УДК 534.1

ДИСКРЕТНАЯ И КОНТИНУАЛЬНАЯ МОДЕЛИ АНИЗОТРОПНОЙ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СРЕДЫ С НЕПЛОТНОЙ УПАКОВКОЙ ЧАСТИЦ

***И.С. Павлов*[1], *И.В. Милосердова*[2]**

[1]Нижегородский филиал Института машиноведения им. А.А. Благонравова РАН
[2]Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева

ispavl@mts-nn.ru

Поступила в редакцию 15.06.2011

Рассмотрена двухмерная модель кристаллической среды, представляющая собой прямоугольную решетку из упруго взаимодействующих частиц в форме эллипсов, обладающих трансляционными и вращательной степенями свободы. Выведены дифференциально-разностные уравнения и линейные уравнения в частных производных, описывающие распространение и взаимодействие волн различных типов в такой среде. Установлена взаимосвязь между акустическими характеристиками среды и параметрами ее микроструктуры. Продемонстрирована возможность управления дисперсионными свойствами среды путем изменения параметров ее микроструктуры.

Ключевые слова: дискретная и континуальная модели, среда с микроструктурой, анизотропия, упругие волны.

Дискретная модель

Рассматривается двухмерная прямоугольная решетка, состоящая из однородных зерен (гранул) массы M, имеющих форму эллипса с осями длиной d_1 и d_2. Пространство между частицами представляет собой безмассовую упругую среду, через которую передаются силовые и моментные воздействия. В исходном состоянии расстояние между центрами масс соседних гранул вдоль оси x равно a, а вдоль оси y равняется b (рис. 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 $\varphi_{i,j}$). Центральные и нецентральные взаимодействия соседних гранул моделируются упругими пружинами четырех типов (рис. 2): центральными (с жесткостью K_0), нецентральными (с жесткостью K_1), «диагональными» (K_2), а также пружинами, соединяющими центральную частицу с зернами второй координационной сферы (K_3). Такая модель может найти применение для исследования физико-механических свойств и развития методов волновой диагностики гранулированных сред, композитных материалов, нанокристаллических сред и иных сред с микроструктурой [1, 2].

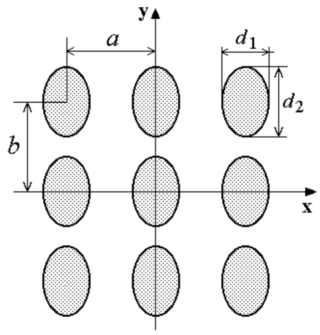

Рис. 1

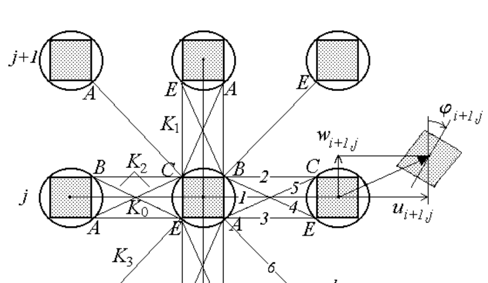

Рис. 2

Получены дифференциально-разностные уравнения, описывающие динамику прямоугольной решетки из эллипсовидных частиц с квадратичным потенциалом взаимодействия между ними. Такие уравнения можно использовать для численного моделирования отклика системы на внешние динамические воздействия в широком спектре частот, вплоть до критических значений.

Проанализированы дисперсионные свойства рассматриваемой среды при различных значениях параметров формы решетки. Выявлено, что для квадратной решетки с круглыми частицами в области частот $0 \le \varpi < 2.42$ и $3.09 < \varpi \le 3.22$ ($\varpi = \omega\sqrt{M/K_0}$) в системе имеется две волновые моды (продольная и поперечная – в области низких частот, продольная и ротационная – в области высоких частот), а при $2.42 \le \varpi \le 3.09$ в системе присутствуют все три волновые моды. В случае прямоугольной решетки из анизотропных частиц меняется лишь длина трех вышеуказанных интервалов.

Ротационная мода имеет две критические частоты: наибольшую $\varpi(\pi)$ и наименьшую $\varpi(0)$, причем для эллипсовидных частиц с параметром формы $b/a = 1.5$ у ротационной моды появляется локальный минимум. При вырождении решетки в квадратную с круглыми частицами продольная мода остается изотропной до $\varpi < 1.5$ а ротационная мода до $\varpi < 2.8$. В произвольном случае даже в области низких частот все моды являются анизотропными.

