

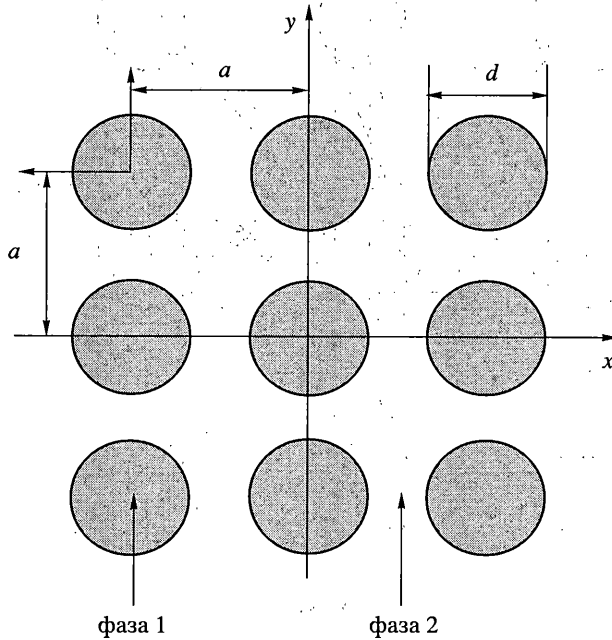
УДК 534.222;539.2

© 2007 г. И.С. ПАВЛОВ, А.И. ПОТАПОВ

ДВУМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ЗЕРНИСТОЙ СРЕДЫ

Двумерная модель зернистой среды представлена в виде квадратной решетки из упруговзаимодействующих круглых частиц, обладающих трансляционными и вращательной степенями свободы. В длинноволновом приближении выведены линейные уравнения в частных производных, описывающие распространение и взаимодействие волн различных типов в такой среде. Учет микроповоротов частиц в решетке и связанных с этим моментных взаимодействий приводит к появлению в среде волны микровращений (спиновой волны). Установлено взаимно однозначное соответствие между параметрами микроструктуры и упругими постоянными второго порядка. Проанализированы зависимости констант упругости среды от размеров зерен. В континуальном приближении произведено сопоставление предлагаемой модели с двумерным континуумом Коссера.

1. Введение. В настоящее время интенсивно изучается конденсированное состояние вещества на мезомасштабном (в том числе и наномасштабном) уровне, активно развиваются мезомеханика и физика ультразернистых сред и нанокристаллических материалов [1–3]. Различия в физических и механических свойствах таких материалов связаны с изменениями размеров кристаллитов и чрезвычайно развитыми границами раздела, содержащими до 40–50% вещества. В связи с этим возникает потребность построения математических моделей сред, которые бы в явном виде учитывали геометрические размеры частиц. Решить такую задачу можно, применив модельный подход, основанный на представлении среды системой взаимодействующих неточечных частиц [4–11]. Учет дискретности среды можно осуществить двумя способами. В первом из них [5–7] представительный объем среды рассматривается как ансамбль из N соприкасающихся тел. Вводятся в рассмотрение тангенциальные и нормальные силы в области контактов, и из законов Ньютона выводятся уравнения движения частицы. В результате, движение представительного объема среды описывается системой из N взаимосвязанных уравнений. Применяя далее процедуру усреднения, переходят к уравнениям в частных производных. При втором способе [8–11] среда представляется как регулярная решетка, в узлах которой расположены не материальные точки, а тела конечных размеров. Тела, в отличие от точек, обладают не только трансляционными, но и вращательными (ротационными) степенями свободы, что существенно расширяет кинематические возможности модели. Другим отличием от стандартной теории кристаллических решеток [12] является то, что наличие в узлах тел с конечными размерами позволяет достаточно просто ввести в рассмотрение как центральные, так и нецентральные (моментные) взаимодействия между частицами. Учет микроповоротов относительно центров масс частиц приводит к появлению в зернистых средах нового типа движений – волн микроповоротов. Для заданной структуры решетки составляются выражения кинетической и потенциальной энергий, а также функция Лагранжа, с помощью которой выводятся дифференциально-разностные уравнения движения решетки [13]. Переход от дискретной модели к континуальной производится путем экстраполяции функций, заданных в дискретных точках, непрерывными полями смещений и



Фиг. 1

микроповоротов. Рассматривая различные экстраполяции, можно построить иерархию квазиконтинуальных моделей среды.

