

УДК 539.4, 678.4.04

*Член-корреспондент Ю. М. ПЛЕСКАЧЕВСКИЙ, Ю. А. ЧИГАРЕВА*

## **КОРРЕКТНОЕ ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛЕЙ КОНТИНУУМА, КВАЗИКОНТИНУУМА, СЕТЕЙ В НАНОМЕХАНИКЕ**

*Белорусский национальный технический университет, Минск*

*Поступило 08.10.2012*

Известно, что применение методов механики сплошной среды для материалов с дискретной структурой лимитируется масштабным и граничным факторами, которые между собой взаимосвязаны [1]. Одним из важнейших масштабных эффектов с точки зрения механики является эффект Холла–Петча [2], который выражается формулой, устанавливающей связь между коэффициентом прочности тела и его размером. При уменьшении размеров деформируемого тела принцип Сен-Венана перестает действовать, как только масштабы нагрузки, приложенной на границе, и масштаб самого тела становятся сопоставимыми [3]. Важная роль в континуальной механике отводится решению проблемы, связанной с вычислением эффективных свойств материалов, имеющих сложную структуру, в первую очередь, это касается естественных и искусственных композитов [4]. Оценка влияния масштабного и краевого эффектов в наноструктурах показывает, что прямое применение методов сплошной среды для наноструктур некорректно [5].

Адекватное описание наноструктур можно получить на основе моделей кристаллической решетки или сетевых структур, из которых в моделировании дискретных структур наиболее известны модели сетей, образованных узлами и связями. Однако математический аппарат классической механики сплошной среды при этом не может использоваться, а методы молекулярной динамики для достаточно масштабных структур наноуровня аналитически плохо обозримы [6; 7].

В связи с этим представляют интерес различные теории квазиконтинуума, в которых, с одной стороны, учитывается наличие внутренней микроструктуры, что выражается в появлении в уравнениях параметра пространственного масштаба, а с другой – уравнения имеют вид обычных уравнений механики сплошной среды, в общем случае интегродифференциальных, для получения и решения которых применимы методы континуальной математики [8].

Разработке моделей квазиконтинуума, учитывающего элементы структуры среды, посвящено сравнительно немного работ. Здесь в основном развивается два подхода. Один из них представляет собой методы интерполяции моделей сплошной среды в направлении учета структуры за счет введения в лагранжиан (гамильтониан) структурных параметров и применения вариационных методов [9]. Другой подход базируется на дискретной модели [10], а интерполяция в направлении сплошной среды осуществляется с помощью различных осредняющих процедур, позволяющих получать уравнения для средних полевых характеристик в форме обычных для сплошной среды интегродифференциальных уравнений, для решения которых применимы методы континуальной математики [8].

Так как модель квазиконтинуума, пригодного для описания микронаноструктурных сред методами механики сплошной среды, должна содержать параметры пространственной структуры, то с этой точки зрения нелокальная теория упругости, по аналогии с теорией наследственной упругости, является наиболее приемлемой, так как содержит в определяющих соотношениях интегральные операторные связи между напряжениями и деформациями [3; 8].

Рассмотрим некоторые простые модели нелокальной теории упругости с точки зрения их применения в наномеханике. Обычно модели нелокальной теории упругости имеют определяющие соотношения в виде [3; 8]

$$\sigma_{ij}(\bar{x}) = \int \Gamma_{ijke}(\bar{x}, \bar{x}_1) e_{kl}(\bar{x}) dx_1, \quad (1)$$

где ядро  $\Gamma_{ijke}(\bar{x}, \bar{x}_1)$  представляется следующим образом:

$$\Gamma_{ijke}(x, x_1) = \delta(\bar{x} - \bar{x}_1) \lambda_{ijke}^o + N_{ijke}(\bar{x}, \bar{x}_1). \quad (2)$$

Здесь  $\lambda_{ijke}^o$  – статические модули упругости материала, а ядро  $N_{ijke}(\bar{x}, \bar{x}_1)$  учитывает пространственную «историю деформирования», т. е. зависимость состояния в точке  $\bar{x}$  от состояния в точках  $\bar{x}_1$ , где  $x, x_1 \in V$ . Выбор ядра  $N_{ijke}(\bar{x}, \bar{x}_1)$  является достаточно произвольным и может основываться как на решении задачи идентификации, использующей экспериментальные данные, так и на теоретических моделях [3; 8].

