frac{24\Pi(b)}{bf_*}} \right). \quad (46)$$

Здесь величины b и f_* являются расстоянием разрыва связи и прочностью связи для потенциала $\Pi(r)$. Соответствующая сила взаимодействия

$$\tilde{f}(r) = \begin{cases} f(r), & 0 < r \leq b; \\ 2r(a_{\text{cut}}^2 - r^2)(3a_3(a_{\text{cut}}^2 - r^2) - 2a_2), & b < r \leq a_{\text{cut}}; \\ 0, & r > a_{\text{cut}}. \end{cases} \quad (47)$$

В работе [10] в качестве $\Pi(r)$ выбран потенциал Леннарда-Джонса, что дает $b \approx 1.11$ и $a_{\text{cut}} \approx 1.52$. Сплайновый потенциал (44), сохраняя значения исходного потенциала взаимодействия до точки разрыва $r = b$, обеспечивает его обращение в ноль при $r = a_{\text{cut}}$, сохраняя при этом непрерывность вплоть до 2-ой производной в точке $r = b$ и до первой производной в точке $r = a_{\text{cut}}$. Отметим, что требование непрерывности $\tilde{\Pi}'(r)$ и $\tilde{\Pi}''(r)$ в точке $r = b$ дает формулы для коэффициентов a_2 и a_3 (45). Безразмерные параметры ε_* , k_* , k_v и Γ для сплайнового потенциала $\tilde{\Pi}(r)$ остаются такими же, как для исходного $\Pi(r)$, изменяется только коэффициент k_2 , принимая значение $k_2 = \infty$. Существенное достоинство потенциала (44) состоит в том, что при моделировании он не требует извлечения квадратного корня при вычислении силы. Недостаток состоит в том, что он не позволяет менять максимальный радиус взаимодействия a_{cut} , так как он жестко связан с b соотношением (46). В результате

для двумерной ГПУ¹ решетки данный потенциал обеспечивает взаимодействие только с ближайшими соседями, но для трехмерной ГЦК² решетки в область взаимодействия попадает и вторая координационная сфера.

В работе [11] используется следующий сплайновый потенциал

$$\tilde{\Pi}(r) = \Pi(r) K(r), \quad (48)$$

где

$$K(r) = \begin{cases} 1, & 0 < r \leq b; \\ \left(1 - \left(\frac{r-b}{a_{\text{cut}}-b}\right)^2\right)^2, & b < r \leq a_{\text{cut}}; \\ 0, & r > a_{\text{cut}}. \end{cases} \quad (49)$$

Соответствующая сила взаимодействия имеет вид

$$\tilde{f}(r) = \begin{cases} f(r), & 0 < r \leq b; \\ M(r) \left(f(r) M(r) + 4 \frac{r-b}{(a_{\text{cut}}-b)^2} \Pi(r) \right), & b < r \leq a_{\text{cut}}; \\ 0, & r > a_{\text{cut}}, \end{cases} \quad (50)$$

где

$$M(r) = 1 - \left(\frac{r-b}{a_{\text{cut}}-b}\right)^2. \quad (51)$$

Достоинством данного потенциала, по сравнению с предыдущим, является независимость величин b и a_{cut} . Недостатком является отсутствие непрерывности второй производной при $r = b$. Кроме того, данный потенциал требует более длительного численного расчета: необходимо вычисление квадратного корня, а также функции $\Pi(r)$ при $b < r < a_{\text{cut}}$. Впрочем, вычислительные проблемы могут быть устранены путем табуляции силы взаимодействия. Как и в предыдущем случае, безразмерные параметры ε_* , k_* , k_v и Γ для данного сплайнового потенциала $\tilde{\Pi}(r)$ остаются такими же, как и для $\Pi(r)$, изменяется только коэффициент k_2 , принимая значение $k_2 = \infty$ при $a_{\text{cut}} \leq 2$.

5 Диссипация

Рассмотрим простейший способ введения диссипации в уравнения движения (4) — на каждую частицу действует сила вязкого трения $\underline{\psi}(\underline{v})$, пропорциональная скорости частицы \underline{v} :

$$\underline{\psi}(\underline{v}) = -B\underline{v}, \quad B > 0, \quad (52)$$

где B — коэффициент вязкого трения. Подобная диссипация часто используется при моделировании для отвода избыточной энергии из системы. Более гибкий контроль за энергией теплового движения может осуществляться при помощи так называемых термостатов [4]. Для того, чтобы выяснить связь коэффициента диссипации с другими параметрами системы, рассмотрим колебания материальной точки под действием линеаризованной упругой силы (12) и диссипативной силы (52)

$$m\ddot{x} + B\dot{x} + Cx = 0, \quad (53)$$

где x — смещение частицы от положения равновесия. Обозначим:

$$B_* \stackrel{\text{def}}{=} 2\sqrt{mC} = 2m\omega_0, \quad \beta \stackrel{\text{def}}{=} B/B_*. \quad (54)$$

¹Двумерная гексагональная плотноупакованная решетка, она же треугольная решетка.