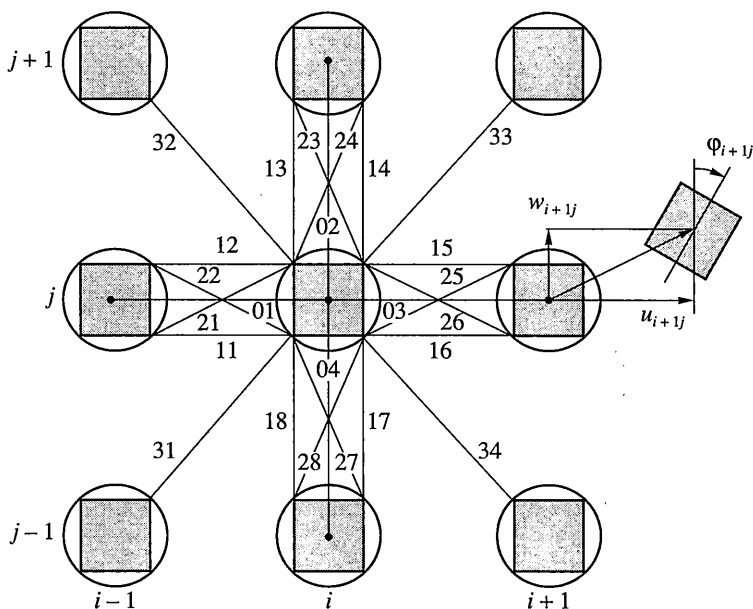
В данной работе идеи, изложенные в статье [11], развиваются на двумерный случай. Зернистую среду можно рассматривать как сплошную среду, состоящую из двух компонент (фаз). Одна компонента – жесткие частицы с массой M и инерцией J , другая – “поровое” пространство между частицами. Оно представляет собой безмассовую упругую среду, через которую передаются силовые и моментные воздействия. Целью работы является получение уравнений движения и выявление взаимосвязей между упругими свойствами зернистого материала и параметрами его микроструктуры.

2. Дискретная модель. Рассматривается двумерная модель зернистой среды в виде квадратной решетки, состоящей из однородных круглых гранул массы M и диаметром d . В исходном состоянии ($t = 0$) они сосредоточены в узлах решетки, и расстояние между центрами масс соседних гранул как вдоль оси x , так и вдоль оси y равно a (фиг. 1). При движении в плоскости каждая частица имеет три степени свободы: смещение центра масс частицы с номером $N = N(i, j)$ по осям x и y (трансляционные степени свободы $u_{i,j}$ и $w_{i,j}$) и поворот относительно центра масс (ротационная степень свободы $\phi_{i,j}$) (фиг. 2). Кинетическая энергия частицы $N(i, j)$ равна

$$T_{i,j} = \frac{M}{2}(\dot{u}_{i,j}^2 + \dot{w}_{i,j}^2) + \frac{J}{2}\dot{\phi}_{i,j}^2, \quad J = \frac{Md^2}{8} \quad (2.1)$$

Здесь J – момент инерции частицы относительно оси, проходящей через центр масс. Точка сверху обозначает производную по времени.

Считается, что частица N взаимодействует лишь с восемью ближайшими соседями по решетке, центры масс четырех из которых лежат на горизонтальной и вертикальной



Фиг. 2

прямых, а других четырех – на диагоналях (фиг. 2). Первые четыре частицы, центры масс которых расположены на окружности радиуса a , в дальнейшем будем называть частицами первой координационной сферы, а остальные – частицами второй координационной сферы (их центры находятся на окружности радиуса $a\sqrt{2}$), причем центры обеих окружностей совпадают с частицей N . Центральные и нецентральные взаимодействия соседних гранул моделируются упругими пружинами четырех типов [11, 13, 14]. Центральные пружины с жесткостью k_0 совместно с горизонтальными и вертикальными пружинами с жесткостью k_1 определяют силовые взаимодействия при растяжении-сжатии материала. Пружины типа k_1 осуществляют также передачу моментов при поворотах частиц. Диагональные пружины с жесткостью k_2 характеризуют силовые взаимодействия частиц при сдвиговых деформациях в материале. И, наконец, пружины с жесткостью k_3 моделируют взаимодействие с зернами второй координационной сферы. На фиг. 2 пружины пронумерованы по следующему правилу: первая цифра номера соответствует типу данной пружины (0, 1, 2 или 3), а вторая цифра определяет ее порядковый номер среди пружин этого вида.

Считается, что смещения зерен малы по сравнению с размерами элементарной ячейки, построенной на двух взаимно перпендикулярных векторах длины a . Взаимодействие частиц при отклонениях от положения равновесия определяется относительными удлинениями пружин (фиг. 2). Потенциальная энергия частицы N , обусловленная ее взаимодействием с восемью ближайшими соседями по решетке, описывается формулой

$$U_N = \frac{k_0}{2} \sum_{n=1}^4 D_{0n}^2 + \frac{k_1}{2} \sum_{n=1}^8 D_{1n}^2 + \frac{k_2}{2} \sum_{n=1}^8 D_{2n}^2 + \frac{k_3}{2} \sum_{n=1}^4 D_{3n}^2 \quad (2.2)$$

Здесь D_{ln} ($l = 0, 1, 2, 3$) – относительные удлинения пружин, соединяющих частицу с ее соседями [11]. Выражения для удлинений D_{ln} , вычисленные в приближении малости ве-

