

УДК 538.911, 539.32

С.С. Стволова, И.Ю. Зубко

Пермский национальный исследовательский
политехнический университет,
Пермь, Россия

**О ВОЗМОЖНОСТИ ОПИСАНИЯ УПРУГОЙ АНИЗОТРОПИИ
В ДИСКРЕТНО-АТОМИСТИЧЕСКОМ ПОДХОДЕ НА ПРИМЕРЕ
ПЛОСКИХ КВАЗИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР**

Прогнозирование физико-механических свойств наноструктурированных материалов в рамках дискретно-атомистического моделирования, зачастую представляющего собой единственный способ исследования таких объектов, накладывает ряд требований на используемые потенциалы межатомного взаимодействия. В частности, используемые потенциалы должны описывать анизотропию механических свойств кристаллических материалов. Известно множество потенциалов различного типа: двух- и многочастичные, метод погруженного атома, потенциалы ковалентной связи. Получаемые с их помощью оценки механических свойств в ряде случаев могут даже качественно отличаться от экспериментальных данных. В работе для демонстрации возможностей различных потенциалов путем описания анизотропии упругих свойств кристаллических материалов получено инвариантное представление тензора упругих модулей в виде конечных сумм для потенциалов произвольного типа. Это позволяет исследовать возможность различных потенциалов описывать анизотропию упругого отклика. С помощью полученного инвариантного представления тензора линейно-упругих модулей на примере двумерных квазикристаллических структур продемонстрированы возможности нескольких двух- и многочастичных потенциалов, построенных на основе предложенной авторами модификации потенциала Морзе. Показано, что, в отличие от многочастичного потенциала погруженного атома, парные потенциалы в принципе не могут описать анизотропии упругих свойств.

Ключевые слова: дискретно-атомистическое моделирование, упругая анизотропия, плоские квазикристаллы, многочастичные потенциалы, метод погруженного атома, обобщенный потенциал Морзе.

S.S. Stvolova, I.Iu. Zubko

Perm National Research Polytechnic University,
Perm, Russian Federation

**ON ABILITY OF DISCRETE ATOMISTIC APPROACH
TO DISCRIBE ELASTIC ANISOTROPY BY THE EXAMPLES
OF PLAIN QUASI-CRYSTALLINE STRUCTURES**

Prediction of physical and mechanical properties of nanostructured materials is usually realized within discrete atomistic simulation. Such approach often provides a unique way of studying nanomaterials and requires some restrictions for the used interatomic potentials. A huge amount of different potentials

has been used, i.e. pairwise, many-particle potentials, embedded atom method, covalent bond potentials etc. It is well known that computed mechanical properties in some cases may differ from experimental data, even qualitatively. The paper aims at the demonstration of different potentials ability to explain elastic anisotropy by studying invariant representation of tensor of elastic moduli in the exact form which has been built using different potentials of interatomic interaction. It makes it possible to study the prospects of different potentials for describing anisotropy of material elastic response. The authors demonstrated the abilities of two-particle or multi-particle potentials of interatomic interaction based on the Morse potential in describing anisotropy of materials elastic properties using the obtained invariant representation by the examples of two-dimensional quasi-crystalline structures. The pair-wise potentials in contrast to the many-particle embedded atom potential are shown to be unable to explain elastic anisotropy.

Keywords: discrete-atomistic approach, elastic anisotropy, plain quasi-crystals, many-particles potentials, embedded atom method, generalized Morse's potential.

Введение

В связи с широким применением новых композиционных материалов, армированных наночастицами, и других наноструктурированных материалов, возникает необходимость прогнозирования их физико-механических свойств. Классические подходы механики континуума напрямую не применимы к таким объектам, как отдельная наночастица или элемент наноструктурированного материала. Однако тела с малым числом атомов являются удобным объектом для изучения в рамках дискретно-атомистических подходов. В работе рассматриваются материалы с кристаллическим строением с произвольным типом связи, потенциал межатомного взаимодействия для которой записывается в виде, допускающем применение и потенциала погруженного атома для металлической связи, и многочастичных потенциалов, используемых при описании ковалентной связи в углеродных материалах. Целью работы является исследование возможности потенциалов различного типа описывать анизотропию тензора линейно-упругих свойств.

При постановке задачи оценки упругих свойств наночастиц используются понятия механики сплошной среды, которые напрямую к подобным объектам с дискретным строением применять нельзя. Будем считать, что образцу конечного размера ставится в соответствие упругое сплошное тело, проявляющее аналогичную реакцию на приложение внешних механических воздействий. Для определения деформаций кристалла задаются две его конфигурации: начальная и текущая. Однородной деформацией кристаллического нанобразца будем называть изменения длин и углов между прямыми линиями, соединяющими атомы, описываемые однородным тензором второго ранга, который соответствует аффинору \mathbf{F} , используемому в механике континуума. Пусть \mathbf{R}_k – это радиус-вектор произвольного k -го атома

образца в начальной конфигурации, тогда в текущей конфигурации его положение задается вектором $\mathbf{r}_k = \mathbf{F} \cdot \mathbf{R}_k$ (правило Коши–Борна [1, 2]). Задача определения упругих модулей наночастиц рассматривается в энергетической постановке, согласно которой плотность потенциальной энергии деформированного кристаллического образца приравнивается к плотности упругой энергии тела и искомые упругие модули находятся как ее вторые производные по параметрам деформирования вблизи отсчетной конфигурации.