²Гранецентрированная кубическая решетка.

Здесь B_* — значение B , обращающее в ноль дискриминант частотного уравнения, соответствующего (53). Коэффициент B_* представляет собой критическое значение коэффициента диссипации: при $B < B_*$ движения в системе (53) носят колебательный характер, при $B \geq B_*$ колебаний не возникает из-за слишком высокой диссипации. Сравнение коэффициента диссипации B с критическим значением B_* позволяет судить о величине диссипации в системе. Наиболее интересен, с точки зрения моделирования, случай малой диссипации $B \ll B_*$. Для двухатомной молекулы критическим значением коэффициента диссипации является $\sqrt{2}B_*$. Логарифмический декремент колебаний за период T_0 равен

$$\Lambda \stackrel{\text{def}}{=} \ln \frac{A(t)}{A(t+T_0)} = 2\pi\beta. \quad (55)$$

Здесь $A(t)$ — амплитуда колебаний. Аналогичный декремент, описывающий среднее уменьшение полной энергии³ системы (53) за период T_0 , очевидно, равен 2Λ . Уменьшение энергии системы в M раз происходит за время t_M равное

$$t_M = \frac{\ln M}{4\pi\beta} T_0. \quad (56)$$

Если взять $M = k_2 = \Pi(a)/\Pi(2a)$, что для потенциала Леннарда-Джонса дает $M \approx 32$, то тогда

$$t_M \approx \frac{5 \ln 2}{4\pi\beta} T_0 \approx \frac{0.28}{\beta} T_0. \quad (57)$$

Другая величина, характеризующая степень диссипации — длина l пробега свободной частицы до полной остановки при заданной начальной скорости v . Несложно получить, что величина l удовлетворяет формуле

$$l = \frac{mv}{B} = \frac{1}{2\beta} \frac{v}{v_0} a. \quad (58)$$

Согласно (58), если $B = B_*$, а начальная скорость частицы равна v_0 (скорости распространения длинных волн в одномерной цепочке), то длина пробега составит $a/2$.

6 Нахождение ряда макроскопических характеристик простых кристаллических решеток

Простейшей моделью твердого тела с микроструктурой является идеальный монокристалл. В силу его регулярности, многие соотношения, связывающие параметры микроструктуры с макроскопическими параметрами деформирования, удастся получить аналитически. С одной стороны, подобные аналитические соотношения представляют самостоятельный интерес для теоретического анализа деформирования кристаллических твердых тел. С другой стороны, они необходимы для постановки задач компьютерного моделирования процессов деформирования и разрушения методом частиц, так как в основе этого метода лежит представление твердого тела с помощью различных упаковок частиц, из которых монокристаллические являются наиболее широко используемыми. Получим выражение некоторых важнейших макроскопических характеристик (модули упругости и скорости распространения длинных волн) кристаллических упаковок через микроскопические параметры — массу частицы, равновесное расстояние и жесткость связи. Данные характеристики будут получаться как для монокристаллических структур, так и для осредненных соотношений упругости, соответствующих поликристаллам.

³Потенциальная энергия в положении равновесия считается равной нулю.

6.1 Общие уравнения

Тензор жесткости простой кристаллической решетки имеет вид [12, 13]

$$\underline{\underline{C}} = \frac{1}{2V_0} \sum_{\alpha} \left(\frac{1}{a_{\alpha}^2} \Pi''(a_{\alpha}) - \frac{1}{a_{\alpha}^3} \Pi'(a_{\alpha}) \right) \underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha}, \quad (59)$$