личин $\Delta u_i = (u_{i,j} - u_{i-1,j})/a \sim \Delta w_i = (w_{i,j} - w_{i-1,j})/a \sim \Phi_{i,j} \sim \varepsilon \ll 1$ (здесь ε – мера деформации ячейки) и $\Phi_i = (\Phi_{i,j} + \Phi_{i-1,j})/2 = \Phi_{i,j} - 0.5a\Delta\Phi_i \ll \pi/2$, имеют вид¹:

$$\begin{aligned}
 D_{01} &= a\Delta u_i \sim D_{03}, & D_{04} &= a\Delta w_j \sim D_{02} \\
 D_{11,12} &= a\Delta u_i \pm \frac{ad}{2\sqrt{2}}\Delta\Phi_i \sim D_{16,15}, & D_{18,17} &= a\Delta w_j \pm \frac{ad}{2\sqrt{2}}\Delta\Phi_j \sim D_{13,14} \\
 D_{21,22} &= \frac{a}{r}\left(h\Delta u_i \pm \frac{d}{\sqrt{2}}\Delta w_i \pm \frac{d}{\sqrt{2}}\Phi_i\right) \sim D_{25,26} \\
 D_{28,27} &= \frac{a}{r}\left(h\Delta w_j \pm \frac{d}{\sqrt{2}}\Delta u_j \mp \frac{d}{\sqrt{2}}\Phi_j\right) \sim D_{24,23} \\
 D_{31} &= \frac{a}{\sqrt{2}}(\Delta u_i + \Delta u_j + \Delta w_i + \Delta w_j) \sim D_{33}, & D_{34,32} &= \frac{a}{\sqrt{2}}(\Delta u_i - \Delta u_j - \Delta w_i + \Delta w_j) \\
 h &= a - d/\sqrt{2}, & r &= \sqrt{0.5d^2 + h^2}
 \end{aligned}
 \tag{2.3}$$

где h и r – начальные длины горизонтальных и диагональных пружин соответственно. Здесь удержаны лишь линейные слагаемые для удлинений пружин. Знаками эквивалентности отмечены удлинения пружин, получающиеся из данных заменой всех индексов i на $i + 1$ и j на $j + 1$.

Подстановка (2.3) в (2.2) приводит к следующему выражению для потенциальной энергии, приходящейся на одну частицу с номером $N = N(i, j)$, с точностью до слагаемых порядка ε^2 включительно:

$$\begin{aligned}
 U_{i,j} &= B_1((\Delta u_i)^2 + (\Delta w_j)^2) + B_2((\Delta u_j)^2 + (\Delta w_i)^2) + \frac{d^2}{8}B_3((\Delta\Phi_i)^2 + (\Delta\Phi_j)^2) + \\
 &+ B_4(\Delta u_i\Delta w_j + \Delta u_j\Delta w_i) + B_5(\Delta w_i\Phi_i - \Delta u_j\Phi_j) + B_6\Phi_{ij}^2
 \end{aligned}
 \tag{2.4}$$

Здесь первые два слагаемых с коэффициентами B_1 и B_2 описывают энергию продольных и сдвиговых деформаций, третье и шестое – энергию, связанную с нецентральными (моментными) взаимодействиями частиц, а четвертое и пятое – энергию связи поперечных смещений с продольными смещениями и поворотами частиц соответственно. Коэффициенты B_1, \dots, B_6 , стоящие при этих слагаемых, явным образом выражаются через параметры микромодеи и константы упругостей пружин:

$$\begin{aligned}
 B_1 &= \frac{a^2}{2}\left(k_0 + 2k_1 + \frac{2h^2}{r^2}k_2 + k_3\right), & B_2 &= \frac{a^2}{2}\left(\frac{d^2}{r^2}k_2 + k_3\right) \\
 B_3 &= a^2\left(k_1 + \frac{a^2}{r^2}k_2\right), & B_4 &= a^2k_3, & B_5 &= B_6 = \frac{a^2d^2}{r^2}k_2
 \end{aligned}$$

¹ В (2.3) некоторые формулы записаны для удлинений сразу двух пружин. При этом номера соответствующих пружин указаны через запятую, а в символах \pm и \mp верхний знак берется для удлинений пружины с первым номером, а нижний – со вторым.

Дифференциально-разностные уравнения, описывающие динамику решетки, представляют собой уравнения Лагранжа 2-го рода

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{ij}^{(l)}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_{ij}^{(l)}} = 0, \quad L = \sum_{i,j} (T_{i,j} - U_{i,j})$$

где L – функция Лагранжа, составленная из выражений (2.1) и (2.4), $q_{ij}^{(l)}$ – обобщенные координаты ($q_{ij}^{(1)} = u_{ij}$, $q_{ij}^{(2)} = w_{ij}$, $q_{ij}^{(3)} = \varphi_{ij}$), $\dot{q}_{ij}^{(l)}$ – производные по времени от обобщенных координат (обобщенные скорости). Такие уравнения удобны, например, для численного моделирования отклика системы на внешние динамические воздействия. Однако для сопоставления предлагаемой математической модели зернистой среды с известными теориями твердого тела целесообразно перейти от дискретного описания к континуальному.

3. Длинноволновые аппроксимации дискретной модели. В случае длинноволновых возмущений, когда $\lambda \gg a$ (где λ – характерный пространственный масштаб деформации) от дискретных переменных i и j можно перейти к непрерывным пространственным переменным $x = ia$ и $y = ja$. При этом функции, заданные в дискретных точках, интерполируются непрерывными функциями и их частными производными:

$$u_{i\pm 1, j\pm 1}(t) = u(x \pm a, y \pm a, t) = u(x, y, t) \pm a \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{a^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \pm \frac{a^3}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + 3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial y} + 3 \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial y^2} + \frac{\partial^3 u}{\partial y^3} \right) + \dots \quad (3.1)$$

Аналогичные разложения используются и для функций $w_{i\pm 1, j\pm 1}(t)$ и $\varphi_{i\pm 1, j\pm 1}(t)$. В зависимости от количества удерживаемых слагаемых в (3.1) можно рассматривать различные приближения дискретной модели зернистой среды.