При описании малых упругих деформаций твердых тел в большинстве работ используется модель линейно-упругой среды, когда в качестве меры деформаций рассматривается линейный тензор малых деформаций. Закон Гука для анизотропного линейно-упругого тела имеет вид линейной связи тензора напряжений Коши $\boldsymbol{\sigma}$ и тензора $\boldsymbol{\varepsilon}$, задаваемой с помощью анизотропного тензора четвертого ранга $\mathbf{\Pi}$ линейно-упругих свойств материала:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{\Pi} : \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (1)$$

При использовании симметричных $\boldsymbol{\sigma}$ и $\boldsymbol{\varepsilon}$ тензор $\mathbf{\Pi}$ симметричен относительно перестановок внутри первой и последней пар индексов:

$$\Pi_{ijkl} = \Pi_{jikl} = \Pi_{ijlk}. \quad (2)$$

Массовая плотность внутренней энергии u совпадает в отсутствии тепловых явлений с плотностью упругой энергии и для линейно-упругой среды имеет вид

$$\hat{\rho} u = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{\Pi} : \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (3)$$

Эта величина представляет собой положительно определенную квадратичную форму, т.е. $u > 0$ при $\boldsymbol{\varepsilon} \neq 0$ и $u = 0$ при $\boldsymbol{\varepsilon} = 0$. Отсюда следует дополнительная симметрия $\mathbf{\Pi}$ относительно перестановки пар индексов:

$$\Pi_{ijkl} = \Pi_{klij}. \quad (4)$$

Компоненты тензора $\mathbf{\Pi}$ (упругие модули) в анизотропном случае имеют ясный физический смысл в материальных осях, связанных со структурой материала, например в кристаллографических осях для монокристаллов или осях, связанных с ориентацией армирующих элементов композиционного материала. Использование тензора малых

деформаций подразумевает при замене системы отсчета допустимость наложения только малого поворота системы отсчета, поэтому закон (1) применим лишь для деформируемых тел, не испытывающих (больших) поворотов относительно инерциальной системы отсчета, в которой решается задача. По отношению к малым поворотам тензор ε является инвариантным. Второй тензор напряжений Пиолы–Кирхгофа связан с тензором напряжений Коши как $\sigma = J^{-1} \mathbf{F} \cdot \mathbf{P}_{II} \cdot \mathbf{F}^T$ [3] и при малых упругих искажениях выражается через линейный тензор деформаций $\varepsilon = (\mathbf{F} + \mathbf{F}^T) / 2 - \mathbf{I}$:

$$\mathbf{P}_{II} = \mathbf{H} : \varepsilon. \quad (5)$$

1. Энергетический подход при дискретно-атомистическом моделировании

В общем случае потенциальная энергия системы взаимодействующих атомов [4] представляется как сумма

$$\begin{aligned} \Phi = & \sum_{i=1}^M \Phi_1(\mathbf{R}_{(i)}) + \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M \Phi_2(\mathbf{R}_{(ji)}) + \\ & + \sum_{i=1}^{M-2} \sum_{j=i+1}^{M-1} \sum_{k=j+1}^M \Phi_3(\mathbf{R}_{(ji)}, \mathbf{R}_{(ki)}, \mathbf{R}_{(kj)}) + \dots, \end{aligned} \quad (6)$$

где $\mathbf{R}_{(i)}$ – радиус-вектор, задающий положение i -го атома; $\mathbf{R}_{(ij)} = \mathbf{R}_{(j)} - \mathbf{R}_{(i)}$; M – полное число атомов образца; $\Phi_1(\mathbf{R}_{(i)})$ – часть потенциальной энергии атомов, которая не зависит от их взаимодействия, а определяется полем некоторой внешней силы; $\Phi_2(\mathbf{R}_{(ji)})$ – потенциальная энергия парного взаимодействия, или двухчастичный потенциал; $\Phi_3(\mathbf{R}_{(ji)}, \mathbf{R}_{(ki)}, \mathbf{R}_{(kj)})$ – трехчастичный потенциал.