где \underline{a}_{α} — радиус-вектор атома (узла) решетки, проведенный из рассматриваемого атома (α — номер узла); a_{α} — модуль \underline{a}_{α} ; функция Π представляет собой потенциал взаимодействия между частицами; V_0 — объем элементарной ячейки; $\underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha}$ — тензор четвертого ранга, представляющий собой тензорное произведение четырех векторов \underline{a}_{α} (тетрада). Узлы решетки нумеруются относительно рассматриваемого атома, причем таким образом, чтобы выполнялось $\underline{a}_{-\alpha} = -\underline{a}_{\alpha}$. Согласно (59), тензор жесткости простой кристаллической решетки абсолютно симметричен, то есть симметричен относительно любой перестановки входящих в тетрады векторов, а стало быть, компоненты тензора жесткости симметричны относительно произвольной перестановки индексов. Если ограничиться взаимодействием только ближайших соседей по кристаллической решетке, то тогда формула (59) существенно упростится

$$\underline{\underline{C}} = \frac{a^2 C}{2V_0} \sum_{\alpha} n_{\alpha} n_{\alpha} n_{\alpha} n_{\alpha}, \quad (60)$$

где $C \stackrel{\text{def}}{=} \Pi''(a)$ — жесткость межатомной связи (11), $n_{\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} \underline{a}_{\alpha}/a_{\alpha}$. Модуль объемного сжатия материала равен

$$K \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{d^2} \underline{E} \cdot \underline{\underline{C}} \cdot \underline{E} = \frac{M a^2 C}{2 d^2 V_0}, \quad (61)$$

где M — координационное число решетки (число ближайших соседей у каждого атома), d — размерность пространства (1, 2 или 3). Коэффициенты жесткости (проекции тензора жесткости (60) в произвольном ортонормированном базисе) могут определяться по формулам

$$\begin{aligned} C_{1111} &= \frac{a^2 C}{2V_0} \sum_{\alpha} (n_{\alpha} \cdot \underline{e}_1)^4, & C_{1122} &= \frac{a^2 C}{2V_0} \sum_{\alpha} (n_{\alpha} \cdot \underline{e}_1)^2 (n_{\alpha} \cdot \underline{e}_2)^2, \\ C_{1112} &= \frac{a^2 C}{2V_0} \sum_{\alpha} (n_{\alpha} \cdot \underline{e}_1)^3 (n_{\alpha} \cdot \underline{e}_2). \end{aligned} \quad (62)$$

Напомним, что коэффициенты симметричны относительно произвольной перестановки индексов, поэтому формулы для остальных коэффициентов могут быть получены из приведенных выше путем замены или перестановки индексов. Уравнение распространения упругих волн

$$\rho \ddot{\underline{u}} = \nabla \cdot (\underline{\underline{C}} \cdot \nabla \underline{u}), \quad (63)$$

где ρ — плотность материала, \underline{u} — перемещение точек среды. Очевидно $\rho = m/V_0$, где m — масса частицы. Из уравнения (63) несложно получить скорости распространения волн в среде

$$v_1^2 = \frac{C_{1111}}{\rho} = \frac{1}{2} v_0^2 \sum_{\alpha} (n_{\alpha} \cdot \underline{e}_1)^4, \quad v_{12}^2 = \frac{C_{1122}}{\rho} = \frac{1}{2} v_0^2 \sum_{\alpha} (n_{\alpha} \cdot \underline{e}_1)^2 (n_{\alpha} \cdot \underline{e}_2)^2, \quad (64)$$

где v_1 — скорость продольных волн v_1 в направлении \underline{e}_1 , а v_{12} — скорость волн сдвига в плоскости $(\underline{e}_1, \underline{e}_2)$.

Изотропный тензор $\underline{\underline{C}}_0$, соответствующий тензору жесткости (60), определяется формулой [12]

$$\underline{\underline{C}}_0 = G_0 \underline{\underline{J}}, \quad G_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{M a^2 C}{2d(d+2)V_0}, \quad \underline{\underline{J}} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k, n=1}^d (\underline{e}_k \underline{e}_k \underline{e}_n \underline{e}_n + \underline{e}_k \underline{e}_n \underline{e}_k \underline{e}_n + \underline{e}_k \underline{e}_n \underline{e}_n \underline{e}_k), \quad (65)$$

где $\underline{\underline{J}}$ — простейший изотропный абсолютно симметричный тензор 4-го ранга, e_k — векторы ортонормированного базиса, коэффициент G_0 связан с модулем объемного сжатия материала соотношением $G_0 = \frac{d}{d+2} K$ (модуль объемного сжатия, разумеется, одинаков для $\underline{\underline{C}}$ и $\underline{\underline{C}}_0$). Тензор (65) получен из тензора (60) путем осреднения по всем пространственным направлениям. Тензор жесткости может быть изотропным в силу симметрии решетки, для поликристаллического материала или приближенно в случае слабой анизотропии. В случае изотропии формулы (62), с учетом (65), принимают вид

$$C_{1111} = 3G_0, \quad C_{1122} = G_0, \quad C_{1112} = 0. \quad (66)$$

Соотношения упругости изотропного материала имеют вид

$$\underline{\underline{\tau}} = \underline{\underline{C}}_0 \cdot \underline{\underline{\varepsilon}} = G_0 (\text{tr} \underline{\underline{\varepsilon}} \underline{\underline{E}} + 2\underline{\underline{\varepsilon}}), \quad (67)$$

