

## УПРУГИЕ МОДУЛИ И СИЛОВЫЕ ПОСТОЯННЫЕ

Репченков В.И., Нагорный Ю.Е., Насань О.А.

УО «Белорусский государственный университет», Минск

**Введение.** Линейная теория упругости опирается на закон Гука в дифференциальной форме

$$\sigma_{ik} = E_{iklm} \varepsilon_{lm}, \quad (1)$$

который связывает силы  $\sigma_{ik}$  и малые перемещения  $\varepsilon_{lm}$  в сплошной среде, которая находится в твердом агрегатном состоянии. Упругие свойства вещества в этой модели характеризуются тензором модулей упругости  $E_{iklm}$ , максимальное количество независимых компонент которого равно 18. Для среды, обладающей симметриями, это число меньше. В предельном случае изотропии, остается всего два параметра – модуль Юнга и коэффициент Пуассона. Их можно определить в экспериментах по растяжению-сжатию прямолинейных стержней, где достигается простое однородное напряженно-деформированное состояние (НДС) [1,2,3].

Другой подход к описанию механических свойств вещества состоит в дискретном моделировании, когда рассмотрение проводится на атомно-молекулярном уровне. Решается классическая задача динамики системы материальных точек, в качестве которых выбираются ядра атомов. Силы взаимодействия между ними в значительной степени определяются распределением электронной плотности в пространстве. При достаточно малом отклонении системы от положения равновесия, связь между возникающими силами  $\bar{F}$  и перемещениями  $\bar{P}$  может быть записана в виде [4,5,6]:

$$\bar{F} = [K]\bar{P}, \quad (2)$$

где  $[K]$  – матрица жесткости (потенциальной энергии).

Из общих соображений понятно, что упругие свойства вещества, как сплошной среды, определяются его свойствами на микроуровне – расположением атомов или молекул, их ориентацией и интенсивностью взаимодействия. В связи с этим уместно сравнить (1) и (2). Основное отличие этих соотношений состоит в том, что количество независимых элементов матрицы жесткости (силовых постоянных) может быть любым, поскольку определяется, главным образом, числом взаимодействующих частиц  $N$  и может быть рассчитано по формуле [7]:

$$N_{03} = \frac{(3N-6)(3N-5)}{2} - 3. \quad (3)$$

Следовательно, результат решения задачи о получении зависимостей компонент тензора модулей упругости от силовых постоянных существенно зависит от количества учитываемых межатомных связей. Сама эта задача представляется актуальной как с фундаментальной точки зрения, так и в связи с формированием в настоящее время такой новой научной дисциплины, как наноматериаловедение. Рассмотрение обратной задачи может дать дополнительную информацию для определения силовых постоянных методами молекулярной спектроскопии.

Здесь представлен подход к решению этой проблемы, основанный на конечно-элементной дискретизации, предполагающий разбиение тела или системы на элементы. Матрица жесткости конечного элемента сплошной среды вычисляется по формуле [8]:

$$[K] = \int_{V_e} [B]^T [D] [B] dV_e, \quad (4)$$

где матрица градиентов  $[B]$  содержит геометрические параметры, матрица  $[D]$  – модули упругости,  $V_e$  - объём элемента. С другой стороны, среды на микроуровне состоят, как правило, из идентичных повторяющихся структурных элементов – атомных групп, для которых также, но из других соображений, могут быть построены матрицы жесткости, содержащие силовые постоянные межатомных взаимодействий и геометрические характеристики. Корректное сравнение матриц, идентичных по форме и размерам КЭ и СЭ, позволяет получить систему уравнений, связывающих компоненты тензора модулей упругости, силовые постоянные и геометрию химических связей.

**Математическая модель КЭ.** Рассмотрим гипотетическую двумерную среду со структурой квадратной решетки Бравэ [9]. В качестве четырехузловой КЭ выберем отдельную ячейку. В соот-

ветствии с показанной на рисунке 1 нумерацией степеней свободы сформируем векторы внешних сил  $\bar{F}^T = (F_1, F_2, F_3, F_4, F_5, F_6, F_7, F_8)$  и перемещений  $\bar{P}^T = (U_1, V_1, U_2, V_2, U_3, V_3, U_4, V_4)$ .