Полученные в данном разделе результаты можно применить при конструировании искусственных периодических структур (в частности, фононных кристаллов) с заранее определенными дисперсионными свойствами, а именно по требуемым наибольшему и наименьшему значениям частоты ротационной моды, благодаря полученным в работе соотношениям, можно найти значения параметров микроструктуры среды.

Континуальная модель

В длинноволновом приближении получена система линейных уравнений в частных производных, описывающих распространение продольных, поперечных и ротационных волн в такой среде:

$$\begin{aligned}
u_{tt} &= c_1^2 u_{xx} + \delta_2 c_2^2 u_{yy} + \frac{1+\delta_4}{2} s^2 w_{xy} - \delta_5 \beta_1 \varphi_y,\\
w_{tt} &= c_2^2 w_{xx} + \delta_1 c_1^2 w_{yy} + \\
&\quad + \frac{1+\delta_4}{2} s^2 u_{xy} + \beta_1 \varphi_x, \qquad (1)\\
R^2 \varphi_{tt} &= R^2 c_3^2 (\varphi_{xx} + \delta_3 \varphi_{yy}) + \\
&\quad + \beta_1 (\delta_5 u_y - w_x) - 2\beta_2 \varphi.
\end{aligned}$$

Здесь c_1, c_2, c_3 – скорости распространения соответственно продольной, сдвиговой волн и волны микровращений, s – коэффициент линейной связи между продольными и сдвиговыми деформациями в материале, β_1 и β_2 – параметры дисперсии, R – радиус инерции частицы, δ_i (i = 1–5) – поправочные коэффициенты, возникающие вследствие анизотропии рассматриваемой среды. В случае, когда $\delta_i \neq 1$ хотя бы при одном i, уравнения (1) становятся неинвариантными относительно поворота кристаллической решетки на 90° и потому являются математической моделью сильно анизотропной среды. Если же все параметры анизотропии $\delta_i = 1$, то полученная система (1) с точностью до коэффициентов совпадает с ранее выведенными уравнениями для гексагональной решетки из круглых частиц [1, 3–5].

Проанализированы зависимости скоростей волн от размеров и формы зерен. Показано, как по измерению скоростей акустических волн, распространяющихся вдоль разных кристаллографических направлений, определить упругие модули зернистого материала [2]. Прозрачность взаимосвязи между макропараметрами такого материала и параметрами его микроструктуры открывает большие возможности для целенаправленного проектирования материалов с заданными физико-механическими свойствами. Рассмотренная модель позволяет не только получить представление о качественном влиянии локальной структуры на эффективные модули упругости, но и проводить количественные оценки их величин. В частности, для некоторых материалов проведена оценка скорости ротационной волны.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты №10-08-01108, 09-08-0082).

Список литературы

1. Павлов И.С. // Введение в микро- и наномеханику: математические модели и методы / Под ред. А.И. Потапова. НГТУ им. Р.Е. Алексеева. Нижний Новгород, 2010. С. 117–164.
2. Pavlov I.S. // Acoustical Physics. 2010. Vol. 56, No 6. P. 924–934.
3. Suiker A.S.J., Metrikine A.V., de Borst R. // Int. J. of Solids and Structures. 2001. Vol. 38. P. 1563–1583.
4. Павлов И.С., Потапов А.И. // Докл. РАН. 2008. Т. 421, №3. С. 348–352.
5. Милосердова И.В., Павлов И.С., Потапов А.И. // Механика композиционных материалов и конструкций. 2006. Т. 12, №4. С. 555–565.

THE DISCRETE AND CONTINUOUS MODELS OF AN ANISOTROPIC NANOCRYSTALLINE MEDIUM WITH NON-DENSE PACKING OF THE PARTICLES

I.S. Pavlov, I.V. Miloserdova

The two-dimensional model of a crystal medium is considered that represents a rectangular lattice consisting of elastically interacting particles in the form of ellipses possessing transla-tional and rotational degrees of freedom. The differential-difference equations and linear equations in partial derivatives are obtained, which describe propagation and interaction of waves of various types in such a medium. The interrelation between the acoustic characteristics and the parameters of its microstructure is established. Possibility of control of dispersion properties of a medium by variation of parameters of its microstructure is shown.

Keywords: discrete and continuous models, medium with microstructure, anisotropy, elastic waves.