

На правах рукописи



ЛИСИНА Светлана Александровна

**КОНТИНУАЛЬНЫЕ И СТРУКТУРНО-
ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ В
МЕХАНИКЕ СРЕД С МИКРОСТРУКТУРОЙ**

01.02.04 – механика деформируемого твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Нижний Новгород – 2009

Работа выполнена на кафедре прикладной математики Нижегородского государственного технического университета им. Р.Е. Алексеева
и в Нижегородском филиале Института машиноведения им.
А.А.Благонравова Российской Академии Наук

Научные руководители: доктор физико-математических наук,
профессор **Уткин Геннадий Александрович**

доктор физико-математических наук,
профессор **Потапов Александр Иванович**

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор **Садырин Анатолий Иванович**

кандидат физико-математических наук,
Радостин Андрей Викторович

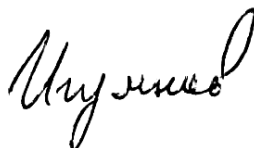
Ведущая организация: Институт проблем машиноведения РАН

Защита состоится “3” июня 2009 г. в 14:00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.166.09 в Нижегородском государственном университете им. Н.И. Лобачевского по адресу: 603950, Нижний Новгород, ГСП-1000, пр. Гагарина 23, корп.6

С диссертацией можно ознакомиться в Фундаментальной библиотеке ННГУ

Автореферат разослан “28” апреля 2009 г.

Ученый секретарь
диссертационного
совета, д.ф.-м.н.



Л.А. Игумнов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы.

Анализ и синтез материалов с заданными физико-механическими свойствами относится к разряду «вечно» актуальных проблем механики материалов и материаловедения. Интерес к этим задачам особенно возрос в последние два десятилетия, с появлением нанотехнологий, когда возникли возможности управления структурой материала на уровне молекулярных кластеров, отдельных молекул и даже атомов. Как известно, решение задач анализа и синтеза материалов невозможно без детального изучения зависимости физико-механических свойств материала от его микроструктуры. Внедрение новых материалов в медицину, биологию и в микроэлектронику требует знания зависимости физических и механических свойств материала от параметров его локальной структуры. С другой стороны, при моделировании наносистем и наноустройств (нанотрубок, нанопружин, кантилеверов, наногироскопов и т.п.) часто применяются модели размерно-ограниченных тел – стержней, пластин и оболочек. Здесь одна из основных проблем состоит в нахождении правильных значений эффективных модулей упругости материала и их зависимости от микроструктуры. Для решения задач анализа и синтеза материалов с заданными свойствами необходима развитая иерархия математических моделей. Все это делает актуальной разработку методов построения и исследования математических моделей сред с микроструктурой.

Структура среды и, в частности, размер зерна - один из важнейших показателей качества материалов, непосредственно влияющих на их прочностные и вязкоупругие характеристики. Обозначился существенный разрыв между технологиями получения новых материалов и возможностями теоретического прогнозирования их физико-механических свойств. Особенно это касается влияния локальной структуры среды на её макросвойства. Поскольку классическая теория континуума не учитывает микроструктуру материала, она мало пригодна для подобных целей. Классическая модель сплошной среды на микромасштабах наталкивается на неопределенности при вычислениях кинетического момента и энергии среды, связанные с существованием внутренних движений. Для устранения этих неопределенностей необходимо уточнить понятие о структурных уровнях среды и их математических моделях.

Под микроструктурой среды в широком смысле слова понимается наличие у неё нескольких масштабов (структурных уровней), их самосогласованное взаимодействие и наличие возможности передачи энергии с одного уровня на другой. Реальные значения «микромасштабов» среды при этом могут лежать как в области микрон, так и нанометров или ангстрем. С точки зрения методологии исследования важны не столько их абсолютные значения, сколько малость одних масштабов по отношению к другим. Другое дело, что при изучении реальных физических систем эффекты «микроструктуры» начинают ярко проявляться, в области нанометров и ниже. Наномасштабы - это верхняя граница, где классические представления начинают вступать в противоречие с истинной природой физических свойств вещества (материала), и где в ряде случаев необходимо учитывать их квантовомеханическую природу. Заметим, однако, что в физике нередко встречаются ситуации, когда для моделирования процессов на атомных и даже

ядерных масштабах пользуются классическими представлениями или аналогиями. В настоящее время достаточно четко сформировались три различных подхода к построению математических моделей сред, отражающих внутреннее взаимодействие элементов структуры:

- **континуальный подход** базируется на обобщении континуальной модели среды за счет расширения понятия представительного объема среды и учета внутренних степеней свободы – микроповоротов и аффинных деформаций мезообъема – (континуум Коссера, микроморфная среда Эрингена-Миндлина). В развитии этого подхода значительный вклад внесли работы Е. и Ф. Коссера, К. Труследа Р., Тупина, Э.Л. Аэро и Е.В. Кувшинского, Р.Миндлина, К. Эрингена, Л.И.Седова, В.А.Пальмова, В.Новацкого, А.И. Потапова, А.Н.Булыгина и др.

К его достоинствам относятся: универсальность построения как линейных, так и нелинейных моделей сред. А его недостатки заключаются в большом числе материальных констант, требующих экспериментального определения и связь которых с внутренней структурой материала не всегда ясна.

- **структурно-феноменологический (модельный) подход** связан с теорией кристаллической решетки и физикой твердого тела. Здесь следует отметить работы И.Кунина, Е.Кренера, А.Аскара, Ж.Пуже и Ж.Можена, Л.И.Маневича, Э.Л.Аэро и А.Н.Булыгина, А.И.Потапова и И.С.Павлова, А.А.Васильева и А.Е.Мирошниченко.

К его достоинствам относятся: прозрачность связи структуры с макропараметрами среды и возможность целенаправленного проектирования сред с заданными свойствами. К недостаткам можно отнести отсутствие универсальности построения моделей, особенно с учетом нелинейности и нелокальности связей.

- **статистический подход** основан на пространственном усреднении свойств микронеоднородных сред и переходе от уравнений движения микроэлементов к рассмотрению уравнений макродвижений, отражающих взаимодействие элементов микроструктуры. Сюда заметный вклад внесли работы В.А.Ломакина, А.А.Ильюшина, В.В.Новожилова, Т.Д.Шермергора, В.Н.Николаевского и др.).