Первое приближение (континуальная модель). Если в разложениях (3.1) ограничиться учетом слагаемых лишь порядка $O(a)$, что соответствует локальной теории упругости, то двумерная плотность функции Лагранжа L (лагранжиан) среды примет вид:

$$L = \frac{\rho}{2} (u_t^2 + w_t^2 + R^2 \varphi_t^2) - \frac{\rho}{2} [c_1^2 (u_x^2 + w_y^2) + c_2^2 (w_x^2 + u_y^2) + R^2 c_3^2 (\varphi_x^2 + \varphi_y^2) + s^2 (u_x w_y + u_y w_x) + 2\beta (w_x - u_y) \varphi + 2\beta \varphi^2] \quad (3.2)$$

С помощью вариационного принципа Гамильтона–Остроградского из лагранжиана (3.2) выводится система дифференциальных уравнений первого приближения, описывающая динамические процессы в зернистой среде:

$$\begin{aligned} u_{tt} &= c_1^2 u_{xx} + c_2^2 u_{yy} + s^2 w_{xy} - \beta \varphi_y \\ w_{tt} &= c_2^2 w_{xx} + c_1^2 w_{yy} + s^2 u_{xy} + \beta \varphi_x \\ \varphi_{tt} &= c_3^2 (\varphi_{xx} + \varphi_{yy}) + \frac{\beta}{R^2} (u_y - w_x - 2\varphi) \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$c_i = \sqrt{2B_i/\rho a^2} \quad (i = 1-3), \quad s = \sqrt{2B_4/\rho a^2}, \quad \beta = B_5/\rho a^2$$

$$R = \sqrt{JIM} = d/\sqrt{8}, \quad \rho = M/a^2$$

Здесь введены обозначения: c_i ($i = 1-3$) – скорости распространения соответственно продольной, сдвиговой волн и волны микровращений (спиновой волны [11, 13]), s – коэффициент линейной связи между продольными и сдвиговыми волнами, β – параметр линейной связи волны микровращений с поперечной и продольной, R – радиус инерции микрочастиц среды относительно центра масс, ρ – среднее значение плотности двумерной зернистой среды.

Система (3.3) отличается от уравнений классической теории упругости [15] появлением дополнительного уравнения для волны микровращений. При континуальном подходе оно возникает как следствие закона сохранения момента количества движения, если вводятся в рассмотрение внутренние моменты частиц среды [16]. Следует отметить, что третье уравнение (3.3), описывающее микроповороты частиц, принципиально отличается от первых двух. Оно имеет однородное в пространстве и осциллирующее во времени решение, удовлетворяющее уравнению $\Phi_{tt} + \omega_0^2 \Phi = 0$, где $\omega_0 = \sqrt{2\beta/R^2}$ – собственная частота микроповоротов. При частотах $\omega \leq \omega_0$ микровращения представляют собой локализованные возмущения и не распространяются.

Коэффициенты уравнений (3.3) выражаются через силовые постоянные k_0, k_1, k_2, k_3 и диаметр частиц d :

$$\rho c_1^2 = k_0 + 2k_1 + \frac{2h^2}{r^2} k_2 + k_3, \quad \rho c_2^2 = \frac{d^2}{r^2} k_2 + k_3, \quad \rho c_3^2 = 2 \left(k_1 + \frac{a^2}{r^2} k_2 \right) \quad (3.4)$$

$$\rho s^2 = 2k_3, \quad \rho \beta = d^2 k_2 / r^2$$

Заметим, что следствием второго, четвертого и пятого равенств (3.4) является соотношение $2c_2^2 - s^2 = 2\beta$. Это говорит о том, что из 5 коэффициентов уравнений (3.3) лишь 4 являются независимыми. Кроме того, из четвертого соотношения (3.4) вытекает необходимость учета взаимодействия с частицами второй координационной сферы. Если его не учитывать, то обращается в ноль величина ρs^2 , что противоречит теории упругости.

В свою очередь, параметры силового взаимодействия частиц k_0, k_1, k_2 и k_3 можно выразить через макрохарактеристики среды:

$$k_3 = \rho s^2 / 2, \quad k_2 = \rho \beta \frac{r^2}{d^2} = \frac{\rho r^2}{2d^2} (2c_2^2 - s^2) \quad (3.5)$$

$$k_1 = \frac{\rho}{2} \left(c_3^2 - \frac{a^2}{d^2} (2c_2^2 - s^2) \right), \quad k_0 = \rho (c_1^2 - c_2^2 - c_3^2) + \frac{\rho a \sqrt{2}}{d} (2c_2^2 - s^2)$$

Таким образом, выражения (3.4) и (3.5) устанавливают взаимно однозначные соответствия между параметрами микромоделей и макрохарактеристиками зернистой среды. Эту взаимосвязь можно использовать, в частности, для диагностики материалов с микроструктурой по данным акустических экспериментов.