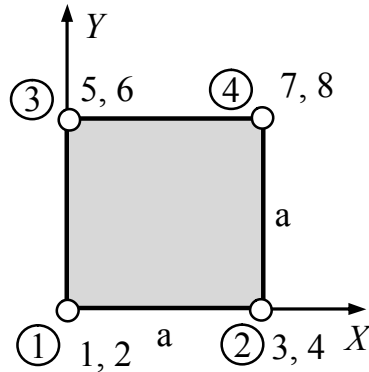


Рисунок 1 – Конечный элемент

Для построения математической модели КЭ, согласно (4), необходимо сформировать матрицы упругости, функций формы и градиентов. Считаем, что среда изотропна, поэтому деформации и напряжения связаны соотношением:

$$\bar{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yx} \end{pmatrix} = \frac{1}{E} \begin{pmatrix} 1 & -\nu & 0 & 0 \\ -\nu & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1+\nu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1+\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} \end{pmatrix} = [D]^{-1} \bar{\sigma}, \quad (5)$$

где  $E$ ,  $\nu$  – модуль Юнга и коэффициент Пуассона. При этом дополнительно предполагается, что объект представляет из себя пластинку, то есть реализуется плоское напряженное состояние (ПНС). Матрица упругости получается обращением матрицы податливости  $[D]^{-1}$ .

Другая матрица из (4), матрица градиентов  $[B]$ , является результатом дифференцирования матрицы функций формы  $[N]$ , аппроксимирующей перемещения  $\bar{U}(x, y)$  точек элемента

$$\bar{U} = \begin{pmatrix} u(x, y) \\ v(x, y) \end{pmatrix} = [N] \bar{P}, \quad (6)$$

которая в данном случае имеет вид:

$$[N] = \begin{pmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 & N_4 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 & N_4 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

$$N_1(x, y) = \frac{(x-a)(y-a)}{a^2}, \quad N_2(x, y) = \frac{x(a-y)}{a^2},$$

$$N_3(x, y) = \frac{(a-x)y}{a^2}, \quad N_4(x, y) = \frac{xy}{a^2}.$$

Здесь  $a$  – размер ячейки. Полиномы из (7) удовлетворяют стандартным условиям:

$$N_i(x_j, y_j) = \begin{cases} 0, & i \neq j, \\ 1, & i = j, \end{cases} \quad \sum_{i=1}^4 N_i(x_i, y_i) = 1, \quad (8)$$

что автоматически учитывает параллельный перенос и поворот элемента. Итак, для  $[B]$  имеем:

$$\bar{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y} & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 & N_4 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 & N_4 \end{pmatrix} \bar{P} = [B] \bar{P}. \quad (9)$$

Непосредственный расчет по формулам (4), (5), (9) в итоге дает:

$$[K]_e = \frac{Ed}{24(1-\nu^2)} \times \begin{pmatrix} 4A & 3C & -2H & -3K & 4\nu & 3K & -2A & -3C \\ 3C & 4A & 3K & 4\nu & -3K & -2H & -3C & -2A \\ -2H & 3K & 4A & -3C & -2A & 3C & 4\nu & -3K \\ -3K & 4\nu & -3C & 4A & 3C & -2A & 3K & -2H \\ 4\nu & -3K & -2A & 3C & 4A & -3C & -2H & 3K \\ 3K & -2H & 3C & -2A & -3C & 4A & -3K & 4\nu \\ -2A & -3C & 4\nu & 3K & -2H & -3K & 4A & 3C \\ -3C & -2A & -3K & -2H & 3K & 4\nu & 3C & 4A \end{pmatrix}, \quad (10)$$

где введены обозначения:  $A = 3 - \nu$ ,  $C = 1 + \nu$ ,  $H = 3 + \nu$ ,  $K = 1 - 3\nu$ ;  $d$  – “толщина” пластинки.

Равновесие элемента под действием внешних сил описывается матричным уравнением:

$$[K]_e \bar{P} = \bar{F}, \quad (11)$$

к которому необходимо добавить граничные условия для исключения смещения элемента как целого.

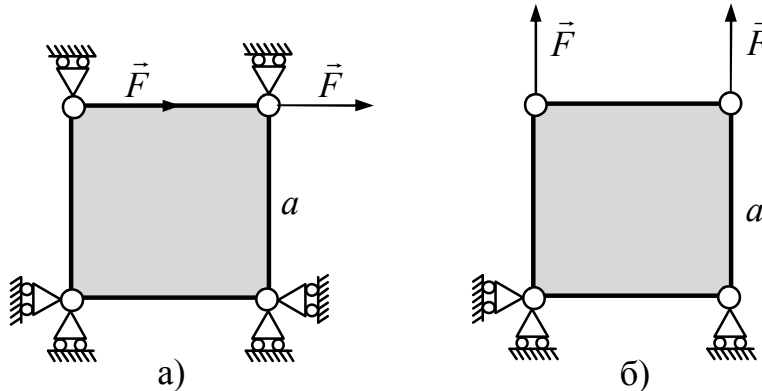


Рисунок 2 – а) сдвиг, б) растяжение

**Виртуальные испытания КЭ.** Схемы нагружения элемента при испытаниях показаны на рис. 2а, б. В соответствии с ними, в первом случае, когда происходит деформация сдвига, оба перемещения узлов 1, 2 и вертикальные перемещения узлов 3 и 4 отсутствуют, только  $U_3 \neq 0$  и  $U_4 \neq 0$ . Это, в соответствии с (10), (11), приводит к следующей системе разрешающих уравнений:

$$\begin{cases} \frac{EAd}{6(1-\nu^2)} U_3 - \frac{EHd}{12(1-\nu^2)} U_4 = F, \\ -\frac{EHd}{12(1-\nu^2)} U_3 + \frac{EAd}{6(1-\nu^2)} U_4 = F. \end{cases} \quad (12)$$

Отсюда находим  $U_3$  и  $U_4$ :

$$U_3 = U_4 = \frac{4F}{Ed} (1 + \nu). \quad (13)$$

Подставим полученные значения в формулу закона Гука, определяющую “экспериментальный” модуль сдвига

$$G^* = \frac{2Fa}{S\Delta x}, \quad (14)$$

где  $2F$  – касательная сила, действующая на верхнюю поверхность испытуемого образца,  $S$  – площадь поверхности, по которой распределено действие силы,  $\Delta x$  – смещение. Получим

$$G^* = \frac{2Fa}{S\Delta x} = \frac{2Fa}{aU_3 d} = \frac{2Fed}{4F(1+\nu)d} = \frac{E}{2(1+\nu)} = G. \quad (15)$$

Таким образом, “экспериментальный” и “теоретический” модули сдвига совпадают.

Аналогичный результат имеет место и во втором случае при растяжении элемента, а именно:

$$E^* = \frac{Fa}{S\Delta y} = \frac{Fa}{SV_3} = E, \quad \nu^* = \frac{\Delta x}{a} / \frac{\Delta y}{a} = \frac{U_3}{a} / \frac{V_3}{a} = \nu. \quad (16)$$

**Математическая модель структурного элемента.** Под структурным элементом далее будем понимать группу из четырех атомов, образующих квадратную ячейку с (рис. 3). Матрица жесткости в данном случае может быть получена путем разложения элемента на составляющие – простейшие механические модели в виде упругих отрезков и упругих углов (рис. 4), которые применяются в теории колебаний молекул. Отсюда видно, что независимых силовых постоянных в матрице жесткости СЭ будет четыре. Это две жесткости упругих отрезков – сторон и диагоналей квадрата  $k_1$  и  $k_2$ , и две жесткости упругих углов, составляющих  $90^\circ$  и  $45^\circ$   $k_3$  и  $k_4$  соответственно [7]. Понятно, что рассмотрение проводится в приближении общего гармонического поля, то есть учитываются все межатомные связи внутри СЭ, как валентные, так и невалентные.

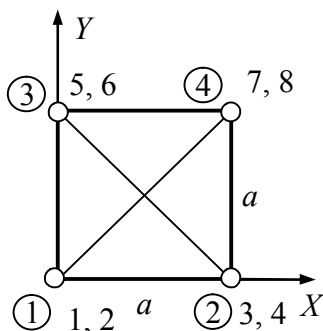


Рисунок 3 – Четырехатомный структурный элемент

Матрицы жесткости упругого отрезка и упругого угла в декартовых координатах приведены в [7].

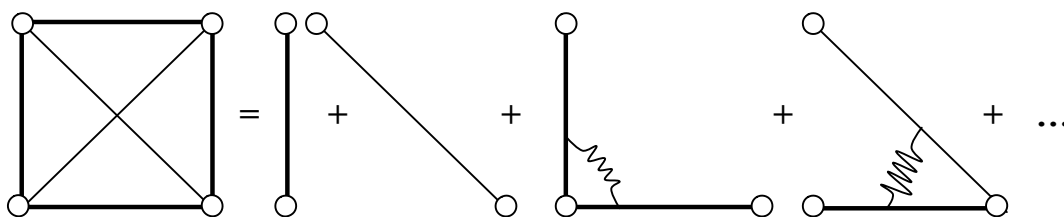


Рисунок 4 – Разложение четырехугольного структурного на базисные упругие отрезки и углы