Ядро  $N_{ijke}(\bar{x}, \bar{x}_1)$  должно содержать в себе, как минимум, информацию о механических свойствах элементов структуры, например, силах взаимодействия между ними, причем желательно учитывать изменение этого взаимодействия в пограничном слое тела, что влечет за собой учет влияния геометрии тела. Второе, что должно учитываться в ядре  $N_{ijke}(\bar{x}, \bar{x}_1)$ , – это распределение структурных элементов по объему  $V$ . Причем, в общем случае необходимо учитывать, что в реальных материалах регулярные структуры скорее редкость, чем правило. Представим ядро  $N(x, x_1)$  в виде суперпозиции, в которой каждый следующий член зависит от статистического момента упругих коэффициентов более высокого порядка.

$$N_{ijke}(\bar{x}, \bar{x}_1) = \sum_{\alpha=1}^n N_{ijke}^{(\alpha)}(\bar{x}, \bar{x}_1). \quad (3)$$

Здесь ядро  $N_{ijke}^{(1)}(x, x_1)$  должно зависеть от корреляционной функции параметров структурных элементов среды, в  $N_{ijke}^{(2)}(x, x_1)$  входят моменты третьего порядка, которые учитывают структурную анизотропию и т. д.

Известно, что в рамках первых двух моментов можно описать статистическую однородность, изотропность случайных полей. Это накладывает требования на вид  $N_{ijke}^{(1)}(\bar{x}, \bar{x}_1)$ , в частности, ядро должно зависеть от модуля разности координат  $|\bar{x} - \bar{x}_1|$ . Ограничимся корреляционным приближением для статистического описания структур. В этом случае зависимость корреляционной функции от радиусов корреляции позволяет учесть наличие в модели иерархии масштабов пространственных структур.

Как известно, механические свойства элементов структуры учитываются функцией Грина, которая содержит информацию о поле, создаваемом точечным источником в среде, а ее производная – о поле, вызванном диполем. Исходя из этого целесообразно ввести в ядро  $N_{ijke}^{(1)}(\bar{x}, \bar{x}_1)$  функцию Грина, вид которой, как известно, зависит от геометрии области  $V$ . Таким образом, ядро  $N_{ijke}^{(1)}(\bar{x}, \bar{x}_1)$  должно представлять собой суперпозицию функции Грина (ее производных) и корреляционной функции параметров структуры среды, причем суперпозиция должна иметь мультипликативный характер.

Получение конкретного вида ядра  $N_{ijke}^{(1)}(\bar{x}, \bar{x}_1)$  рассмотрим на модели неоднородной упругой среды. Исходные определяющие локальные уравнения имеют вид обобщенного закона Гука

$$\sigma_{ij} = \lambda_{ijke}(\bar{x}) e_{ke}. \quad (4)$$

Зависимость  $\lambda_{ijke}$  от  $\bar{x}$  учитывает, что локальные модули упругости частицы среды, находящейся в точке  $\bar{x}$ , отличаются от макроскопических коэффициентов, определяемых экспериментально на образцах, размер и форма которых выбираются таким образом, чтобы исключить зависимость упругих модулей материала от структуры, геометрии тела и граничных условий.