Второе приближение (квазиконтинуальная модель). Если в разложениях (3.1) учесть слагаемые до порядка $O(a^2)$ включительно (это соответствует градиентному приближению нелокальной теории упругости [4, 17]), то двумерная плотность функции Лагранжа L примет вид:

$$L = \frac{\rho}{2} (u_t^2 + w_t^2 + R^2 \Phi_t^2) - \frac{\rho}{2} \left[c_1^2 (u_x^2 + w_y^2) + c_2^2 (w_x^2 + u_y^2) + R^2 c_3^2 (\Phi_x^2 + \Phi_y^2) + s^2 (u_x w_y + u_y w_x) + 2\beta (w_x - u_y) \Phi + 2\beta \Phi^2 + \frac{a^2}{4} (c_1^2 (u_{xx}^2 + w_{yy}^2) + c_2^2 (w_{xx}^2 + u_{yy}^2) + R^2 c_3^2 (\Phi_{xx}^2 + \Phi_{yy}^2) + s^2 (u_{xx} w_{yy} + u_{yy} w_{xx})) \right]$$

В данном приближении система дифференциальных уравнений, описывающая взаимодействие продольных, поперечных и спиновых волн в зернистой среде имеет вид:

$$\begin{aligned} u_{tt} &= c_1^2 u_{xx} + c_2^2 u_{yy} + s^2 w_{xy} - \beta \varphi_y + \frac{a^2}{4} (c_1^2 u_{xxxx} + c_2^2 u_{yyyy} + s^2 w_{xxyy}) \\ w_{tt} &= c_2^2 w_{xx} + c_1^2 w_{yy} + s^2 u_{xy} + \beta \varphi_x + \frac{a^2}{4} (c_2^2 w_{xxxx} + c_1^2 w_{yyyy} + s^2 u_{xxyy}) \\ \varphi_{tt} &= c_3^2 (\varphi_{xx} + \varphi_{yy}) + \frac{\beta}{R^2} (u_y - w_x - 2\varphi) + \frac{a^2}{4} c_3^2 (\varphi_{xxxx} + \varphi_{yyyy}) \end{aligned} \quad (3.6)$$

Уравнения (3.6) отличаются от (3.3) наличием дополнительных слагаемых, содержащих старшие производные. В этом случае распространение волн вдоль оси x описывается уравнениями

$$\begin{aligned} u_{tt} &= c_1^2 u_{xx} + \frac{a^2}{4} c_1^2 u_{xxxx}, \quad w_{tt} = c_2^2 w_{xx} + \beta \varphi_x + \frac{a^2}{4} c_2^2 w_{xxxx} \\ \varphi_{tt} &= c_3^2 \varphi_{xx} - \frac{2\beta}{R^2} \varphi + \frac{a^2}{4} c_3^2 \varphi_{xxxx} - \frac{\beta}{R^2} w_x \end{aligned}$$

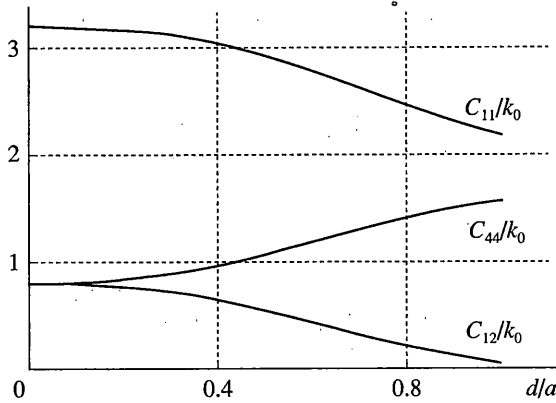
Отсюда видно, что у продольной волны появляется высокочастотная дисперсия, которая не учитывается локальной теорией [10, 11]. Таким образом, уравнения второго приближения позволяют учесть дисперсию продольных волн, экспериментально наблюдающуюся в алюминиевых сплавах и композитах [18, 19]. Заметим, что к аналогичным уравнениям приводит и учет нелокальности взаимодействия частиц среды [17]. Отличие состоит в том, что в (3.6) все коэффициенты перед старшими производными находятся из разложения (3.1) и всегда положительные, а в уравнениях нелокальной теории коэффициенты определяются постоянными силовыми взаимодействиями с частицами третьей и четвертой координационных сфер и могут быть отрицательными [17].

4. Влияние микроструктуры на константы макроупругости. Исследуем влияние микроструктуры на эффективные константы макроупругости в рамках модели первого приближения (3.3). Для выявления физико-механического смысла входящих в нее коэффициентов удобно провести сопоставление уравнений (3.3) с известными континуальными моделями. Так, например, в низкочастотной области, когда можно пренебречь вращательными степенями свободы частиц (т.е. $\varphi = 0$), уравнения (3.3) совпадают с двумерными уравнениями Ламе для анизотропной среды с кубической симметрией [20]:

$$\begin{aligned} \rho_V u_{tt} &= C_{11} u_{xx} + C_{44} u_{yy} + (C_{12} + C_{44}) w_{xy} \\ \rho_V w_{tt} &= C_{44} w_{xx} + C_{11} w_{yy} + (C_{12} + C_{44}) u_{xy} \end{aligned} \quad (4.1)$$