Этот подход в диссертации не рассматривается.

Цели работы.

- Анализ основных постулатов механики сплошной среды и проведение классификации различных моделей континуума. Построение конкретных континуальных моделей сред, учитывающих внутренние степени свободы.
- Разработка структурно-феноменологических моделей микрокристаллических сред. Выявление и исследование взаимосвязей между внутренней структурой и физико-механическими свойствами материала.

Научная новизна результатов работы.

Дано расширенное определение представительного объема среды как системы взаимодействующих материальных точек. Построена его кинематика и даны определения внутренних степеней свободы. Выделены четыре типа представительных объемов среды с независимой кинематикой.

Дана последовательная классификация обобщенных континуальных теорий. Показано, что в рамках расширенной аксиоматики существуют восемь ти-

пов континуумов, в которые укладываются все известные модели сплошных сред. Указано на существование двух типов континуумов, которые еще не разработаны.

С помощью вариационных принципов механики выведены уравнения нелинейной динамики сред с микроструктурой, учитывающие связи между трансляционными, ротационными и осцилляторными степенями свободы частиц. Выявлено, что наличие внутренних связей вносит в уравнения движения особенности, не описываемые классической теорией упругости.

Построена структурно-феноменологическая модель квазиодномерного кристалла и установлена взаимосвязь между параметрами микроструктуры и упругими постоянными материала. Эта связь дает возможность, с одной стороны, вычислить параметры микроструктуры по известным константам упругости среды, а с другой - предсказать характер изменения упругих коэффициентов при изменении её структуры.

Практическая значимость работы.

Разработанные методы исследования влияния внутренней структуры материалов на упругие постоянные могут быть использованы для прогнозирования свойств новых перспективных материалов. Найденные в работе механические и акустические параметры, несущие информацию о свойствах и структуре среды, создают теоретическую основу для акустической диагностики и неразрушающего контроля материалов со сложной внутренней структурой.

Тема диссертации связана с исследованиями, проводимыми в Нижегородском филиале Института машиноведения РАН и на кафедре прикладной математики Нижегородского государственного технического университета им. Р.Е. Алексеева. Данные исследования были поддержаны грантами Международного научного фонда (project R9B000) и INTAS (project 96-2370). Президентской программы поддержки ведущих научных школ Российской Федерации (грант № НШ-1638.2003.8). Грантами РФФИ (№ 95-02-05360, № 00-02-16582, № 01-01-00386, № 04-02-17156, № 07-02-00172). Именной стипендией МФО (Соросовские аспиранты) и индивидуальными грантами РФФИ для молодых аспирантов и ученых (МАС) 01-02-06239, 02-02-06404 и 03-01-06223.

Методы исследований и достоверность полученных результатов.

Достоверность полученных в диссертации результатов обусловлена корректным использованием математического аппарата механики сплошных сред, а также методов математической физики и теории волн.

Положения, выносимые на защиту

1. Классификация континуальных моделей сред с микроструктурой на основе анализа кинематики представительного объема как малого деформируемого тела и характера силовых взаимодействий.
2. Разработка теоретических основ метода структурно-феноменологического моделирования сред со сложной внутренней структурой.
3. Разработка дискретной модели и континуальных аналогов одномерной динамической модели периодической среды, в узлах которой расположены частицы конечных размеров, обладающие трансляционными и ротационными степенями свободы.

Личный вклад автора. В совместных работах автор проводил теоретические расчеты по выводу континуальных и структурных моделей сред сложной структуры, осуществлял численную обработку полученных результатов и участвовал в обсуждении физического содержания полученных результатов.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы были представлены на следующих конференциях: 3-я, 4-я и 5-я европейские конференции по механике твердого тела: EUROMECH Solid Mechanics Conference (Стокгольм, Швеция, 1997 г. Метц, Франция 2000г., Салоники, Греция 2003г.). IX Всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике (Н.Новгород, 2006г.). X международная конференция «Современные проблемы механики сплошной среды». (Ростов-на-Дону, 2006 г.). Сессии Российского акустического общества (Москва 1998 г., Н.Новгород, 2002 г., 2007 г.). 16th International Symposium on Nonlinear Acoustics (Moscow, 2002 г.). Международные летние школы-конференции “Advanced problems in mechanics” (С-Петербург, Репино, 2003, 2008). X международная конференция «Современные проблемы механики сплошной среды» (г. Ростов-на-Дону, 2006). Первая Всероссийская конференция «Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях» (Москва, 2008 г.). VIII Всероссийская научная конференция «Нелинейные колебания механических систем», (Н.Новгород, 2008г.). В полном объеме материалы диссертации докладывались на расширенном семинаре лаборатории исследования наноматериалов Нф ИМАШ РАН, на расширенном семинаре кафедры прикладной математики НГТУ, на семинаре Института проблем машиноведения РАН, на семинаре Института механики ННГУ.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 19 работ. Основные результаты представлены в 8 статьях, четыре из которых опубликованы в журналах из списка ВАК и одна в реферируемом международном журнале.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения и списка цитируемой литературы. Работа содержит 116 страниц текста, 22 рисунка и 4 таблицы. Список литературы включает 198 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обосновывается актуальность темы диссертации, приводится обзор работ по данной теме, формулируется цель исследований.

Первая глава посвящена в основном обзору многомасштабных моделей в микромеханике. Здесь приводится анализ основных постулатов механики сплошной среды и классификация различных моделей континуума.

В разделе 1.1 обсуждаются математические модели различных масштабных уровней и дается расширение понятия модели среды. В классической механике сплошных сред в качестве представительного объема обычно рассматривается материальная точка, имеющая только одну физическую характеристику – массу. Показывается, что классическая модель сплошной среды на микромасштабах наталкивается на неопределенности при вычислениях кинетического момента и энергии среды, связанные с существованием внутренних движений.

Для устранения указанных неопределенностей уточняется понятие о структурных уровнях среды и их математических моделях.