Двухчастичный потенциал межатомного взаимодействия характеризует изменение потенциальной энергии при изменении расстояния между парами атомов. Этот потенциал с помощью некоторой функциональной зависимости описывает, что при сближении два атома начинают отталкиваться, а при удалении – притягиваться. Поскольку атомы нельзя сдвинуть бесконечно близко, то в ноле такая

функция стремится к бесконечности. При увеличении расстояния между парой атомов эта функция выходит на горизонтальную асимптоту, а сила взаимодействия, модуль которой равен тангенсу угла наклона касательной к графику функции $\Phi_2(\mathbf{R}_{(ji)})$, стремится к нулю. Трехчастичный потенциал учитывает не только расстояние между двумя атомами, как в случае двухчастичного потенциала, но и влияние конфигурации ближайших атомов. Силы взаимодействия каждого выбранного атома со всеми остальными атомами образца, вычисляемые с помощью двухчастичного потенциала, аддитивны. Для многочастичных потенциалов аддитивности сил взаимодействия нет. В рассматриваемом случае действие внешних сил не рассматривается, поэтому далее $\Phi_1(\mathbf{R}_{(i)}) = 0$.

При исследовании механических свойств кристаллов рассматриваются конфигурации с однородным распределением атомов, каждая из которых характеризуется набором параметров межатомного расстояния (для простых решеток это один параметр, для сложных решеток параметров может быть несколько). Принимается, что отсчетная конфигурация является равновесной и может быть определена из условия минимума потенциальной энергии набора взаимодействующих атомов по параметрам решетки.

Для расчета упругих модулей кристаллических систем в рамках энергетического подхода в статической постановке [5–7] принимается, что плотность упругой энергии и плотность потенциальной энергии системы взаимодействующих атомов кристалла в текущей конфигурации совпадают. Тогда производные от плотности потенциальной энергии дискретной системы атомов по мерам деформации дадут выражения для вычисления компонент тензоров напряжений (с помощью первых производных) и линейно-упругих свойств (вторые производные). Пусть $\hat{\Phi}(\mathbf{F})$ – полная потенциальная энергия однородно деформированного кристаллического образца в текущей конфигурации. Энергия образца в отсчетной конфигурации $\Phi_0 = \hat{\Phi}(\mathbf{I})$ соответствует материалу с заданной кристаллической структурой и минимальным значением потенциальной энергии по параметрам решетки. Относя изменение полной потенциальной энергии однородно деформированного кри-

сталлического образца к его объему в отсчетной конфигурации Ω_0 , получим плотность упругой энергии и тензор напряжений Пиолы–Кирхгофа:

$$\mathbf{P} = \Omega_0^{-1} \partial(\hat{\Phi}(\mathbf{F}) - \Phi_0) / \partial \mathbf{F}^T = \Omega_0^{-1} \partial \hat{\Phi}(\mathbf{F}) / \partial \mathbf{F}^T. \quad (7)$$

Тензор напряжений Коши $\boldsymbol{\sigma}$ находится как $\boldsymbol{\sigma} = J^{-1} \mathbf{F} \cdot \mathbf{P}$, где $J = \det \mathbf{F} = \hat{\Omega} / \Omega_0$, т.е. тензор напряжений Коши $\boldsymbol{\sigma} = \hat{\Omega}^{-1} \mathbf{F} \cdot \partial \hat{\Phi}(\mathbf{F}) / \partial \mathbf{F}^T$.

Рассмотрим представление потенциальной энергии в случае учета только двухчастичного взаимодействия, используя для простоты вместо набора векторов, соединяющих различные пары атомов, обозначения $\Delta \mathbf{R}$ и $\Delta \mathbf{r}$ в двух конфигурациях:

$$\hat{\Phi}(\mathbf{F}) = \sum \hat{\Phi}(|\Delta \mathbf{r}|) = \sum \hat{\Phi}(|\mathbf{F} \cdot \Delta \mathbf{R}|) = \sum \hat{\Phi}(\sqrt{\Delta \mathbf{R} \cdot \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F} \cdot \Delta \mathbf{R}}),$$

где $\sum(\cdot)$ – упрощенное обозначение суммы потенциалов (6).

Производная по тензору деформационного градиента \mathbf{F} в этом случае приводит к выражению:

$$\begin{aligned} \Omega_0 \mathbf{P} &= \partial \hat{\Phi}(\mathbf{F}) / \partial \mathbf{F}^T = \sum \hat{\Phi}'(|\Delta \mathbf{r}|) \partial \sqrt{\Delta \mathbf{R} \cdot \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F} \cdot \Delta \mathbf{R}} / \partial \mathbf{F}^T = \\ &= \sum \hat{\Phi}'(|\Delta \mathbf{r}|) |\Delta \mathbf{r}|^{-1} \Delta \mathbf{R} \Delta \mathbf{r}, \end{aligned}$$

следовательно, для тензора напряжений Коши получим выражение

$$\boldsymbol{\sigma} = \hat{\Omega}^{-1} \sum \hat{\Phi}'(|\Delta \mathbf{r}|) \Delta \mathbf{r} \Delta \mathbf{r} / |\Delta \mathbf{r}|, \quad \mathbf{P}_{II} = \Omega_0^{-1} \sum \hat{\Phi}'(|\Delta \mathbf{r}|) \Delta \mathbf{R} \Delta \mathbf{R} / |\Delta \mathbf{r}|, \quad (8)$$

симметричное для любого потенциала межатомного взаимодействия.