Здесь $\rho_V = \rho/a$ – “объемная” плотность среды. Из сравнения коэффициентов в (3.3) и (4.1) находится связь между скоростями распространения продольной (c_1) и сдвиговой (c_2) волн и параметром s , с одной стороны, и упругими постоянными второго порядка C_{11} , C_{12} и C_{44} , с другой:

$$c_1^2 = \frac{C_{11}}{\rho_V}, \quad c_2^2 = \frac{C_{44}}{\rho_V}, \quad s^2 = \frac{C_{12} + C_{44}}{\rho_V} \quad (4.2)$$



Фиг. 3

Используя соотношения (3.4) и (4.2), коэффициенты матрицы упругих постоянных можно выразить через параметры микроструктуры материала:

$$C_{11} = \frac{k_0 + 2k_1 + k_3}{a} + \frac{2(a\sqrt{2} - d)^2 k_2}{d^2 + (a\sqrt{2} - d)^2 a}$$

$$C_{12} = \frac{k_3}{a} - \frac{2s^2}{d^2 + (a\sqrt{2} - d)^2 a} \frac{k_2}{a} \quad (4.3)$$

$$C_{44} = \frac{k_3}{a} + \frac{2d^2}{d^2 + (a\sqrt{2} - d)^2 a} \frac{k_2}{a}$$

Из последних двух выражений (4.3) следует, что при любых значениях размеров зерен $d > 0$ выполняется неравенство $C_{44} > C_{12}$. Однако в кубических кристаллах часто встречаются ситуации, когда $C_{44} < C_{12}$. Расширить границы применимости данной модели можно, например, за счет учета внутренних напряжений в материале [14]. Следует также отметить, что даже при отсутствии микроповоротов частиц “память” о зернистой структуре среды остается в виде зависимостей эффективных модулей упругости от параметров микроструктуры. Так, при стремлении размера зерна к нулю из (4.3) вытекает равенство $C_{12} = C_{44}$, являющееся соотношением Коши для кристаллов с кубической симметрией. Одним из условий выполнения этого равенства является наличие в среде лишь центральных сил взаимодействия между частицами [20, 21], т.е. $k_1 = k_2 = 0$. Если среда состоит из материальных точек, то из (4.3) следует, что модули упругости равны $C_{11}^0 = k_0 + k_3$, $C_{12}^0 = C_{44}^0 = k_3$.

На фиг. 3 приведен графический анализ зависимостей нормированных констант упругости второго порядка от относительного размера зерна d/a при значениях силовых констант $k_1/k_0 = 0.1$, $k_2/k_0 = 0.6$, $k_3/k_0 = 0.8$. При выборе значений силовых констант предполагалось, что основную роль играют центральные взаимодействия. Нецентральные взаимодействия считались сравнительно слабыми. Из рисунка видно, что с ростом размеров зерен величины упругих модулей C_{11} и C_{12} монотонно уменьшаются, а C_{44} , напротив, монотонно увеличивается.

Выражения силовых констант микромодели через модули упругости среды имеют вид:

$$\begin{aligned} k_3 &= \frac{a}{2}(C_{44} + C_{12}), \quad k_2 = \frac{a}{4}(C_{44} - C_{12}) \left(1 + 2 \left(\frac{a}{d} - \frac{\sqrt{2}}{2} \right)^2 \right) \\ k_0 + 2k_1 &= aC_{11} - \frac{a}{2}(C_{44} + C_{12}) - a(C_{44} - C_{12}) \left(\frac{a}{d} - \frac{\sqrt{2}}{2} \right)^2 \end{aligned} \quad (4.4)$$

Эти соотношения могут быть полезны при построении дискретных моделей сред по известным модулям упругости и характерным размерам частиц.

В механике материалов для характеристики анизотропной среды часто используют осредненные упругие константы Ламе λ и μ . Так, усреднение Фойхта для кубических кристаллов [22] приводит к следующим выражениям:

$$\lambda = C_{12} - H/5, \quad \mu = C_{44} - H/5, \quad H = 2C_{44} + C_{12} - C_{11}$$

Здесь H – так называемый фактор анизотропии. Он выражается через параметры микромодели:

$$H = 2k_3 - k_0 - 2k_1 + \frac{4a(d\sqrt{2} - a)}{d^2 + (a\sqrt{2} - d)^2} k_2$$

Из условия $H = 0$ можно найти значения параметров микроструктуры, при которых макроскопические свойства среды остаются изотропными. В частности, квадратная решетка из точечных частиц является изотропной при $2k_3 = k_0 + 2k_1 + 3k_2$.

5. Сопоставление с теорией Коссера. Представляет интерес сравнение уравнений (3.3) с уравнениями динамики двумерного континуума Коссера [13, 15], состоящего из центрально-симметричных частиц, лагранжиан которого имеет вид:

$$\begin{aligned} L &= \frac{\rho}{2}(u_t^2 + w_t^2 + R^2 \varphi_t^2) - \frac{1}{2} \left[B_{11}(u_x^2 + w_y^2) + \left(B_{44} + \frac{\kappa}{2} \right) (w_x^2 + u_y^2) + \gamma(\varphi_x^2 + \varphi_y^2) + \right. \\ &\left. + \left(B_{12} + B_{44} - \frac{\kappa}{2} \right) (u_x w_y + u_y w_x) + 2\kappa(w_x - u_y)\varphi + 2\kappa\varphi^2 \right] \end{aligned} \quad (5.1)$$

Здесь B_{11} , B_{12} и B_{44} – константы макроупругости второго порядка, а γ и κ – феноменологические константы, характеризующие микроструктуру среды.