В разделе 1.2 приводится краткий обзор обобщенных моделей сред сложной структуры: теория направляющих, модель Миндлина, модель Тупина, мультиполярные модели. В разделе 1.3 обсуждаются основные постулаты механики сплошной среды. В разделе 1.4 дается определение представительного объема как минимального объема среды, содержащего достаточно большое количество взаимодействующих «микрочастиц» (атомов, молекул, нанокластеров), так, чтобы можно было ввести статистически устойчивые физические характеристики материала, такие как плотность, температура и т.п. Геометрические размеры представительного объема должны быть малы по сравнению с областью заметного изменения макроскопических параметров среды. Показывается, что в рамках классической механики можно выделить четыре различных типа представительного объема:

- *Материальная точка,*
- *«Дышащая» материальная точка,*
- *Абсолютно твердое тело,*
- *Малое деформируемое тело, испытывающее аффинные деформации*

Таблица 1 Классификация обобщенных континуальных моделей

Тип взаимодействия		Структура представительного объема			
		Материальная точка	«Дышащая» материальная точка	Твердое тело	Малое деформируемое тело
Центральное	Локальное	Классическая теория упругости	Теория среды с «внутренними» осцилляторами (пористые среды)	Не существует	Не существует
	Нелокальное	Нелокальная теория упругости. Градиентные модели.	Нелокальная теория среды с «внутренними» осцилляторами (*)	Не существует	Не существует
Моментное	Локальное	Не существует	Не существует	Теория континуума Коссера	Микроморфный континуум Миндлина – Эрингена
	Нелокальное	Не существует	Не существует	Нелокальная теория континуума Коссера	Нелокальная теория микроморфного континуума (*)

Не углубляясь в детали физической природы взаимодействия между структурными элементами, можно выделить центральные и нецентральные (моментные) взаимодействия, которые, в свою очередь, подразделяются на локальные и нелокальные. В разделе 1.5 на основе типов представительного объема и

характера межчастичного взаимодействия проводится классификация континуальных моделей сплошной среды (см. таблицу). Отмечается, что из шестнадцати возможных комбинаций физически могут быть реализованы лишь восемь моделей континуума, в которые укладываются все известные в настоящее время модели механики сплошной среды. Из них два класса моделей, отмеченные знаком (*), остаются еще не разработанными. В предложенной аксиоматизации не выделяются в отдельные классы известные модели многофазных сред (смесей), так как они строятся на основе аксиом, входящих в перечисленные выше классы. Их выделение возможно лишь за счет увеличения числа определяющих признаков.

Во второй главе рассматриваются вопросы построения кинематики и мер деформации сред сложной структуры, выводятся уравнения движения микрополярных континуумов. В механике сплошных сред известна теорема Коши-Гельмгольца о том, что общее перемещение деформируемого тела в достаточно малой окрестности каждой его точки можно выразить через смещение и поворот тела как твердого целого и через удлинение в трех взаимно перпендикулярных направлениях (рис.1). Из этой теоремы следует, что в общем случае кинематика представительного объема может быть описана 12 переменными - тремя компонентами вектора смещений, тремя углами поворота и шестью компонентами тензора аффинной деформации.

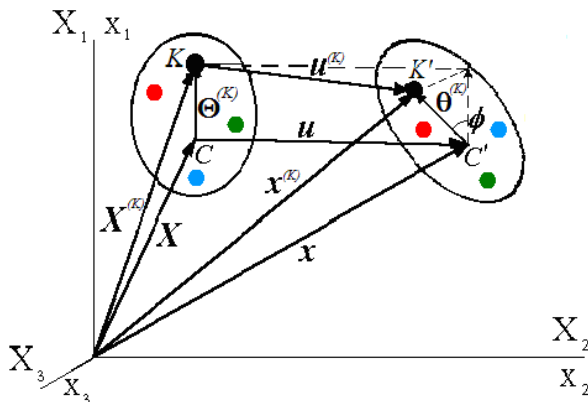


Рис. 1 Кинематические переменные представительного объема

В разделе 2.1 вводятся наборы кинематических переменных, позволяющих описать как макро-, так и микродвижения в среде. Движение заполняющих мезообъем материальных точек рассматривается как сложное движение относительно неподвижной и подвижной систем координат. Показывается, что в лагранжевых переменных поле смещений может быть записано в виде:

$$u_i^{(k)}(X_n, \Theta_k^{(k)}, t) = u_i(X_n, t) + [\eta(X_n, t)\delta_{ik} + \epsilon_{ikm} \phi_m(X_n, t) + \Phi_{ik}^D(X_n, t)]\Theta_k^{(k)} \quad (1)$$

Здесь $u_i(X_n, t)$ – компоненты вектора макросмещения, а слагаемые в квадратных скобках описывают движения микрочастиц ПО относительно его центра масс (микросмещения). Микросмещения описываются тензором второго ранга, который разлагается на три составляющих: шаровую, девиаторную и антисимметричную. Шаровая составляющая описывает радиальные движения частиц, этот тип микродвижений отвечает за изменение микроплотности при неизменной макроплотности среды и описывается одной кинематической переменной $\eta(X_n, t)$. Антисимметричная часть описывает малые повороты ПО

как твердого тела и определяется тремя углами микровращений $\phi_i(X_n, t)$. Эта составляющая соответствует кинематике континуума Коссера. Девиатор тензора микросмещений $\Phi_{ik}^D(X_n, t)$ описывает искажения формы ПО без изменения его объема и содержит пять независимых переменных $\psi_i(X_n, t)$. В общем случае микроморфный континуум имеет 12 степеней свободы. В зависимости от того, какие из типов внутреннего движения являются преобладающими, можно строить различные варианты континуальных моделей. По известному полю смещений находятся поле скоростей и поле ускорений.

В разделе 2.2 вводятся тензоры макро- и микродеформации обобщенных континуумов

$$\begin{aligned} e_{\alpha\beta} &= \frac{1}{2} (u_{\alpha,\beta} + u_{\beta,\alpha} + u_{i,\alpha} u_{i,\beta}) \\ \Psi_{\alpha\beta} &= u_{\beta,\alpha} + \epsilon_{\alpha\gamma\beta} \phi_\gamma + \epsilon_{i\gamma\beta} \phi_\gamma u_{i,\alpha}, \\ \Gamma_{\beta\nu\alpha} &= \epsilon_{\beta\gamma\alpha} \phi_{\gamma,\alpha} + \epsilon_{i\gamma\beta} u_{i,\beta} \phi_{\gamma,\alpha} \end{aligned} \quad (2)$$

Первый тензор в (2) – тензор макродеформации. Он описывает деформации среды, вызванные перемещением центров масс ПО и совпадает с тензором Грина в классической теории упругости. Второй и третий тензоры – тензор относительной дисторсии и градиент микродисторсии – являются новыми мерами деформации и в классической теории упругости отсутствуют. Подставляя в эти формулы конкретные выражения для смещений (1), получим меры деформации для определенных типов континуумов.