При учете многочастичного взаимодействия в методе погруженного атома [8–10] потенциальная энергия системы атомов определяется выражением, в котором учтено, что отталкивание всех атомов описывается согласно закону парного взаимодействия, а притяжение – нелинейной функцией $\gamma(\cdot)$, задающей влияние окружения произвольного атома (функция погружения). Окружение определяется множеством S_i номеров атомов, участвующих в формировании электронного газа вокруг i -го атома:

$$\hat{\Phi}(\mathbf{F}) = \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M \varphi^+(\mathbf{r}_{(ji)}) + \sum_{i=1}^M \gamma\left(\sum_{j \in S_i} \varphi^-(\mathbf{r}_{(ji)})\right). \quad (9)$$

Производная от первого слагаемого даст выражение, аналогичное полученной ранее сумме. Второе слагаемое при использовании обозначений $(\varphi^-(\mathbf{r}_{(ij)}))' \equiv \mathbf{f}_{(ij)}^-$:

$$d\gamma\left(\sum_{j \in S_i} \varphi^-(\mathbf{r}_{(ij)})\right)/d\mathbf{F}^T = \gamma'\left(\sum_{j \in S_i} \varphi^-(\mathbf{r}_{(ij)})\right) \sum_{j \in S_i} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{f}_{(ij)}^-,$$

$$\mathbf{P} = \Omega_0^{-1} \left\{ \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M (\varphi^+)' |\mathbf{r}_{(ij)}|^{-1} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{r}_{(ij)} + \sum_{i=1}^M \left(\gamma' \sum_{j \in S_i} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{f}_{(ij)}^- \right) \right\},$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \hat{\Omega}^{-1} \left\{ \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M (\varphi^+)' |\mathbf{r}_{(ij)}|^{-1} \mathbf{r}_{(ij)} \mathbf{r}_{(ij)} + \sum_{i=1}^M \left(\gamma' \sum_{j \in S_i} \mathbf{r}_{(ij)} \mathbf{f}_{(ij)}^- \right) \right\}, \quad (10)$$

$$\mathbf{P}_{\text{II}} = \Omega_0^{-1} \left\{ \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M (\varphi^+)' |\mathbf{r}_{(ij)}|^{-1} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} + \sum_{i=1}^M \left(\gamma' \sum_{j \in S_i} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{F}_{(ij)}^- \right) \right\}, \quad (11)$$

где $\mathbf{F}_{(ij)}^- \equiv \mathbf{F}^{-1} \cdot \mathbf{f}_{(ij)}^-$. Поскольку вектор $\mathbf{f}_{(ij)}^-$ (или $\mathbf{F}_{(ij)}^-$) не обязательно направлен вдоль $\mathbf{r}_{(ij)}$ (или $\mathbf{R}_{(ij)}$), то получаемые тензоры (10–11) могут быть несимметричными.

Для вычисления упругих модулей в несимметричном случае при малых деформациях необходимо найти производную от тензора напряжений (11):

$$\begin{aligned} & d^2u / d\mathbf{F}^2 = \\ & = \Omega_0^{-1} d \left(\sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M (\varphi^+)' |\mathbf{r}_{(ij)}|^{-1} \mathbf{r}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} + \sum_{i=1}^M \left(\gamma' \sum_{j \in S_i} \mathbf{f}_{(ij)}^- \mathbf{R}_{(ij)} \right) \right) / d\mathbf{F}. \end{aligned}$$

В итоге получим тензор четвертого ранга:

$$\begin{aligned} \Omega_0 \partial \mathbf{P}_{\text{II}} / \partial \mathbf{F} = & \sum_{1 \leq i < j \leq M} \left\{ \frac{(\varphi^+)'' |\mathbf{r}_{(ij)}| - (\varphi^+)'}{|\mathbf{r}_{(ij)}|^3} \mathbf{r}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{r}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} + \frac{(\varphi^+)'}{|\mathbf{r}_{(ij)}|} \mathbf{e}_k \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{e}^k \mathbf{R}_{(ij)} \right\} + \\ & + \sum_{i=1}^M \left\{ \gamma'' \left(\sum_{j \in S_i} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{f}_{(ij)}^- \right) \left(\sum_{j \in S_i} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{f}_{(ij)}^- \right) + \gamma' \sum_{j \in S_i} \left(\mathbf{g}_{(ij)} \cdot \mathbf{e}_k \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{e}^k \mathbf{R}_{(ij)} \right) \right\}, \end{aligned}$$

где \mathbf{e}_k – векторы фиксированного пространственного базиса, производные γ' и γ'' функции γ имеют аргумент $\sum_{j \in S_i} \varphi^-(\mathbf{r}_{(ij)})$, а тензор второго ранга $\mathbf{g}_{(ij)}$ определен как $\mathbf{g}_{(ij)} \equiv \partial \mathbf{f}_{(ij)}^- / \partial \mathbf{r}_{(ij)} = \partial^2 \varphi^-(\mathbf{r}_{(ij)}) / \partial \mathbf{r}_{(ij)}^2$.