где $\underline{\underline{\tau}}$ — тензор напряжений, $\underline{\underline{\varepsilon}}$ — тензор деформаций. Из (67), в частности, следует, что ранее введенный коэффициент G_0 в точности равен модулю сдвига изотропного материала, а модуль Юнга и коэффициент Пуассона в случае изотропии, соответственно, равны

$$E_0 = 2 \frac{d+2}{d+1} G_0 = \frac{2d}{d+1} K, \quad \nu_0 = \frac{1}{d+1}. \quad (68)$$

Скорости распространения волн в изотропном материале

$$v_l = \sqrt{\frac{3\mathcal{M}}{2d(d+2)}} v_0, \quad v_s = \frac{1}{\sqrt{3}} v_l, \quad (69)$$

где $v_l \equiv v_1$, $v_s \equiv v_{12}$ — соответственно, скорости продольных волн и сдвиговых волн (64).

6.2 Плотнупакованные решетки

В качестве примера рассмотрим три наиболее часто встречающиеся плотноупакованные решетки, соответствующие пространствам размерности $d = 1, 2, 3$: одномерная цепочка, треугольная (ГПУ) решетка в двумерном пространстве и трехмерная ГЦК решетка. Отметим, что для одномерного и двумерного случая могут использоваться формулы (65)–(69), так как соответствующие тензоры жесткости изотропны. Трехмерная ГЦК решетка анизотропна, для нее будем выделять следующие направления: вдоль оси симметрии четвертого порядка (вдоль ребра кубической подрешетки), вдоль оси изотропии⁴ (вдоль диагонали кубической подрешетки), любое направление в плоскости изотропии (перпендикулярное оси изотропии).

Несложно убедиться, что координационное число и объем элементарной ячейки для рассматриваемых решеток определяются соотношениями

$$\mathcal{M} = d(d+1), \quad V_0 = \frac{\sqrt{5-d}}{2} a^d, \quad (70)$$

что позволяет получить явное выражение для коэффициента объемного сжатия, модуля Юнга, коэффициента Пуассона и скорости продольных волн

$$K = \frac{(d+1)}{d\sqrt{5-d}} C a^{2-d}, \quad E = \frac{2d}{d+1} K, \quad \nu = \frac{1}{d+1}, \quad v_l = \sqrt{\frac{3(d+1)}{2(d+2)}} v_0. \quad (71)$$

⁴Указанная ось изотропии, вообще говоря, является осью симметрии 3-го порядка, однако симметрия 3-го порядка в данном случае приводит к трансверсальной изотропии тензора жесткости

Формула для K справедлива для любой из рассматриваемых решеток, остальные формулы справедливы для одномерной и двумерной решеток, а также для изотропной составляющей трехмерной ГЦК решетки (то есть могут приближенно использоваться для определения свойств поликристалла, состоящего из ГЦК зерен). На основании полученных выше формул в таблице 2 сведены значения некоторых безразмерных механических характеристик для различных кристаллических решеток. В таблице показаны значения скоростей продольных v_l и сдвиговых v_s волн по отношению к скорости распространения волн в одномерной цепочке v_0 . Кроме того, в таблице приведены отношения модуля Юнга к коэффициенту объемного сжатия E/K и значения коэффициента Пуассона ν . В колонке “направление” указано: для скоростей — направление, в котором распространяется волна⁵; для модулей упругости — направление приложения нагрузки. В строке ГЦК₀ приведены свойства материала, отвечающего изотропной части тензора жесткости ГЦК решетки.

d	Решетка	Направление	v_l/v_0	v_s/v_0	E/K	ν
1	Цепочка	Любое	1.00	—	1.00	—
2	ГПУ	Любое	1.06	0.61	1.33	0.33
3	ГЦК ₀	Любое	1.10	0.63	1.50	0.25
3	ГЦК	Ось 4-го порядка	1.00	0.71	1.00	0.33
3	ГЦК	В плоскости изотропии	1.12	0.65	1.61	0.23
3	ГЦК	Ось изотропии	1.15	0.58	1.80	0.20

Таблица 2: Значения некоторых механических характеристик плотноупакованных решеток.