Уравнения динамики микрополярированной среды выводятся из вариационного принципа Гамильтона-Остроградского (разделы 2.3-2.4):

$$\delta J = \delta \int_{t_0}^{t_1} \left[\iiint_{V_0} L(\dot{u}, \nabla u_i, \phi_i, \dot{\phi}_i, \eta, \dot{\eta}, \nabla \eta, \nabla \phi_i, \psi_i, \dot{\psi}_i, \nabla \psi_i) dV \right] dt = 0$$

Здесь L - объемная плотность функции Лагранжа, равная разности между плотностью кинетической и внутренней энергии среды, она имеет следующую структуру:

$$L = \frac{\rho_1}{2} \dot{u}_i \dot{u}_i + \frac{\rho_2}{2} \dot{\eta}^2 + \frac{1}{2} J_{ij} \dot{\phi}_i \dot{\phi}_j + \frac{\mu_{ij}}{2} \dot{\psi}_i \dot{\psi}_j - \rho_0 U(e_{kl}, \epsilon_{kl}, \Gamma_{klm}) \quad (3)$$

Первые четыре слагаемых в (3) описывают кинетическую энергию среды, связанную с макро- и микродвижениями в ПО. Здесь ρ_1 и ρ_2 - макро- и микроплотности, J_{ij} – тензор инерции ПО, μ_{ij} – тензор микроинерции – коэффициенты пропорциональности между кинетической энергией и произведением скоростей микродвигов. Внутренняя энергия является скалярной функцией мер макро- и микродеформаций. Ее конкретный вид зависит от геометрической структуры среды (изотропная или анизотропная среда) и типа силовых взаимодействий между микрочастицами.

Вариационный вывод уравнений движения континуума с микроструктурой (континуума Миндлина – Эрингена) позволяет выделить разделяются на четыре группы уравнений, каждая из которых описывает определенный тип движений:

– три уравнения макросмещений

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial u_{i,t}} + \nabla \frac{\partial L}{\partial \nabla u_i} = 0$$

– три уравнения микровращений

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial \phi_{i,t}} + \nabla \frac{\partial L}{\partial \nabla \phi_i} - \frac{\partial L}{\partial \phi_i} = 0$$

– одно уравнение динамики микропор

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial \eta_{i,t}} + \nabla \frac{\partial L}{\partial \nabla \eta_i} - \frac{\partial L}{\partial \eta_i} = 0$$

– пять уравнений динамики микродисторсии

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial \psi_{i,t}} + \nabla \frac{\partial L}{\partial \nabla \psi_i} - \frac{\partial L}{\partial \psi_i} = 0$$

Выбирая тот или иной тип кинематики среды (из перечисленных в п. 2.1) и задавая соответствующий ей вид внутренней энергии, можно строить различные модели обобщенных континуумов.

В случае континуума Коссера при коллинеарном распространении плоских волн вдоль оси x система уравнений движения имеет вид:

$$\begin{aligned} \rho u_{1,tt} - (\lambda + 2\mu) u_{1,xx} &= \frac{\partial N_{u1}}{\partial x} \\ \rho u_{2,tt} - (\mu + \alpha) u_{2,xx} + 2\alpha \phi_{3,x} &= \frac{\partial N_{u2}}{\partial x} \\ \rho u_{3,tt} - (\mu + \alpha) u_{3,xx} - 2\alpha \phi_{2,x} &= \frac{\partial N_{u3}}{\partial x} \\ J \phi_{1,tt} - (\beta + 2\gamma) \phi_{1,xx} + 4\alpha \phi_1 &= \frac{\partial N_{\phi1}}{\partial x} \\ J \phi_{2,tt} - (\gamma + \varepsilon) \phi_{2,xx} + 4\alpha \phi_2 + 2\alpha u_{3,x} &= N_{\phi2} \\ J \phi_{3,tt} - (\gamma + \varepsilon) \phi_{3,xx} + 4\alpha \phi_3 - 2\alpha u_{2,x} &= N_{\phi3} \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь u_1 - продольное, u_2 и u_3 - поперечные смещения частиц среды, ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 - проекции вектора поворота частиц на оси координат, J - момент инерции частицы относительно оси, проходящей через ее центр тяжести. Входящие в уравнения материальные константы должны находиться их экспериментальных данных по распространению волн.

Рассмотренный в этой главе метод построения континуальных моделей имеет свои достоинства и недостатки. К достоинствам относятся: универсальность построения моделей сред с помощью вариационных принципов механики или интегральных законов сохранения; универсальность учета взаимодействия между упругими деформациями и другими физико-механическими полями (термо-вязко-упругие среды, электро-магнито-упругие среды и т.п.); универсальность построения как линейных, так и слабонелинейных моделей сред. К недостаткам следует отнести: большое число феноменологических констант, требую-

щих экспериментального определения и сложность нахождения их связи с внутренней структурой материала; физическую неопределенность мер деформации, описываемых тензорами третьего и более высоких рангов; сложность нахождения полной системы независимых инвариантов тензоров третьего и более высоких рангов. Часть из этих недостатков можно избежать, если рассмотреть структурно-феноменологическое моделирование сред со сложной внутренней структурой, которому посвящена третья глава диссертации.