При малых деформациях $\mathbf{F} \rightarrow \mathbf{I}$ инвариантное представление тензора \mathbf{H} линейно-упругих модулей для кристаллического материала в отсчетной конфигурации имеет вид

$$\begin{aligned} \Omega_0 \mathbf{H} = & \sum_{1 \leq i < j \leq M} \left\{ \frac{(\varphi^+)'' |\mathbf{R}_{(ij)}| - (\varphi^+)'}{|\mathbf{R}_{(ij)}|^3} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} + \right. \\ & \left. + \frac{(\varphi^+)'}{|\mathbf{R}_{(ij)}|} \mathbf{e}_k \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{e}^k \mathbf{R}_{(ij)} \right\} + \sum_{i=1}^M \sum_{j \in S_i} \times \\ & \times \left\{ \gamma'' \left(\sum_{j \in S_i} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{F}_{(ij)}^- \right) \left(\sum_{j \in S_i} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{F}_{(ij)}^- \right) + \gamma' \sum_{j \in S_i} \left(\mathbf{G}_{(ij)} \cdot \mathbf{e}_k \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{e}^k \mathbf{R}_{(ij)} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (12)$$

где $\mathbf{G}_{(ij)} = \partial^2 \varphi^- (\mathbf{R}_{(ij)}) / \partial \mathbf{R}_{(ij)}^2$, $\mathbf{F}_{(ij)}^- = d\varphi^- (\mathbf{R}_{(ij)}) / d\mathbf{R}_{(ij)}$.

В общем случае выражение (12) не обладает симметрией в парах первых и вторых диад, которая возможна только в случае $\mathbf{F}_{(ij)}^- \parallel \mathbf{R}_{(ij)}$. Без учета погружения $\gamma(x) = -1/2x$:

$$\begin{aligned} \Omega_0 \mathbf{H} = & \sum_{1 \leq i < j \leq M} \left\{ \frac{(\varphi^+)'' |\mathbf{R}_{(ij)}| - (\varphi^+)'}{|\mathbf{R}_{(ij)}|^3} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{R}_{(ij)} + \frac{(\varphi^+)'}{|\mathbf{R}_{(ij)}|} \mathbf{e}_k \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{e}^k \mathbf{R}_{(ij)} \right\} - \\ & - \sum_{1 \leq i < j \leq M} \left\{ \mathbf{G}_{(ij)} \cdot \mathbf{e}_k \mathbf{R}_{(ij)} \mathbf{e}^k \mathbf{R}_{(ij)} \right\}. \end{aligned}$$

2. Исследование упругой анизотропии для различных потенциалов

Рассмотрим применение полученных соотношений в частном случае двумерных квазикристаллических структур. Для описания металлической связи в дискретно-атомистическом моделировании используется метод погруженного атома [8–10], являющийся примером многочастичного потенциала. Для того чтобы группы атомов взаимодействовали на большом расстоянии согласно экспериментальным законам (описываются потенциалами Морзе или Ми [11]), а на малых расстояниях учитывалась металлическая (многочастичная) связь, предлагается модификация метода, основанная на применении обобщенного потенциала Морзе:

$$\begin{aligned} \frac{\Phi}{\beta} = \frac{1}{m-n} & \left[\sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M \left\{ n \exp\left(m\gamma\left(\alpha - |\mathbf{r}_{(ji)}|\right)\right) - \right. \right. \\ & \left. \left. - m(1-c_{ij}) \exp\left(n\gamma\left(\alpha - |\mathbf{r}_{(ji)}|\right)\right) \right\} - \right. \\ & \left. - \frac{m}{2} \sum_{i=1}^M \left\{ \sum_{j=1, j \neq i}^M c_{ij} \exp\left(n\gamma\left(|\mathbf{r}_{(ji)}| - \alpha\right)\right)^p \right\}^{1/p} \right], \end{aligned} \quad (13)$$

где M – число всех атомов образца; $m, n \in \mathbf{Z}$, $c_{ij} \in \{0, 1\}$, $p \in \{1, 2\}$; $c_{ij} = 1$ для атомов, участвующих в образовании электронного газа вблизи положения i -го атома, $c_{ij} = 0$ для всех остальных атомов.