7 Равновесное состояние кристаллической решетки

Для задания равновесной начальной конфигурации при моделировании требуется знать равновесное расстояние между частицами в кристаллической упаковке. Если убывание силы взаимодействия недостаточно быстро для того, чтобы взаимодействием с частицами, расположенными на 2-ой координационной сфере, можно было полностью пренебречь, то тогда это расстояние отличается от величины a (расстояния обращения в ноль силы взаимодействия). Покажем, каким образом это равновесное расстояние может быть определено и рассчитаем его для некоторых простейших случаев.

Тензор напряжений в простой кристаллической решетке имеет вид [12, 13]

$$\underline{\underline{T}} = -\frac{1}{2V_0} \sum_{\alpha} \frac{1}{a_{\alpha}} f(a_{\alpha}) \underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha}, \quad (72)$$

где \underline{a}_{α} — радиус-вектор атома (узла) решетки, проведенный из рассматриваемого атома (α — номер узла); a_{α} — модуль \underline{a}_{α} ; функция $f(r) \stackrel{\text{def}}{=} -\Pi'(r)$ представляет собой силу взаимодействия между частицами (притяжение отрицательно); V_0 — объем элементарной ячейки; $\underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha}$ — тензор второго ранга, представляющий собой тензорное произведение двух векторов \underline{a}_{α} (диада). Узлы решетки нумеруются относительно рассматриваемого атома, причем таким образом, чтобы выполнялось $\underline{a}_{-\alpha} = -\underline{a}_{\alpha}$. Для одномерной цепочки, треугольной и квадратной двумерных решеток, а также для всех кубических трехмерных решеток при отсутствии внешних сил тензор напряжений (72) должен быть шаровым (в силу симметрии),

⁵Скорость распространения волн сдвига в заданном направлении внутри трехмерного кристалла зависит также от ориентации плоскости сдвига. Однако, в рассматриваемом случае все эти плоскости оказываются равноправными [14].

что позволяет записать (72) в виде

$$\underline{\tau} = -\frac{1}{2V_0d} \sum_{\alpha} a_{\alpha} f(a_{\alpha}) \underline{E}, \quad (73)$$

где d — размерность решетки, \underline{E} — единичный тензор. Условие равновесия решетки при отсутствии внешних сил имеет вид $\underline{\tau} = 0$, откуда, согласно (73), получаем

$$\sum_{\alpha} a_{\alpha} f(a_{\alpha}) = 0. \quad (74)$$

Очевидно не все расстояния a_{α} различны. Если сгруппировать их по координационным сферам, то формулу (74) можно переписать в виде

$$\sum_{k=1}^n N_k R_k f(R_k) = 0, \quad (75)$$

где k — номер координационной сферы, N_k — число лежащих на ней атомов, R_k — ее радиус; n — число сфер, принимаемых к рассмотрению (может быть ∞). Решение уравнения (75) будем искать в виде $R_k = \rho_k R$, где ρ_k — известные из геометрических соображений константы; R — неизвестная величина, как правило, расстояние между некоторыми двумя атомами в решетке. При изменении R вся решетка изменяется, оставаясь подобной самой себе. Теперь соотношение (75) принимает вид уравнения относительно одной скалярной неизвестной R

$$\sum_{k=1}^n N_k \rho_k f(\rho_k R) = 0. \quad (76)$$

Для взаимодействия Леннарда-Джонса уравнение (76) может быть решено в общем виде

$$R = a \sqrt[6]{\frac{\sum_{k=1}^n N_k \rho_k^{-12}}{\sum_{k=1}^n N_k \rho_k^{-6}}}. \quad (77)$$

Результаты вычисления равновесного положения для различных плотноупакованных решеток при взаимодействии Леннарда-Джонса и радиусе обрезания потенциала $2.1a$ приведены в таблице 3. Величина ε характеризует относительное сжатие решетки и вычисляется по формуле

$$\varepsilon = (1 - R_1/a) \cdot 100\%.$$

Из таблицы видно, что сжатие увеличивается с увеличением размерности пространства.

d	Решетка	R_1/a	ε (%)
1	Цепочка	0.9974599	0.25
2	ГПУ	0.9917496	0.83
3	ГЦК	0.9784147	2.16

Таблица 3: Параметры равновесного положения различных решеток. d — размерность, $R_1 = \rho_1 R$ — расстояние между ближайшими атомами.