В третьей главе прослеживается история развития идей структурного развития материалов, обсуждаются основные принципы структурного моделирования и подробно исследуется модель квазиодномерного кристалла. Структурно-феноменологическое моделирование предполагает выделение в массиве материала некоторого минимального объема – структурной ячейки, – отображающей основные черты макроскопического поведения материала. Ячейка рассматривается как конструкция, функционирование которой обеспечивается ее внутренним устройством и условиями сопряжения с окружением. Силовое взаимодействие между элементами описывается с помощью модельных потенциалов, применяемых в физике твердого тела (раздел 3.1). Сформулированы основные принципы структурного моделирования:

- **Минимальность обобщений.** Минимальность обобщений, приводящих к новым качественным следствиям. Количество входящих в модель новых параметров должно быть по возможности небольшим.
- **Вариативность модели.** Возможность достаточно широкого варьирования линейных и нелинейных параметров модели за счет выбора кинематики и силовой схемы взаимодействия структурных элементов.
- **Идентификация и верификация модели.** Проверка адекватности построенной модели реальным системам и определение связей между параметрами модели и физическими постоянными материала (плотность, пористость, модули макро- и микроупругости и т.п.).
- **Принцип соответствия.** В предельных случаях новая модель, как правило, должна переходить в известные теории деформируемого твердого тела.

Отличием структурного моделирования от стандартной теории кристаллических решеток является то, что в узлах кристаллической решетки располагаются не точечные материальные частицы, а тела малых, но конечных размеров, имеющие внутренние степени свободы. В качестве тел могут выступать домены, зерна (гранулы), фуллерены, нанотрубки или молекулярные кластеры. Структурное моделирование учитывает параметры, характеризующие период решетки, размеры частиц и их форму, и поэтому является наиболее подходящим методом для изучения влияния размерных эффектов на свойства материала. К достоинствам структурного моделирования относятся прозрачность связи структуры с макропараметрами среды, возможность целенаправленного проектирования сред с заданными свойствами, а к недостаткам – отсутствие универсальности процесса моделирования и сложность учета нелинейных и нелокальных эффектов взаимодействия.

В разделе 3.2 рассматривается механическая модель квазиодномерного кристалла – цепочка из прямоугольных гранул с размерами $2l \times 2b$, ($a > 2b$). Расстояние между центрами масс частиц в исходном состоянии равно a . Каждая

частица имеет три степени свободы: смещение центра масс частицы по осям x и y (трансляционные степени свободы u_n, w_n) и поворота относительно центра масс (ротационная степень свободы φ_n) (рис. 2). При структурном моделировании вместо полевого описания взаимодействия частиц вводят эквивалентную силовую схему в виде системы стержней или пружин, осуществляющих передачу сил и моментов между элементами структуры. В диссертации для моделирования используется пружинная модель. Частицы для удобства заменяются вписанными многоугольниками, форма которых повторяет форму ячейки. Пружины, моделирующие передачу силовых взаимодействий между частицами, считаются закрепленными в вершинах многоугольников и имеют различные коэффициенты упругости. Удлинения пружин определяются относительными изменениями расстояний между соответствующими точками тел-частиц.

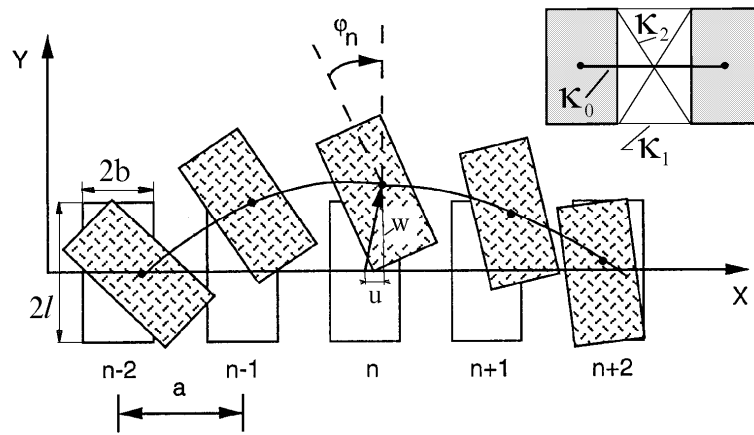


Рис. 2. Зернистая (гранулированная) среда: кинематическая схема и схема силового взаимодействия частиц

Выражение для потенциальной энергии, приходящейся на одну ячейку с точностью до кубических слагаемых, имеет вид:

$$U_n = \frac{1}{2} \left(K_1 \Delta u_n^2 + K_2 \Delta w_n^2 + K_3 l^2 \Delta \varphi_n^2 + \frac{K_2}{4} \Phi_n^2 + K_2 \Delta w_n \Phi_n \right) + h_1 \Delta u_n^3 + h_2 \Delta u_n \Delta w_n^2 + h_3 \Delta u_n \Delta w_n \Phi_n + h_4 \Delta w_n^2 \Phi_n.$$

где u_n, w_n - трансляционные степени свободы, φ_n - ротационная степень свободы, $\Delta u_n = (u_{n+1} - u_n)/a \sim \Delta w_n = (w_{n+1} - w_n)/a \sim \varepsilon \ll 1$, $\Phi_n = (\varphi_{n+1} + \varphi_n)/2$. Здесь первые два слагаемых описывают энергию при продольных и сдвиговых деформациях, третье и четвертое - энергию, связанную с нецентральными (моментными) взаимодействиями частиц, а пятое - энергию связи между поперечной и ротационной степенями свободы частиц. Остальные слагаемые с коэффициентами h_n ($n = 1 \div 4$) описывают энергию нелинейных взаимодействий. Коэффициенты $K_{1,2,3}$ и h_n выражаются через параметры микромоделей и константы упругостей пружин. Кинетическая энергия, приходящаяся на одну ячейку, равна:

$$T_n = \frac{m}{2} (\dot{u}_n^2 + \dot{w}_n^2) + \frac{J}{2} \dot{\varphi}_n^2$$

Здесь m - масса гранулы, $J = m(l^2 + b^2)/3 = md^2/3$ - ее момент инерции относительно оси, проходящей через центр масс. Точка сверху обозначает производную по времени. По известным выражениям для кинетической и внутренней энергии с помощью уравнений Лагранжа второго рода найдены дифференциально-разностные уравнения движения системы, которые удобны для численного моделирования отклика системы на внешние динамические воздействия в широком диапазоне частот и длин волн. В разделе 3.3 исследованы дисперсионные свойства такой периодической структуры в первой зоне Бриллюэна.