Размер окрестности для учета соседей может быть от одной до нескольких координационных сфер. Заданием параметров c_{ij} , учитывающих для каждого атома взаимное притяжение к нему трех ближайших соседей, может быть также описана и ковалентная связь [7]. При $p=1$ и любом числе атомов или для двух изолированных атомов $M=2$ и любого p потенциал (13) совпадает с обобщенным потенциалом Морзе:

$$\frac{\Phi}{\beta} = \frac{1}{m-n} \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M \left\{ n \exp\left(m\gamma\left(\alpha - |\mathbf{r}_{(ji)}|\right)\right) - m \exp\left(n\gamma\left(\alpha - |\mathbf{r}_{(ji)}|\right)\right) \right\}. \quad (14)$$

При условии, что для всех атомов $c_{ij} = 0$ также получается обобщенный потенциал Морзе, при $p=2$ получается аналог потенциала Финниса–Синклера [9]. Параметр α задает равновесное расстояние для изолированной пары атомов, β – энергия связи этих двух атомов. При $m=2$ и $n=1$ получается классический потенциал Морзе:

$$\frac{\Phi}{\beta} = \frac{1}{m-n} \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M \left\{ \exp\left(-2\gamma\left(|\mathbf{r}_{(ji)}| - \alpha\right)\right) - 2 \exp\left(-\gamma\left(|\mathbf{r}_{(ji)}| - \alpha\right)\right) \right\}.$$

Для плоских квазикристаллических структур с осями симметрии различного порядка (примеры – на рисунке) получено, что при использовании парных потенциалов для оси симметрии любого порядка, кроме четвертого, тензор упругих свойств содержит только две ненулевые независимые компоненты. При этом коэффициент Пуассона для этих структур оказывается равным $1/3$, т.е. в действительности получается

только один независимый упругий модуль (таблица). Для кристалла с осью симметрии 4-го порядка коэффициент Пуассона отрицателен и существуют два независимых упругих модуля. Во всех случаях начальная равновесная конфигурация определялась из условия минимума полной потенциальной энергии системы по параметру a межатомного

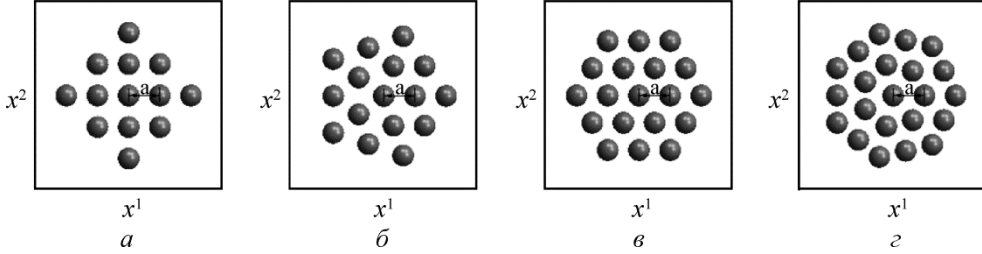


Рис. Элементы плоских квазикристаллических структур с осями симметрии: a – 4-го порядка; b – 5-го порядка; v – 6-го порядка; z – 7-го порядка