Считая  $\lambda_{ijke}(\bar{x})$  в (4) тензором, зависящим от пространственных координат случайным образом (что позволяет использовать аппарат хорошо развитой теории случайных полей), получим с помощью методов осреднения определяющие соотношения, устанавливающие связь между средними напряжениями и деформациями в виде (2), т. е. нелокальной упругой среды. Выражение для ядра  $N_{ijke}^{(1)}$  получается (в прямых обозначениях) в виде

$$N^{(1)}(x - x_1) = G(\bar{x} - \bar{x}_1)R(\bar{x} - \bar{x}_1)G(\bar{x} - \bar{x}_1). \quad (5)$$

Здесь  $G_{ij}(\bar{x} - \bar{x}_1)$  – тензор Грина однородной линейно упругой среды для области  $V$ ;  $R_{ijke}^{mnpq}(\bar{r} - \bar{r}_1)$  – корреляционный тензор упругих модулей  $\lambda_{ijke}(\bar{x})$ . Таким образом, ядро  $N_{ijke}(\bar{x}, \bar{x}_1)$  в (2), получаемое в рамках модели неоднородной среды, удовлетворяет требованиям, сформулированным выше.

Рассмотрим корректность применения полученных соотношений для описания микронаноструктурных сред. Линейные продольные гармонические колебания наностержня (наноцепи) в дискретном представлении имеют вид

$$m\ddot{u}(n) = -\sum_{n'} C^{ik}(n - n')u^k(n'), \quad i, k = 1, 2, 3, \quad (6)$$

где  $n$  обозначает номер атома в периодической цепи;  $C^{ik}(n)$  – силовая матрица, характеризующая взаимодействие между атомами;  $u(n)$  – перемещения  $n$ -го атома;  $m$  – масса наностержня.

В случае простой решетки  $C_{(n)}^{ik} = C_{(n)}^{ki}$  являются четными функциями  $n$  и удовлетворяют соотношениям

$$\sum_{n'} C^{ik}(n) = 0.$$

Для гармонических колебаний  $u(n) = e^{-idkn}$ , тогда из (6) следует закон дисперсии вида

$$\omega^2 = \frac{1}{2} \sum_n C_0(n) e^{-idkn} \equiv -\frac{1}{m} \sum_n C_0(n) (1 - e^{-idkn}), \quad (7)$$

где  $d$  – постоянная решетки.

В приближении длинных волн  $dk \ll 1$  из (7) получаем закон дисперсии в виде

$$\omega = c_0 k, \quad c_0^2 = -\frac{d^2}{2m} \sum C_0(n) n^2, \quad (8)$$

где  $c_0$  – скорость распространения продольных колебаний.

Закон дисперсии (8) соответствует распространению продольной гармонической волны в упругом сплошном стержне, т. е. континуальному приближению наноцепочки. В координатах  $(x, t)$  движение описывается обычным волновым уравнением

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c_0^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0. \quad (9)$$

Рассмотрим модель квазиконтинуума, которая является промежуточной между моделями дискретной цепочки (6) и сплошного упругого стержня (9). Распространение волн в одномерном квазиконтинууме описывается уравнением вида [8]

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \int C(x - x') u(x') dx' = 0, \quad (10)$$

где ядро интегрального оператора  $C(x - x')$ , как правило, может быть представлено в виде

$$C(x - x') = c_0^2 \delta(x - x') + C_1(x - x'), \quad (11)$$

причем ядро  $C_1(x - x')$  содержит параметры пространственной размерности. Подставляя (11) в (10) получим, что приближение континуума (9) следует из (10), (11), если пренебречь учетом не-локальности за счет ядра  $C_1(x - x')$ .

Структура ядра  $C_1(x - x')$  имеет вид мультипликатора функции Грина  $G$  и корреляционной функции  $R$

$$C_1(x - x') = G(x - x')R(x - x'), \quad (12)$$

где  $G(x - x')$  – функция Грина, определяемая из уравнения

$$\frac{\partial^2 G}{\partial t^2} - c_0 \frac{\partial^2 G}{\partial x^2} = -\delta(t-t')\delta(x-x') \quad (13)$$

при соответствующих начальных и граничных условиях.