Переход от дискретной модели к континуальной производится в п. 3.4 путем экстраполяции функций, заданных в дискретных точках, непрерывными полями смещений и микроповоротов. В зависимости от количества удерживаемых слагаемых можно рассматривать различные приближения дискретной модели зернистой среды и строить иерархию квазиконтинуальных моделей. Система нелинейных дифференциальных уравнений первого приближения имеет вид:

$$\begin{aligned} u_{tt} - c_1^2 u_{xx} &= \frac{\partial}{\partial x} [\alpha_1 u_x^2 + \alpha_2 w_x^2 + \alpha_3 w_x \varphi_x] \\ w_{tt} - c_2^2 w_{xx} - \beta^2 \varphi_x &= \frac{\partial}{\partial x} [\alpha_2 u_x w_x - (\alpha_3 u_x - \alpha_4 w_x) \varphi], \\ \varphi_{tt} - c_3^2 \varphi_{xx} + \omega_0^2 \varphi + (\beta/r)^2 w_x &= (\alpha_3/r^2) w_x u_x - (\alpha_4/r^2) w_x^2. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь $c_{1,2,3}$ – скорости распространения продольных, поперечных и ротационных (спиновых) волн, $\omega_0 = \sqrt{K_2/4a\rho r^2} = c_2/2r$ – критическая частота спиновой волны, β – параметр линейной связи поперечной и спиновой волн, α_i – коэффициенты нелинейного взаимодействия волн.

В отличие от континуальной модели (4), в уравнениях (5) значения скоростей упругих волн являются функциями параметров микроструктуры материала.

$$\begin{aligned} c_1 &= c_{10} \sqrt{1 + \frac{2}{q^2} \left(\frac{k_1}{k_0} \right) + \frac{2q^2}{[q^2 + f^2(1-q)^2]^2} \frac{k_2}{k_0}}, \\ c_2 = 2r\omega_0 &= \frac{c_{20} f(1-q)}{[q^2 + f^2(1-q)^2]^2}, \quad c_3 = \frac{c_{20} f}{q} \sqrt{\frac{4}{1+f^2} \left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{q^2}{4[q^2 + f^2(1-q)^2]^2} \right)}. \end{aligned}$$

Здесь $c_{10} = \sqrt{k_0/\rho a}$ и $c_{20} = \sqrt{k_2/\rho a}$ – соответственно скорости продольной и поперечной волн в среде при отсутствии моментных взаимодействий между частицами, $\rho = (1-q)\rho_1$ – эффективная погонная плотность среды ρ , определяемая как масса вещества, приходящаяся на единицу длины цепочки, $\rho_1 = m/2b$ – погонная плотность гранул, $q = (1-2b/a)$ – коэффициент, играющий роль параметра пористости среды.

Графический анализ зависимости скоростей акустических волн c_1 и c_3 от параметров микроструктуры приведен на рисунках 3. Выбор значений коэффи-

циентов k_1 и k_2 был сделан произвольно для качественного исследования свойств модели. Из рис. 3а видно, что с увеличением параметра формы f наблюдается «скачкообразное» уменьшение скорости продольной волны (и соответственно модулей упругости), что соответствует структурной перестройке в материале. У скорости ротационной волны (рис. 3б) при малых значениях пористости $q < 0,15$ появляются локальный максимум и локальный минимум, когда форма частиц близка к круглой.

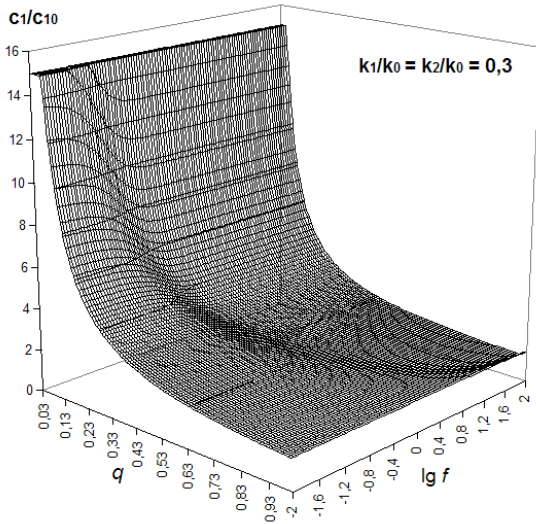


Рис. 3а. Зависимость скорости продольных волн от параметра пористости среды и формы частиц

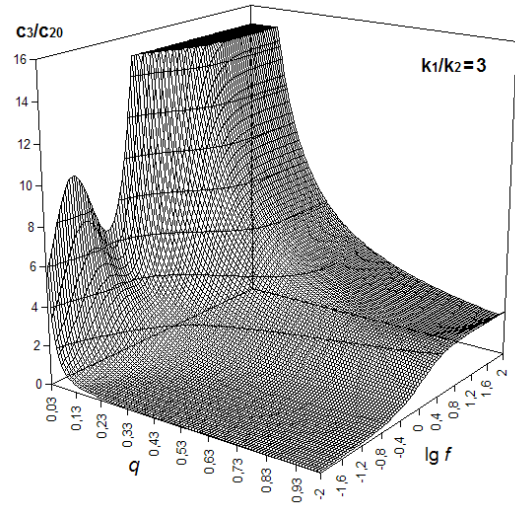


Рис.3б. То же самое для скорости ротационной волны

В гранулированной среде наряду с известными константами появляются дополнительные коэффициенты нелинейности, отсутствующие в классической теории упругих сред.

$$\alpha_1 = \frac{1}{\rho a} \left(\frac{(1+\gamma)}{2} k_0 + \frac{a^2}{\delta^2} k_1 \right), \quad \alpha_2 = \frac{1}{\rho a} \left(\frac{1}{2} k_0 + \frac{a^2}{\delta^2} k_1 \right)$$

$$\alpha_3 = \frac{2a}{\rho} \left(\frac{b}{\delta^3} k_1 - 4 \frac{l^2}{\delta_1^4} k_2 \right), \quad \alpha_4 = \frac{81}{\rho} \frac{alb}{\delta_1^4} k_2.$$

Два из них – $\alpha_{3,4}$ для модели, состоящей из материальных точек, равны нулю, так как они пропорциональны размерам частиц и константам $k_{1,2}$, отвечающим за моментные взаимодействия. Найдены выражения констант Ламе через скорости акустических волн. Существование связи между параметрами «микромоделей» и макропараметрами среды позволяет ставить и решать задачу о синтезе материала с заданными механическими свойствами. Для этого необходимо по заданным макропараметрам материала определить параметры его микроструктуры.