Расчетные значения упругих моделей

Ось симметрии	4-го порядка	5-го порядка	6-го порядка	7-го порядка
Потенциал Морзе $m = 2, n = 1,$ $\alpha\gamma = 3, 14$	$H_{1111} = H_{2222} = 25,52\beta / \alpha^2;$ $H_{1122} = H_{1212} = -2,63\beta / \alpha^2;$ $E = 27,27\beta / \alpha^2;$ $\nu = -0,09$	$H_{1111} = H_{2222} = 22,78\beta / \alpha^2;$ $H_{1122} = H_{1212} = 7,59\beta / \alpha^2;$ $E = 20,25\beta / \alpha^2;$ $\nu = 1/3$	$H_{1111} = H_{2222} = 24,48\beta / \alpha^2;$ $H_{1122} = H_{1212} = 8,16\beta / \alpha^2;$ $E = 21,76\beta / \alpha^2;$ $\nu = 1/3$	$H_{1111} = H_{2222} = 22,41\beta / \alpha^2;$ $H_{1122} = H_{1212} = 7,47\beta / \alpha^2;$ $E = 19,92\beta / \alpha^2;$ $\nu = 1/3$
Потенциал Морзе $m = 5, n = 4,$ $\alpha\gamma = 3, 14$	$H_{1111} = H_{2222} = 131,0\beta / \alpha^2;$ $H_{1122} = H_{1212} = -2,00\beta / \alpha^2;$ $E = 131,0\beta / \alpha^2;$ $\nu = -0,01$	$H_{1111} = H_{2222} = 125,9\beta / \alpha^2;$ $H_{1122} = H_{1212} = 41,98\beta / \alpha^2;$ $E = 111,9\beta / \alpha^2;$ $\nu = 1/3$	$H_{1111} = H_{2222} = 191,3\beta / \alpha^2;$ $H_{1122} = H_{1212} = 63,77\beta / \alpha^2;$ $E = 170,1\beta / \alpha^2;$ $\nu = 1/3$	$H_{1111} = H_{2222} = 111,8\beta / \alpha^2;$ $H_{1122} = H_{1212} = 37,26\beta / \alpha^2;$ $E = 99,35\beta / \alpha^2;$ $\nu = 1/3$
Потенциал (13) $m = 2, n = 1,$ $\alpha\gamma = 3, 14,$ $p = 2, c_{ij} = 1$	$H_{1111} = H_{2222} = 2,95\beta / \alpha^2;$ $H_{1122} = 2,03\beta / \alpha^2;$ $H_{1212} = -0,06\beta / \alpha^2;$ $E = 1,55\beta / \alpha^2;$ $\nu = 0,69$	$H_{1111} = H_{2222} = 2,77\beta / \alpha^2;$ $H_{1122} = 2,63\beta / \alpha^2;$ $H_{1212} = 0,07\beta / \alpha^2;$ $E = 0,27\beta / \alpha^2;$ $\nu = 0,95$	$H_{1111} = H_{2222} = 2,86\beta / \alpha^2;$ $H_{1122} = 2,81\beta / \alpha^2;$ $H_{1212} = 0,03\beta / \alpha^2;$ $E = 0,10\beta / \alpha^2;$ $\nu = 0,98$	$H_{1111} = H_{2222} = 2,80\beta / \alpha^2;$ $H_{1122} = 2,42\beta / \alpha^2;$ $H_{1212} = 0,19\beta / \alpha^2;$ $E = 0,71\beta / \alpha^2;$ $\nu = 0,86$

расстояния (см. рисунок). «Объемная» плотность упругой энергии структур определялась по отношению к площади образцов. Известная из экспериментов и теоретических оценок зависимость механических свойств от размеров тела наблюдалась и для рассмотренных структур, хотя отдельно этот вопрос не исследовался, поскольку целью является проверка способности различных потенциалов описывать анизотропию упругих свойств, характер которой не связан с размерами образца.

Из условия положительной определенности тензора линейно-упругих свойств \mathbf{H} для двумерной среды, как в рассмотренных примерах, следуют ограничения $E > 0$, $\nu \in (-1; 1)$. Модуль Юнга определяется соотношением $E = (H_{1111}^2 - H_{1122}^2) / H_{1111}$, коэффициент Пуассона – $\nu = H_{1122} / H_{1111}$. При использовании потенциала (13) погруженного атома для различных двумерных структур вне зависимости от значений параметров потенциала получалось одинаковое число независимых модулей. Это число лишь частично соответствует результатам линейной теории упругости [12]. Отличие от классических результатов для двумерной среды дает структура с осью симметрии 6-го порядка, которая должна описываться только двумя независимыми ненулевыми упругими модулями. Метод погруженного атома при этом дает три независимых компоненты тензора упругих свойств. Для всех рассмотренных случаев при использовании потенциала (13) также получается заниженное значение сдвигового модуля $G = H_{1212}$. Эти особенности требуют дополнительного исследования. Тем не менее для более сложных случаев симметрии метод погруженного атома, в отличие от парных потенциалов, дает физически более корректные результаты.

Заключение

Для тензора упругих модулей, вычисляемого в статическом подходе при дискретно-атомистическом моделировании, получена инвариантная запись. С помощью этого представления в работе показано, что парные потенциалы позволяют описать только изотропию упругих свойств, поэтому их применение для кристаллических тел не всегда допустимо. На примере предложенной авторами статьи модификации метода погруженного атома и обобщенного потенциала Морзе показано, что многочастичные потенциалы позволяют более адекватно прогнозировать упругую анизотропию кристаллов.

Работа выполнена в рамках задания № 2014/152 на выполнение государственных работ в сфере научной деятельности в рамках базовой части госзадания Минобрнауки РФ (код проекта – 1911), а также при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 14-01-00069 и 15-01-08678).