Устойчивость решетки определяется положительной определенностью тензора жесткости, который для простой решетки может быть вычислен по формуле (59). Для сложной решетки тензор жесткости, в общем случае, не может быть записан явно, а получается из решения системы тензорных уравнений.

8 Определение параметров моделирования

Рассмотрим совокупность одинаковых частиц, взаимодействующих посредством некоторого потенциала взаимодействия. Получим формулы, позволяющие определять микроскопические параметры компьютерной модели по макроскопическим параметрам моделируемого объекта. Для определения всех размерных параметров модели достаточно выбрать три основных размерных величины — базовые значения массы, расстояния и времени. Далее для краткости будем их называть масштабами массы, расстояния и времени. Все остальные размерные величины могут быть выражены через них и безразмерные коэффициенты. В качестве масштаба массы выберем массу частицы m . Далее, рассмотрим две частицы в одномерном пространстве. Равновесное расстояние a между этими частицами выберем в качестве масштаба расстояния. Далее, зафиксируем одну из частиц. Период T_0 малых колебаний второй частицы вблизи положения равновесия выберем в качестве масштаба времени.

Для установления связи между моделируемым макроскопическим объектом и рассматриваемой дискретной моделью требуется определить базовые параметры m , a , T_0 из размерных макроскопических параметров. Масса частицы m определяется из очевидного соотношения

$$m = M/N, \quad (78)$$

где M — масса моделируемого объекта, N — число частиц, используемых для моделирования. Выбор числа N определяется возможностями вычислительной системы.

Для определения масштаба расстояния представим макроскопический объем V моделируемого объекта в виде

$$V = p\mathcal{V}_0(\chi a)^d N, \quad (79)$$

где p — плотность данной упаковки по отношению к плотной упаковке частиц; \mathcal{V}_0 — безразмерный объем элементарной ячейки плотной упаковки (вычисляется для единичного расстояния между ближайшими частицами); χ — коэффициент, характеризующий изменение равновесного расстояния между частицами в плотной упаковке в результате взаимодействия с частицами следующих координационных сфер; d — размерность пространства; a — искомый масштаб расстояния (равновесное расстояние между двумя взаимодействующими частицами). Из формулы (79) получаем:

$$a = \frac{1}{\chi} \sqrt[d]{\frac{V}{p\mathcal{V}_0 N}}. \quad (80)$$

В данной формуле размерный объем V определяется макроскопическими параметрами задачи, безразмерная плотность упаковки p диктуется выбором начальных условий по координатам (внутренней структуры материала), число частиц N определяется возможностями вычислительной системы. Величины \mathcal{V}_0 и χ являются безразмерными константами, их значения для пространств различной размерности определены, соответственно, формулой (70) ($\mathcal{V}_0 = V_0 a^{-d}$) и в таблице 2 ($\chi = R_1/a$).

Для определения масштаба времени найдем сперва жесткость связи C между частицами. Для динамических экспериментов удобно определять жесткость связи на основании скорости распространения продольных звуковых волн v_l в среде:

$$C = m \left(\frac{v_l}{\lambda a} \right)^2, \quad (81)$$

где $\lambda \stackrel{\text{def}}{=} v_l/v_0$ — безразмерный коэффициент, равный отношению скорости длинных продольных волн v_l для рассматриваемой упаковки частиц к скорости длинных волн в одномерной цепочке v_0 (19). Значения λ для различных упаковок частиц в пространствах различной размерности приведены в таблице 2. Искомый масштаб времени T_0 (период малых колебаний

частицы под действием силы жесткостью C) определяется формулой

$$T_0 = 2\pi\sqrt{m/C} = 2\pi\lambda a/v_l. \quad (82)$$

Выпишем полученные формулы для базовых параметров массы, расстояния и времени

$$m = \frac{M}{N}, \quad a = \frac{1}{\chi} \sqrt[d]{\frac{V}{p\mathcal{V}_0 N}}, \quad T_0 = 2\pi \frac{\lambda a}{v_l}. \quad (83)$$

Здесь M, V, v_l — размерные макроскопические параметры; N, d, p — безразмерные параметры, определяемые условиями моделирования; $\chi, \mathcal{V}_0, \lambda$ — безразмерные коэффициенты, значения которых заатабулированы для основных упаковок частиц. Использование формул (83) гарантирует при достаточно большом количестве частиц точное соответствие компьютерной модели следующим макроскопическим свойствам моделируемого объекта: масса, плотность, геометрические размеры, скорость распространения линейных упругих продольных волн в выбранном направлении. Кроме того, приближенное соответствие достигается для упругих модулей материала и скорости распространения различных волн в рамках линейной теории. Погрешность определения последних характеристик связана с анизотропией большинства кристаллических упаковок частиц и фиксированностью коэффициента Пуассона при заданном парном потенциале взаимодействия. Решение этих проблем возможно при использовании поликристаллических и аморфных упаковок частиц, а также непарных потенциалов взаимодействия. Отметим также, что в двумерном случае ГПУ решетка изотропна (в линейном приближении), что снимает проблемы связанные с анизотропией, однако коэффициент Пуассона для нее равен в точности $1/3$ и изменен быть не может (в рамках парного взаимодействия).