$R(x-x')$  – корреляционная функция упругого коэффициента  $\lambda = \lambda(x)$ , определяемая согласно формулам

$$R(x-x') = \langle \lambda(x)\lambda'(x') \rangle, \quad \lambda'(x) = \lambda(x) - \langle \lambda \rangle. \quad (14)$$

Как известно,  $G(x-x')$  зависит от свойств среды и геометрии области,  $R(x-x')$  определяет микроструктуру среды в диапазоне от периодических до хаотических структур и содержит радиус корреляции  $a$ , что сближает ее с дискретной цепочкой и позволяет учесть пространственную дисперсию, причем в рамках квазиконтинуума удается рассматривать колебания, описываемые не только акустической, но и оптической ветвью [7]. Ядро  $C_1(x-x')$  позволяет рассматривать также мультимодульные материалы, управляя их свойствами в среднем за счет изменения вида корреляционной функции [11].

Рассмотрим модель разупорядоченной среды, описываемую корреляционной функцией вида

$$R(x-x') = R_0 \exp(-\alpha|x-x'|), \quad \alpha = a^{-1}, \quad (15)$$

тогда дисперсионное уравнение имеет вид

$$z^4 + z^2(s^2 - m) - m^2 s^2 - imns = 0, \quad z = aq, \quad m = a\lambda^{-1}, \quad s = 1 - im, \quad (16)$$

где  $q$  – волновое число;  $\lambda$  – длина волны.

На рис. 1 изображена зависимость коэффициента затухания  $\alpha\delta = \text{Im}(z)$  от  $m$ , а на рис. 2 представлена зависимость групповой скорости  $c_g c_0^{-1}$  от  $m$ .

Для моделирования среды с частично упорядоченной структурой можно использовать корреляционную функцию вида

$$R(x-x') = R_0(1 + \alpha|x-x'|) \exp(-\alpha|x-x'|) \cos(\beta(x-x')). \quad (17)$$

В этом случае дисперсионное уравнение является трансцендентным и может быть решено приближено, однако поведение дисперсионных кривых имеет более сложный характер по сравнению с (17).

Соответствующее дисперсионное уравнение имеет вид

$$q^2 = \begin{cases} m^2 - m^2 \left( -\frac{imn\pi}{2} + \frac{mn}{4} \ln \left| \frac{(m+1)^2 - q^2}{(m-1)^2 - q^2} \right| \right), & |q| < 1 - m, \\ m^2 - m^2 \left( -\frac{imn\pi}{2} + \frac{mn}{4} \ln |\infty| \right), & |q| = 1 - m, \\ m^2 - m^2 \frac{mn}{4} \ln \left| \frac{(m+1)^2 - q^2}{(m-1)^2 - q^2} \right|, & |q| > 1 - m. \end{cases} \quad (18)$$

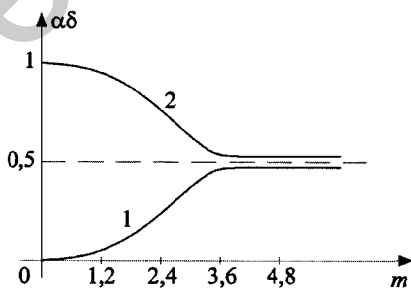


Рис. 1. Зависимость коэффициентов рассеяния акустической (1) и оптической (2) ветвей от  $m = b\lambda^{-1}$  в квазиконтинууме

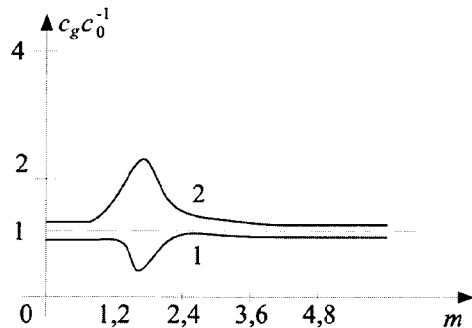


Рис. 2. Зависимость групповых скоростей акустической (1) и оптической (2) ветвей от  $m = a\lambda^{-1}$  в квазиконтинууме