Список литературы

1. Arroyo M., Belytschko T. Finite crystal elasticity of carbon nanotubes based on the exponential Cauchy–Born rule // *Physical Review B*. – 2004. – Vol. 69. – P. 115415–115426. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.115415.
2. Reddy C.D., Rajendran S., Liew K.M. Equilibrium configuration and continuum elastic properties of finite sized graphene // *Nanotechnology*. – 2006. – Vol. 17. – P. 864–870.
3. Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И. Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. – М.: Наука, 1986. – 232 с.
4. Clayton J. *Nonlinear mechanics of crystals*. – London: Springer, 2011. – 715 p.
5. Симонов М.В., Зубко И.Ю. Определение равновесных параметров решетки различных ГПУ-монокристаллов с помощью потенциала межатомного взаимодействия Ми // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. – 2012. – № 3. – С. 204–217.
6. Зубко И.Ю., Симонов М.В. Энергетический способ расчета упругих модулей образцов конечных размеров с ГПУ-решеткой // *Известия Том. политехн. ун-та*. – 2013. – Т. 323, № 2. – С. 194–200.
7. Зубко И.Ю. Вычисление упругих модулей монослоя графена в несимметричной постановке с помощью энергетического подхода // *Физическая мезомеханика*. – 2015. – Т. 18, № 2. – С. 37–50.
8. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // *Physical Review B*. – 1984. – Vol. 29, № 12. – P. 6443–6453.
9. Finnis M.W., Sinclair J.E. A simple empirical N-body potential for transition metals // *Philosophical Magazine A*. – 1984. – Vol. 50, № 1. – P. 45–55.
10. Sutton A.P., Chen J. Long-range Finnis-Sinclair potentials // *Philosophical Magazine Letters*. – 1990. – Vol. 61, iss. 3. – P. 139–146.

11. Israilishvili J.N. Intermolecular and surface forces. – Academic Press: Harcourt Brace and Company, 1998. – 450 p.
12. Черных К.Ф. Введение в анизотропную упругость. – М.: Наука, 1988. – 190 с.

References

1. Arroyo M., Belytschko T. Finite crystal elasticity of carbon nanotubes based on the exponential Cauchy–Born rule. *Physical Review B*, 2004, vol. 69, pp. 115415-115426. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.115415.
2. Reddy C.D., Rajendran S., Liew K.M. Equilibrium configuration and continuum elastic properties of finite sized graphene. *Nanotechnology*, 2006, vol. 17, pp. 864-870.
3. Pozdeev A.A., Trusov P.V., Niashin Iu.I. Bol'shie uprugoplasticheskie deformatsii: teoriia, algoritmy, prilozheniia [Finite elastic-plastic deformations: theory, algorithms, application]. Moscow, 1986. 232 p.
4. Clayton J. Nonlinear mechanics of crystals. London, 2011. 715 p.
5. Simonov M.V., Zubko I.Iu. Opredelenie ravnovesnykh parametrov reshetki razlichnykh GPU-monokristallov s pomoshch'iu potentsiala mezhatomnogo vzaimodeistviia Mi [Finding equilibrium lattice parameters of different HCP-monocrystals with use of Mie interatomic potential]. *Perm National Research Polytechnic University. Mechanics Bulletin*, 2012, no. 3, pp. 204-217.
6. Zubko I.Iu., Simonov M.V. Energeticheskii sposob rascheta uprugikh modulei obraztsov konechnykh razmerov s GPU-reshetkoi [Energy-based approach to estimation of elastic moduli of finite sized specimens with HCP-lattice]. *Izvestiia Tomskogo politekhnicheskogo universiteta*, 2013, vol. 323, no. 2, pp. 194-200.
7. Zubko I.Iu. Vychislenie uprugikh modulei monosloia grafena v nesimmetrichnoi postanovke s pomoshch'iu energeticheskogo podkhoda [Computation of elastic moduli of graphene monolayer in non-symmetric formulation using energy-based approach]. *Physical Mesomechanics*, 2015, vol. 18, no. 2, pp. 37-50.
8. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Physical Review B*, 1984, vol. 29, no. 12, pp. 6443-6453.
9. Finnis M.W., Sinclair J.E. A simple empirical N-body potential for transition metals. *Philosophical Magazine A*, 1984. vol. 50, no. 1, pp. 45-55.

10. Sutton A.P., Chen J. Long-range Finnis–Sinclair potentials. *Philosophical Magazine Letters*, 1990, vol. 61, iss. 3, pp. 139-146.

11. Israilishvili J.N. Intermolecular and surface forces. Academic Press, 1998. 450 p.

12. Chernykh K.F. Vvedenie v anizotropnuiu uprugost' [Introduction in anisotropic elasticity]. Moscow, 1988. 190 p.

Получено 05.12.2015

Об авторах

Стволова Софья Сергеевна (Пермь, Россия) – студентка, Пермский национальный исследовательский политехнический университет (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: sofi1234@mail.ru).

Зубко Иван Юрьевич (Пермь, Россия) – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Математическое моделирование систем и процессов», Пермский национальный исследовательский политехнический университет (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: zoubko@list.ru).

About the authors

Sof'ia S. Stvolova (Perm, Russian Federation) – Student, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., Perm, 614990, Russian Federation, e-mail: sofi1234@mail.ru).

Ivan Iu. Zubko (Perm, Russian Federation) – Ph.D. in Physics and Mathematics, Associate Professor, Department of Mathematical Modelling of Systems and Processes, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., Perm, 614990, Russian Federation, e-mail: zoubko@list.ru).