Отметим, что для квазистатических экспериментов может оказаться более удобным определять жесткость связи C из жесткостных параметров материала. Так, для плотноупакованных кристаллических решеток, согласно (61), жесткость C связана с модулем объемного сжатия K формулой

$$C = \frac{2\mathcal{V}_0 d^2}{\mathcal{M}} K a^{d-2}, \quad (84)$$

где \mathcal{M} — координационное число решетки (число атомов на первой координационной сфере), d — размерность пространства, K — модуль объемного сжатия в пространстве данной размерности. При получении формулы (84) учитывалось взаимодействие только с атомами первой координационной сферы. Для трехмерной ГЦК решетки формула (84) принимает вид

$$C = \frac{3\sqrt{2}}{4} K a. \quad (85)$$

Из (84) может быть получена альтернативная формула для масштаба времени.

Рассмотрим основные размерные параметры моделирования и покажем, как они могут быть выражены через выбранные масштабы массы, длины и времени. Шаг интегрирования дифференциальных уравнений движения частиц определяется формулой:

$$\tau = \vartheta T_0, \quad (86)$$

где ϑ — безразмерный коэффициент, выбираемый обычно в пределах $0.01 - 0.05$, в зависимости от необходимой точности вычислений. Основные размерные параметры потенциала взаимодействия — это его жесткость C , максимальное значение силы взаимодействия f_* и энергия связи D , которые выражаются через базовые параметры m, a, T_0 формулами

$$C = 4\pi^2 \frac{m}{T_0^2}, \quad f_* = \frac{\varepsilon_*}{k_*} C a, \quad D = \frac{1}{2k_v^2} C a^2, \quad (87)$$

где ε_* , k_* , k_v — введенные ранее безразмерные параметры (9), (25), характеризующие потенциал взаимодействия.

Дальнейшее уточнение модели, прежде всего в области нелинейного деформирования и разрушения, может быть осуществлено выбором потенциала взаимодействия таким образом, чтобы описывающие его безразмерные параметры позволяли добиться требуемых значений безразмерных макроскопических параметров моделируемого материала, например, таких, как отношение модуля Юнга к пределу прочности, отношение скорости распространения упругих волн к откольной скорости, параметр Грюнайзена и др. Указанный выбор в простейших случаях может осуществляться аналитически, в более сложных он требует проведения тестовых компьютерных экспериментов, по возможности повторяющих известные натурные эксперименты.

В частности, компьютерные эксперименты показывают, что откольная скорость (минимальная скорость ударника, вызывающая откольное разрушение в монокристаллической упаковке частиц при плоском ударном взаимодействии пластин) с высокой степенью точности равна скорости диссоциации v_d . Отношение скорости распространения длинных продольных волн в монокристаллической упаковке частиц к скорости диссоциации равно

$$v_l/v_d = \lambda k_v, \quad (88)$$

где $\lambda \stackrel{\text{def}}{=} v_l/v_0$ — коэффициент, полностью определяемый геометрией упаковки (см. таблицу 2), а k_v — безразмерный параметр потенциала взаимодействия. С другой стороны, отношение скорости продольных волн к откольной скорости может быть получено из экспериментальных данных, что позволяет использовать формулу (88) для нахождения параметра k_v . Знание этого параметра (при известных a и C) позволяет определить все константы потенциала Морзе и аналогичных ему трехпараметрических потенциалов.