В 3.4.2 обсуждаются дисперсионные свойства нормальных волн в микрополярированной среде. Исследуемая динамическая система обладает тремя нормальными волнами (модами), каждой из которых отвечает своя дисперсионная ветвь на плоскости параметров (ω, k) .

$$(\omega^2 - c_1^2 k^2) [(\omega^2 - c_2^2 k^2)(\omega^2 - c_3^2 k^2 - \omega_0^2) - \beta^2 k^2] = 0 \quad (6)$$

Поведение дисперсионных ветвей показано на рисунке 4.

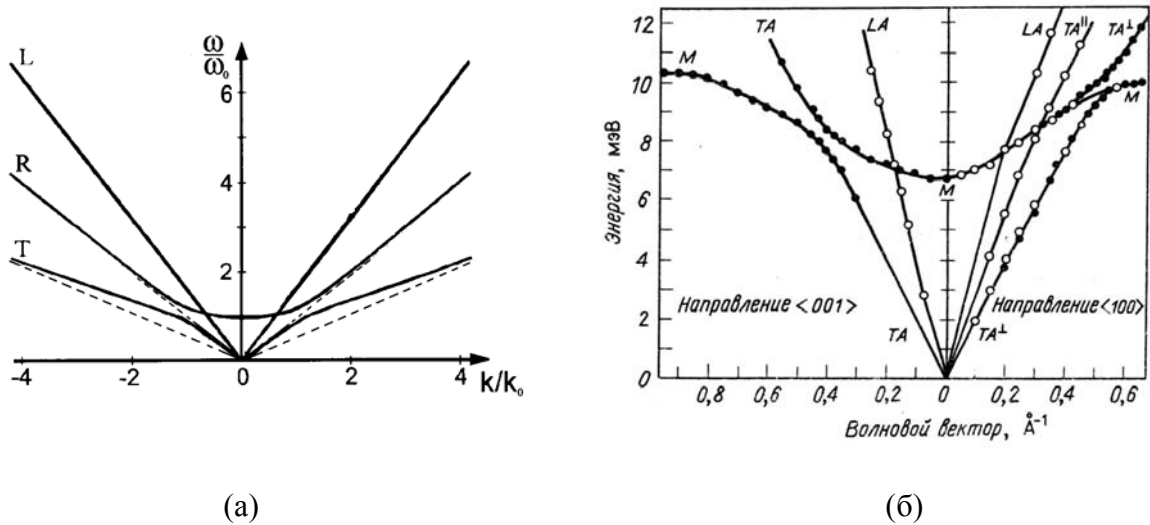


Рис. 4. Дисперсионные кривые континуальной модели

(а) – теоретический расчет,
(б) – экспериментальные данные для фононов в ферромагнетике FeF_2

Из рисунка видно, что продольная мода (кривая L) не обладает дисперсией. В отличие от неё ротационная (кривая R) и поперечная (кривая T) волны обладают дисперсией. Дисперсионная кривая ротационной моды при $k = 0$ выходит из точки ω_0 , которая является критическим значением частоты и при частотах ниже её ротационная волна не распространяется.

В разделе 3.5 приводятся сведения об экспериментальных исследованиях волн в упругих средах с внутренними степенями свободы, подтверждающие теоретические выводы диссертации. На рис. 4б показаны экспериментально измеренные дисперсионные кривые для фононов в ферромагнетике FeF_2 . В таблице 2 приведены теоретически рассчитанные значения критических частот для синтетического опала с диаметром частиц 400 нм, и экспериментальные данные для молекулярных кристаллов (производных дииндобензола), определенных методом комбинационного рассеяния света на вращательных колебаниях молекул.

Таблица 2. Оценки критических частот

	Синтетический опал (теория)	Нафталин	Парадииндобензол	Метадииндобензол	Ортодииндобензол
Критическая частота c^{-1}	$1,4 \cdot 10^{10}$	$60 \cdot 10^{10}$	$81 \cdot 10^{10}$	$72 \cdot 10^{10}$	$75 \cdot 10^{10}$

Если частоты акустических волн меньше критической частоты ω_0 , то спиновая волна не является распространяющейся и микроповороты частиц определяются полем смещений среды (раздел 3.6). Методом последовательных приближений из третьего уравнения системы (4) найдена приближенная связь между полем микроповоротов φ и полем смещений w :

$$\varphi(x, t) \approx -\frac{1}{2} w_x - \frac{c_2^2}{r^2 \omega_0^2} \frac{\partial}{\partial x} (w_{tt} - c_3^2 w_{xx}) \quad (7)$$

Подставляя эту связь в первые два уравнения (3), приходим к уравнениям низкочастотного длинноволнового приближения:

$$\begin{aligned} u_{tt} - c_1^2 u_{xx} &= \frac{\partial}{\partial x} (\gamma_1 w_x^2), \\ w_{tt} - c_{2*}^2 w_{xx} - \beta^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} (w_{tt} - c_3^2 w_{xx}) &= \frac{\partial}{\partial x} (\gamma_2 u_x w_x + \gamma_3 w_x^2), \end{aligned} \quad (8)$$

В отличие от уравнений нелинейной теории упругости, в данном случае в уравнении для поперечной волны появляются четвертые производные, отвечающие за возникновение дисперсии и слагаемое с квадратичной нелинейностью. Она связана с блочной структурой среды и возникает из-за нарушения симметрии моментного взаимодействия частиц-зерен при поперечных смещениях и поворотах. Она пропадает, когда ширина частицы стремится к нулю и восстанавливается симметрия моментных взаимодействий. Существование квадратичной нелинейности позволяет дать теоретическое обоснование генерации второй сдвиговой гармоники в реальных кристаллах, запрещенной в рамках классической теории упругости.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ

1. Показано, что на микромасштабах классическая модель сплошной среды наталкивается на неопределенности при вычислениях кинетического момента и энергии среды, связанные с существованием внутренних движений. Уточнено определение представительного объема среды и показано, что в рамках классической физики можно выделить четыре типа представительных объемов с различной кинематикой.
2. Установлено, что из возможных комбинаций типов представительного объема и силового взаимодействия может быть реализовано восемь физически содержательных моделей континуума, в которые укладываются все известные в настоящее время модели механики сплошных сред.
3. Развита теоретическая основа метода структурно-феноменологического моделирования сред со сложной внутренней структурой. Его отличием от теории кристаллических решеток является то, что в её узлах располагаются не точечные материальные частицы, а тела конечных размеров, имеющие внутренние степени свободы. Структурное моделирование явным образом учитывает размеры микрочастиц, их форму и является наиболее подходящим методом для изучения влияния размерных эффектов на макросвойства материала.
4. Построена одномерная динамическая модель периодической среды, в узлах которой расположены частицы конечных размеров, обладающие трансляционными и ротационными степенями свободы. Показано, что в континуальном пре-

деле структура уравнений движения инвариантна относительно формы и размеров частиц, а параметры микроструктуры влияют на модули макроупругости среды.