Матрица жесткости СЭ в соответствии с рис. 4 получается как прямая сумма восемнадцати расширенных матриц жесткости составляющих:

$$[K]_{se} = d \begin{pmatrix} 4A' & 3C' & -2H' & -3K' & 4M' & 3K' & -\frac{k_2}{2} & -3C' \\ 3C' & 4A' & 3K' & 4M' & -3K' & -2H' & -3C' & -\frac{k_2}{2} \\ -2H' & 3K' & 4A' & -3C' & -\frac{k_2}{2} & 3C' & 4M' & -3K' \\ -3K' & 4M' & -3C' & 4A' & 3C' & -\frac{k_2}{2} & 3K' & -2H' \\ 4M' & -3K' & -\frac{k_2}{2} & 3C' & 4A' & -3C' & -2H' & 3K' \\ 3K' & -2H' & 3C' & -\frac{k_2}{2} & -3C' & 4A' & -3K' & 4M' \\ -\frac{k_2}{2} & -3C' & 4M' & 3K' & -2H' & -3K' & 4A' & 3C' \\ -3C' & -\frac{k_2}{2} & -3K' & -2H' & 3K' & 4M' & 3C' & 4A' \end{pmatrix}, \quad (17)$$

$$\text{где } A' = \frac{2k_1 + k_2}{8} + \frac{k_3 + k_4}{2a^2}, \quad C' = \frac{k_2}{6} + \frac{k_3}{3a^2}, \quad H' = \frac{k_1}{2} + \frac{k_4}{2a^2}, \quad K' = \frac{2k_3 + 2k_4}{6a^2}, \quad M' = -\frac{2k_3 + k_4}{4a^2}.$$

Матричное уравнение

$$[K]_{se} \bar{P} = \bar{F} \quad (18)$$

позволяет решить задачи статики структурного элемента.

**Связь упругих модулей и силовых постоянных.** Проведем виртуальные испытания структурного элемента подобные тем, что были проведены ранее с КЭ. Это позволит связать упругие характеристики гипотетической сплошной среды  $E$ ,  $\nu$  с силовыми постоянными  $k_1$ ,  $k_2$ ,  $k_3$ ,  $k_4$  взаимодействия между атомами.

Начнем с деформации сдвига. После вычеркивания строк и столбцов соответствующих неизменяемым степеням свободы, приходим к системе уравнений:

$$\begin{cases} 4A'U_3 - 2H'U_4 = F, \\ -2H'U_3 + 4A'U_4 = F. \end{cases} \quad (19)$$

Решая ее и вычисляя аналог модуля сдвига, приходим к равенству:

$$G' = k_2 + \frac{4k_3 + 2k_4}{a^2}, \quad (20)$$

Из него видно, что в выражении отсутствует силовая постоянная валентной связи между атомами  $k_1$ . Это соответствует элементарным представлениям теории упругости, поскольку при такой деформации длины отрезков, составляющих границу остаются неизменными. Вклад в модуль сдвига вносит изменение диагоналей и углов.

Испытания дискретной структуры на растяжение-сжатие приводит к соотношениям:

$$E' = \frac{4(k_1 + k_2)(a^2k_1 + 2k_4)}{2a^2k_1 + a^2k_2 + 2k_4} = \frac{2k_1 + 2k_2 + 4\frac{k_4}{a^2} + 4\frac{k_2k_4}{a^2k_1}}{1 + \frac{1}{2}\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_4}{a^2k_1}}, \quad (21)$$

$$\nu' = \frac{a^2k_2 - 2k_4}{2a^2k_1 + a^2k_2 + 2k_4} = \frac{\frac{1}{2}\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_4}{a^2k_1}}{1 + \frac{1}{2}\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_4}{a^2k_1}}. \quad (22)$$

Основной вклад в величину аналога модуля Юнга, как и следовало ожидать, вносят валентные связи. Другие взаимодействия относительно равноправны, и хотя их жесткости приблизительно на один-два порядка меньше валентных [10], в сумме они из-за наличия коэффициентов увеличивают значение  $E'$  на величину сравнимую с долей валентных. Прямые углы не деформируются, поэтому постоянная  $k_3$  в формулы (21) и (22) не входит.

Сложнее обстоит дело с поперечной деформацией. Если считать, что силовые постоянные положительны, то есть положение равновесия устойчиво по всем координатам, то знак  $\nu$  определяется разностью жесткостей диагональных упругих отрезков и упругих углов, составляющих  $45^\circ$ . В зависимости от соотношения между значениями  $k_2$  и  $k_4/a^2$ , коэффициент поперечной деформации может быть отрицательным, положительным и равным нулю. Таким образом, поведение обособленной ячейки отличается от поведения макроскопического объема среды, подчиняющейся закону Гука, где  $0 < \nu < 0,5$ . Заметим, что приближения поля центральных сил ( $k_4 = 0$ ) и валентно-силового поля ( $k_2 = 0$ ) дают противоположные результаты. В последнем случае растяжение приводит к увеличению поперечных размеров.