Предел прочности при объемном растяжении является еще одной величиной, которая может использоваться для определения безразмерных параметров потенциала взаимодействия, так как она может быть найдена аналитически для кристаллических упаковок. Покажем это. Тензор напряжений Коши в кристаллической решетке при произвольном упругом нелинейном деформировании имеет вид [12, 13]

$$\underline{T} = -\frac{1}{2V_0} \sum_{\alpha} \frac{1}{A_{\alpha}} f(A_{\alpha}) \underline{A}_{\alpha} \underline{A}_{\alpha} \quad \Rightarrow \quad \sigma \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{d} \underline{E} \cdot \underline{T} = -\frac{1}{2V_0 d} \sum_{\alpha} A_{\alpha} f(A_{\alpha}). \quad (89)$$

Здесь σ — среднее нормальное напряжение. Положим, что деформация является чисто объемной и предельной (то есть такой, за которой наступает разрыв межатомных связей), тогда $A_{\alpha} = b$, $f(A_{\alpha}) = -f_*$, $V_0 = \mathcal{V}_0 b^d$. Здесь b — расстояние разрыва (расстояние, для которого выполняется $f'(b) = 0$), а f_* — максимальная сила взаимодействия. Тогда получаем

$$\sigma_* = \frac{\mathcal{M} f_*}{2\mathcal{V}_0 b^{d-1} d}, \quad (90)$$

где $\sigma_* \stackrel{\text{def}}{=} -\sigma|_{A_{\alpha}=b}$ — предел прочности при объемном растяжении. Модуль объемного сжатия, согласно (61), равен

$$K = \frac{\mathcal{M} C}{2\mathcal{V}_0 a^{d-2} d^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{K}{\sigma_*} = \frac{C a}{f_* d} \left(\frac{b}{a}\right)^{d-1}. \quad (91)$$

Воспользовавшись определениями безразмерных параметров получим окончательно

$$\frac{K}{\sigma_*} = \frac{1}{d} \frac{k_*}{\varepsilon_*} (1 + \varepsilon_*)^{d-1} \approx \frac{1}{d} \frac{k_*}{\varepsilon_*}. \quad (92)$$

Приближенная формула справедлива для малых значений ε_* . Формулы (92) связывают безразмерное отношение макроскопических величин K/σ_* и безразмерные параметры взаимодействия k_* и ε_* . Величины K , σ_* и ε_* могут быть определены из натуральных экспериментов. В частности, для хрупкого материала последние две величины могут определяться из эксперимента по одноосному растяжению, как предел прочности и предельное удлинение при разрыве. Тогда уравнение (92) может использоваться для определения параметра k_* , характеризующего степень нелинейности потенциала взаимодействия.

Данные исследования поддержаны РФФИ, грант 02-01-00514.

Список литературы

- [1] Allen M. P. and Tildesley A. K. Computer Simulation of Liquids. – Oxford: Clarendon Press. 1987.
- [2] Hoover W. G. Isomorphism linking smooth particles and embedded atoms // Physica A 1998. V. 260. № 3–4. P. 44–254.
- [3] Забродин А. В. Супер ЭВМ МВС-100, МВС-1000 и опыт их использования при решении задач механики и физики // Математическое моделирование. 2000. Т. 12. № 5.
- [4] Nose S. Constant-Temperature Molecular-Dynamics // Journal of Physics – Condensed Matter. 1990. V. 2. P. SA115–SA119.
- [5] Verlet L. Computer ‘experiments’ on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Phys. Rev. 1967. V. 159. № 98. P. 103.
- [6] Gibson J. B., Goland A. N., Milgram M., and Vineyard G. H. // Phys. Rev. 1960. № 120. P. 1229.
- [7] Nordsieck A. // Math. Comput. 1962. V. 16. P. 22.
- [8] Erkoç S. Empirical many-body potential energy functions used in computer simulations of condensed matter properties. Physics Reports. 1997. V. 278. № 2. P. 80–105.
- [9] Krivtsov A. M. Second Order Equation of State for Lennard-Jones Chain // Proceedings of the XXVIII Summer School Actual Problems in Mechanics. St.-Petersburg. Russia. 2001. V. 1. P. 79–90.
- [10] Wagner N. J., Holian B. L., Voter A. F. Molecular-Dynamics Simulations of 2-Dimensional Materials at High-Strain Rates // Physical Review A. 1992. V. 45. № 12. P. 8457–8470.
- [11] Лагунов В. А., Синани А. Б. Образование биструктуры твердого тела в компьютерном эксперименте // Физика твердого тела. 1998. Т. 40. № 10. С. 1919–1924.
- [12] Кривцов А. М. К теории сред с микроструктурой // Тр. СПбГТУ. 1992. № 443. С. 9–17.
- [13] Krivtsov A. M. Constitutive Equations of the Nonlinear Crystal Lattice. // ZAMM. 1999. V. 79. № S2. P. 419–420.
- [14] Вустер У. Применение тензоров и теории групп для описания физических свойств кристаллов. – М.: Мир. 1977.