Из сопоставления лагранжианов (3.2) и (5.1) видно, что акустические характеристики среды можно выразить через упругие постоянные второго порядка и константы микроструктуры:

$$c_1^2 = \frac{B_{11}}{\rho_V}, \quad c_2^2 = \frac{2B_{44} + \kappa}{2\rho_V}, \quad s^2 = \frac{2B_{12} + 2B_{44} - \kappa}{2\rho_V}, \quad c_3^2 = \frac{\gamma}{\rho_V R^2}, \quad \beta = \frac{\kappa}{\rho_V} \quad (5.2)$$

Обратная зависимость с учетом связи $2c_2^2 - s^2 = 2\beta$ имеет вид:

$$B_{11} = \rho_V c_1^2, \quad B_{12} = \frac{\rho_V s^2}{2}, \quad B_{44} = \frac{\rho_V}{4}(2c_2^2 + s^2), \quad \kappa = \rho_V \beta, \quad \gamma = \rho_V c_3^2 \quad (5.3)$$

Следует отметить, что введенные в (5.1) константы макроупругости второго порядка (B_{ij}) и константы Ламе (C_{ij}), вообще говоря, отличаются друг от друга. Действительно,

положив в (5.1) $\varphi = 0$, находим $B_{11} = C_{11}$, $B_{44} + \kappa/2 = C_{44}$, $B_{12} - \kappa = C_{12}$. Из второго и третьего равенств (5.3) и второго выражения (5.2) вытекает соотношение $B_{44} - B_{12} = \kappa/2$, свидетельствующее о том, что нарушение соотношения Коши для кристаллов с кубической симметрией (т.е. условие центрально-симметричного взаимодействия) обусловлено параметром микроструктуры κ , отвечающим за связь между микроповоротами частиц и сдвиговыми деформациями. От него также зависит значение критической частоты волны микровращений $\omega_0 = \sqrt{2\kappa/\rho_V R^2}$.

С помощью выражений (5.3) и (3.4) можно выразить константы среды Коссера через параметры микроструктуры (см. также (4.3)):

$$B_{11} = \frac{k_0 + 2k_1 + k_3}{a} + \frac{2(a\sqrt{2} - d)^2}{d^2 + (a\sqrt{2} - d)^2} \frac{k_2}{a}, \quad B_{12} = \frac{k_3}{a}$$

$$B_{44} = \frac{k_3}{a} + \frac{d^2}{d^2 + (a\sqrt{2} - d)^2} \frac{k_2}{a}$$

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

Похожие соотношения были получены в работе [13], однако там частицы считались точечными, и потому отсутствовала зависимость констант от размеров зерен.

6. Оценка параметров спиновой волны. Поскольку до сих пор нет прямых экспериментальных доказательств существования спиновых волн в твердых телах с зернистой структурой, то вызывает интерес оценка значений скорости и критической частоты такой волны в зернистой среде. Из (3.4) следует, что скорость c_3 следующим образом зависит от параметров микроструктуры:

$$\rho_V c_3^2 = 2 \left(k_1 + \frac{2a^2}{d^2 + (a\sqrt{2} - d)^2} k_2 \right) \quad (6.1)$$

Из (6.1) с помощью соотношений (4.4) можно получить выражение для скорости спиновой волны:

$$c_3^2 = \frac{2}{\rho_V(K+2)} \left[C_{11} - C_{44} + \frac{K + 4\sqrt{2}p}{2p^2} (C_{44} - C_{12}) \right]$$

$$K = k_0/k_1, \quad p = d/a$$

где K – отношение между центральными и нецентральными взаимодействиями, p – относительный размер частицы. В таблице приведены вычисленные по известным экспериментальным данным (при комнатной температуре) значения скорости спиновой волны, а также приведенной критической частоты спиновой волны $\omega_0 d = \sqrt{8(C_{44} - C_{12})/\rho_V}$ для некоторых кубических кристаллов [23]. При вычислениях принималось $p = 0.9$ и $K = 10$ (центральные взаимодействия доминируют). Как показали расчеты, при значениях $0.9 < p < 0.99$ величина c_3 изменяется менее чем на 10%.

Из таблицы видно, что для всех рассмотренных материалов скорость спиновой волны является наименьшей. Оценки показывают, что в нанокристаллической среде с диа-

Кристалл	C_{11}	C_{12}	C_{44}	$H,$ 10^9 Н/м^2	$\rho_V, \text{ кг/м}^3$	c_1	c_2	c_3	$\omega_0 d, \text{ м/с}$
	10^9 Н/м^2					м/с			
LiF	113.00	48.00	63.00	61	2600	6593	4922	3264	46150
NaF	97.00	25.60	28.00	-15.4	2800	5890	3162	2283	6860
NaBr	32.55	13.14	13.26	7.11	3200	3190	2036	1026	300

метром зерна $d = 100 \text{ нм} = 10^{-7} \text{ м}$ критические частоты лежат в интервале от $\omega_0 \approx 461.5 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$ (для LiF) до $\omega_0 \approx 3 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$ (для NaBr). В работе [13] приводятся данные для гипотетической зернистой среды типа бетона, в которой критические частоты на несколько порядков ниже.