Среда с периодической структурой описывается корреляционной функцией вида

$$R(\rho) = R_0 \cos(\beta\rho). \quad (19)$$

В этом случае дисперсионное уравнение имеет вид

$$q^2 - m_1^2 + m_1^2 \left[ -\frac{im_1 n}{4} \{ \delta(m_1 + 1 - q) + \delta(m_1 - 1 - x) \} + \frac{mn(m_1 + 1)((m_1 - 1)^2 - q^2) + (m_1 - 1)((m_1 + 1)^2 - q^2)}{4((m_1 + 1)^2 - q^2)(m_1 - 1)^2 - q^2} \right], \quad m_1 = kd. \quad (20)$$

### Выводы

1. Масштаб наноструктур соответствует промежуточному положению между масштабами атомно-молекулярных структур и сплошной среды, что требует применения соответствующих математических моделей квазиконтинуума.

2. Нелокальная теория упругости (теория квазиконтинуума), с одной стороны, позволяет учесть структуру материала за счет параметров, имеющих пространственную размерность длины, а с другой – полученные интегродифференциальные уравнения допускают применение аналитических методов исследования, хорошо развитых в механике сплошных сред.

3. В моделях квазиконтинуума определяющие соотношения между напряжениями и деформациями задаются интегральными операторами с ядрами, зависящими от пространственных координат подобно тому, как в теории упругих сред с памятью ядра зависят от временной координаты. Ядро должно содержать информацию о механических свойствах среды, геометрии тела, распределении структурных элементов.

4. В работе предложен аналитический метод нахождения вида ядер интегральных операторов, основанный на методе осреднения случайных полей напряжений и деформаций, который дает возможность учесть эффекты пространственной дисперсии, характерные для сред со структурой.

5. Аналогичным образом можно рассматривать переход к описанию двухмерных структур типа графенов с помощью модели двухмерного квазиконтинуума, а также нанослоистых композитов, создаваемых синтезом графенов. Формально это можно реализовать, заменяя дифференциальные операторы при упругих коэффициентах в уравнениях механики сплошной среды на интегральные операторы, ядра которых должны определяться как эффективные характеристики случайно неоднородной среды.

### Литература

1. Mindlin R. D. // Arch. Rat. Mech. Anal. 1964. Vol. 16, N 7. P. 51–78.
2. Nanoscale Science and Technology / Robert W. Kelsall, Jan W. Hannley, Mark Geoghegan. England, 2005. – 469 p.
3. Kröner E., Datta B. K. // Fundamental aspects of dislocation theory. Washington, 1970. Vol. II. P. 737–746.
4. Шермергор Т. Д. Теория упругости микронеоднородных сред. М., 1970. – 475 с.
5. Морозов Н. Ф., Семенов Б. Н., Товстик П. Е. // Теоретическая и прикладная механика. 2005. № 19. С. 37–42.
6. Косевич А. М. Основы механики кристаллической решетки. М., 1972. – 280 с.
7. Хрущинский А. А., Пушкарчук А. Л., Кутень С. А. и др. // Сб. фонд. и прикл. исследования. 2002–2009 гг. Минск, 2009. С. 228–238.
8. Кунин И. А. Теория упругих сред с микроструктурой. Нелокальная теория упругости. М., 1975. – 415 с.
9. Бердичевский В. Л., Седов Л. И. // ПММ. 1967. Т. 31, № 6. С. 981–1000.
10. Kröner E., Datta B. K. // Z. für Physik. 1966. Vol. 196. P. 203–211.
11. Шилько С. В., Петроковец Е. М., Плескачевский Ю. М. // Теоретическая и прикладная механика. 2012. № 27. С. 130–136.

Yu. M. PLESKACHEVSKY, J. A. CHIGAREVA

pleskym@mail.ru, theormech@rambler.ru

### CORRECT APPLICATION OF MODELS OF CONTINUUM, QUASI-CONTINUUM AND NETS IN NANOMECHANICS

#### Summary

The mathematical models of elastic quasi-continuum for applications in nanomechanics are considered. The models of the nonlocal elasticity allow to describe some effects which are observed in nanostructures. The depends of the attention coefficient and group velocity on the wave length and the correlation radius are obtained.