Из формул (20), (21), (22) вытекает невозможность выражения в общем случае модуля сдвига через модуль Юнга и коэффициент Пуассона по стандартной формуле. Обычная связь между ними имеет место только если

$$k_3 = \frac{1}{4}a^2(k_1 - k_2). \quad (23)$$

Но даже при этом матрицы жесткости КЭ и СЭ не совпадают. Поэлементное равенство достигается, когда

$$k_4 = \frac{1}{4} a^2 (2k_2 - 3k_1). \quad (24)$$

**Заключение.** Итак, упругое поведение отдельной ячейки взятой как конечный элемент сплошной среды не совпадает с поведением дискретной структуры в виде структурного элемента. Количества независимых упругих характеристик у СЭ и КЭ не совпадают.

В рамках приведенной схемы можно рассмотреть конечные объемы, состоящие из любого числа ячеек. Главное, чтобы процедуры сборки систем из КЭ и СЭ были идентичны. Это будет иметь место, если матрицу жесткости СЭ “подкорректировать”. Для того чтобы при объединении СЭ граничные отрезки, отвечающие валентным связям, не учитывались дважды, необходимо, очевидно, везде заменить  $k_1$  на  $k_1/2$ . Следовательно, упругие свойства системы из СЭ также не будут совпадать с упругими свойствами сплошной среды, подчиняющейся закону Гука.

### Резюме

Обсуждается проблема связи между компонентами тензора модулей упругости характеризующими сплошную среду, которая подчиняется закону Гука, и силовыми постоянными межатомного взаимодействия, определяющими упругость материала на микроуровне. Максимальное число упругих модулей среды равно 21, а число силовых постоянных не ограничено. Следовательно, дискретная модель вещества и модель сплошной среды Гука, вообще говоря, не эквивалентны. Рассмотрен простейший случай гипотетического кристалла с плоской квадратной решёткой Браве и установлены аналитические зависимости модуля Юнга и коэффициента Пуассона, то есть двух упругих характеристик, от четырёх силовых постоянных определяющих взаимодействие атомов в квадратной ячейке. Установлено условие, при котором коэффициент Пуассона отрицателен.

### Литература

1. Лехницкий, С.Г. Теория упругости анизотропного тела / С.Г. Лехницкий - М.: Наука, 1977. – 415с.
2. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика: в 10 т. / Л.Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – 4-е изд. – М.: Наука, 1987. – Т. 7: Теория упругости. – 248 с.
3. Васильев, В.В. Композиционные материалы. / В.В. Васильев, В.Д. Протасов, В. В. Болотин. – М.: Машиностроение, 1990. – 512 с.
4. Волькенштейн, М. Колебания молекул / М. Волькенштейн, М. Ельяшевич, Б. Степанов. – М.-Л.: Гос. изд. технико-теоритической литературы, 1949. – 600 с.
5. Коптев, Г.С. Расчёт колебаний молекул / Г.С. Коптев, Ю.А. Пентин. – М. : МГУ, 1977. – 212 с.
6. Грибов, Л.А. Колебания молекул / Л. А. Грибов – М.: Либриком, 2009. – 544 с.
7. Журавков, М.А. Конечно-элементное моделирование наноразмерных структур / М.А. Журавков, Ю.Е. Нагорный, В.И. Репченков. // Российские нанотехнологии. – 2011. – №9/10. – С. 92-99.
8. Зенкевич, О. Метод конечных элементов в технике / О. Зенкевич. – М.: Мир, 1975. – 541 с.
9. Шафрановский, И.И. Краткий курс кристаллографии / И.И. Шафрановский, В.Ф. Алявдин. – М.: Высшая школа, 1984. – 120 с.
10. Грибов, Л.А. Введение в молекулярную спектроскопию / Л.А. Грибов – М.: Наука, 1976. – 400 с.

### Summary

*The problem of the equivalence of the elastic continuum Hooke and its discrete analog is discussed. The simplest case of a hypothetical crystal with a flat square Bravais lattice is considered and an analytical dependence of Young's modulus and Poisson's ratio are established, that is, two of the elastic characteristics of the four force constants govern the interaction of atoms in a square cell.*

Поступила в редакцию 19.10.2012