7. Заключение. Разработана двумерная математическая модель зернистой среды, которая отличается от классической теории упругости наличием дополнительного уравнения для волны микровращений. По своей структуре полученные уравнения совпадают с уравнениями анизотропного континуума Коссера с центрально-симметричными частицами. Однако в отличие от теории Коссера в предложенной модели коэффициенты явным образом зависят от размеров частиц и параметров их силового взаимодействия. Это позволяет теоретически проанализировать зависимости скорости продольной волны от размеров зерен. Проведенные в работе оценки показывают, что в кубических кристаллах скорость волны микровращений, как правило, меньше скоростей трансляционных волн, а критическая частота этой волны лежит в гиперзвуковой области. Для низких частот, когда можно пренебречь вращательными степенями свободы частиц, уравнения (3.3) вырождаются в уравнения Ламе для среды с кубической симметрией (4.1). При этом “память” о структуре остается в виде зависимостей между эффективными макрокопическими характеристиками среды и параметрами микромодеи.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантами РФФИ (проект 04-02-17156) и Фонда содействия отечественной науке.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Физическая мезомеханика и компьютерное моделирование материалов / Под ред. В.Е. Панина: В 2-х т. Новосибирск: Наука, 1995. Т. 1. 297 с.; Т. 2. 320 с.
2. Валиев Р.З., Александров И.В. Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией. М.: Логос, 2000. 272 с.
3. Гусев А.И., Ремпель А.А. Нанокристаллические материалы. М.: Физматлит, 2001. 222 с.
4. Кунин И.А. Теория упругих сред с микроструктурой. М.: Наука, 1975. 415 с.
5. Christoffersen J., Mehrabadi M.M., Nemat-Nasser S.A. A micromechanical description of granular material behavior // Trans. ASME. J. Appl. Mech. 1981. V. 48. № 2. P. 339–344.
6. Богданов А.Н., Скворцов А.Т. Нелинейные сдвиговые волны в зернистой среде // Акуст. ж. 1992. Т. 38. Вып. 3. С.408–412.
7. Chang C.S., Ma L. A micromechanical-based micropolar theory for deformation of granular solids // Intern. J. Solids and Structures. 1994. V. 28. № 1. P. 67–87.
8. Pouget J., Askar A., Maugin G.A. Lattice model for elastic ferroelectric crystals: Microscopic approach // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. № 9. P. 6304–6325.
9. Gendelman O.V., Manevitch L.I. The description of polyethylene crystal as a continuum with internal degrees of freedom // Intern. J. Solids and Structures. 1996. V. 33. № 12. P. 1781–1798.
10. Драгунов Т.Н., Павлов И.С., Потапов А.И. Ангармонические взаимодействия упругих и ориентационных волн в одномерных кристаллах // Физика твердого тела. 1997. Т. 39. № 1. С. 137–144.

11. Лисина С.А., Потапов А.И., Нестеренко В.Ф. Нелинейная гранулированная среда с вращением частиц. Одномерная модель // Акуст. ж. 2001. Т. 47. № 5. С. 685–693.
12. Борн М., Кунь Х. Динамическая теория кристаллических решеток. М.: Изд-во иностр. лит., 1958. 488 с.
13. Suiker A.S.J., Metrikine A.V., de Borst R. Comparison of wave propagation characteristics of the Cosserat continuum model and corresponding discrete lattice models // Intern. J. Solids and Structures. 2001. V. 38. № 9. P. 1563–1583.
14. Potarov A.I., Pavlov I.S., Gorshkov K.A., Maugin G.A. Nonlinear interactions of solitary waves in a 2D lattice // Wave Motion. 2001. V. 34. № 1. P. 83–95.
15. Новацкий В. Теория упругости. М.: Мир, 1975. 872 с.
16. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Т. 1. М.: Наука, 1970. 492 с.
17. Косевич А.М. Теория кристаллической решетки (физическая механика кристаллов). Харьков: Вища шк., 1988. 304 с.
18. Савин Г.Н., Лукашев А.А., Лыско Е.М. Распространение упругих волн в твердом теле с микроструктурой // Прикл. механика, 1970. Т. 6. № 7. С. 48–52.
19. Ерофеев В.И., Родюшкин В.М. Наблюдение дисперсии упругих волн в зернистом композите и математическая модель для ее описания // Акуст. ж. 1992. Т. 38. № 6. С. 1116–1117.
20. Федоров Ф.И. Теория упругих волн в кристаллах. М.: Наука, 1965. 388 с.
21. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Т. 7. Физика сплошных сред. М.: Мир, 1977. 288 с.
22. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. / Под ред. Э.М. Надгорного и Ю.А. Осипьяна, М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
23. Францевич И.Н., Воронов Ф.Ф., Бакута С.А. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. / Под ред. И.Н. Францевича. Киев: Наук. думка, 1982. 286 с.

Н. Новгород

Поступила в редакцию
15.02.2005