5. Показано, что в низкочастотном приближении в уравнении для поперечной волны микрокристаллической среды появляется слагаемое с квадратичной нелинейностью, отсутствующее в классической теории упругости. Квадратичная нелинейность связана с блочной структурой среды и возникает из-за нарушения симметрии моментного взаимодействия частиц при поперечных смещениях и поворотах. Квадратичная нелинейность пропадает, когда размеры частицы стремятся к нулю и восстанавливается симметрия взаимодействий. Существование квадратичной нелинейности позволяет дать теоретическое обоснование возбуждению второй сдвиговой гармоники в реальных кристаллах, запрещенной в рамках классической теории упругости.

Список основных публикаций по теме диссертации

1. Potapov A.I., Pavlov I.S., Lisina S.A. Acoustic identification of nanocrystalline media // *Journal of Sound and Vibration* 2009 V.322. PP. 564–580.
2. Лисина С.А., Потапов А.И. Обобщенные модели сплошной среды в наномеханике // Доклады АН, 2008. Т.420. №.3. С. 328-330.
3. Лисина С.А., Потапов А.И., Нестеренко С.Ф. Нелинейная гранулированная среда с вращением частиц. Одномерная модель // *Акустический журнал*. 2001. Т.47. №5. С. 666-674.
4. Лисина С.А., Потапов А.И. Уравнения нелинейной динамики микрополярной среды. Вариационный подход // *Известия вузов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки. Нелинейные проблемы механики сплошных сред*. Ростов-на-Дону, 2003. С. 249-255.
5. Павлов И.С., Лисина С.А. Одномерные модели нелинейной динамики микрополярных и гранулированных сред // *Известия вузов. Северо-Кавказский регион. Спецвыпуск “Математическое моделирование”*. Ростов-на-Дону, 2001, с. 132-134.
6. Лисина С.А. Уравнения динамики нелинейной ориентированной среды. //Сб. тр. «Физические технологии в машиноведении», изд-во НГТУ, Н.Новгород, 1998, с.9-14.
7. Лисина С.А. Одномерная модель гранулированной среды. // Сб. трудов «Физические технологии в машиноведении». Н.Новгород. Изд-во «Интел-сервис». 2000. Вып. 2. С. 21-28.
8. Pavlov I.S., Lisina S.A., Potapov A.I. Nonlinear Acoustic Waves in Micropolar and Granular Media // *Nonlinear Acoustics at the Beginning of the 21st Century*. Edited by O.V. Rudenko and O.A. Sapozhnikov, Moscow, 2002, V. 2, pp. 665-668.

9. Лисина (Потапова) С.А., Уткин Г.А., Уравнения движения и законы сохранения для микрополярного континуума // 11-я Зимняя Школа по механике сплошных сред (Тез. докл.), Пермь, 1997, с.235
10. Lisina (Potapova) S.A., Utkin G.A., The variational principle for micropolar continuum, //3rd EUROMECH Solid Mechanics Conf., Stockholm, Sweden, 1997, p.84.
11. Lisina (Potapova) S.A., Utkin G.A., Governing equations and balance laws for micropolar continuum. //EUROMECH Colloquium 378 “Nonlocal Aspects in Solid Mechanics, Mulhouse, France, 1998, P.47.
12. Potapov A.I., Lisina S.A. and Nesterenko V.F. Mathematical modelling of nonlinear waves in granular media. 4th EUROMECH Solid Mechanics Conference. Metz, France, 2000. Book of abstracts II. Ed. By M. Potier-Ferry and L.S. Toth, p. 722.
13. Pavlov I.S., Potapov A.I., Lisina S.A. The mathematical model for 2D Granular Media // Abstracts of the XXXI Summer School–Conference “Advanced Problems in Mechanics” APM 2003, St. Petersburg (Repino), Russia, 2003, pp. 78-79.
14. Potapov A.I., Lisina S.A. Variation descriptions of nanostructured materials // Abstracts of the XXXI Summer School–Conference “Advanced Problems in Mechanics” APM 2003, St. Petersburg (Repino), Russia, 2003, pp. 80-81.
15. Lisina S.A., Potapov A.I. Nonlinear mathematical models for microstructured media // Abstracts of the 5th Euromech Solid Mechanics Conference ESMC-5 (Aristotle University of Thessaloniki, Greece, 2003), p. 108-109.
16. Потапов А. И., Лисина С. А. Обоснование моделей сплошной среды //Современные проблемы механики сплошной среды. Труды X международной конференции. г. Ростов-на-Дону, 2006. с. 222-226.
17. Лисина С.А. Влияние микроповоротов частиц на свойства нелинейных волн деформации //IX Всероссийский съезд по теор. и прикл. мех. Аннот. докл. Т.1. Н.Новгород. Изд-во Нижегород. ун-та. 2006. с. 87.
18. Лисина С.А. О возникновении квадратичной нелинейности у сдвиговых волн в гранулированной среде //Тез. докл. Всероссийской н.-т. конф. “Фундаментальные проблемы машиноведения: новые технологии и материалы”. Нижний Новгород, ЗАО “Интек-НН”, 2006, с. 64.
19. Потапов А.И, Лисина С.А. О многомасштабных моделях сплошной среды в наномеханике // Первая Всероссийская конф. «Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях» Тез. докл. Москва, 2008, С 249-250.