

УДК 539.3

## ОБЛАСТЬ УСТОЙЧИВОСТИ ПЛОТНОУПАКОВАННОГО СЛОЯ АТОМОВ

Н. С. Астапов, В. М. Корнев

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск  
E-mails: nika@hydro.nsc.ru, kornev@hydro.nsc.ru

Рассмотрена соответствующая плотноупакованному слою атомов ромбовидная четырехатомная элементарная ячейка, силы взаимодействия атомов которой определяются потенциалами Морса и Леннарда-Джонса при больших деформациях. Построена область устойчивости ячейки в зависимости от двух параметров, моделирующих растяжение-сжатие вдоль большей диагонали ячейки и сдвиг. Для каждой точки области устойчивости численно найдены равновесные состояния ячейки, из которых по крайней мере одно является устойчивым. Показано, что при нагружении плотноупакованного слоя атомов сжатием со сдвигом необходимо учитывать эффект Пуассона.

**Ключевые слова:** плотноупакованный слой атомов, четырехатомная ячейка, потенциалы Морса и Леннарда-Джонса, сдвиг, растяжение-сжатие, область устойчивости.

**Введение.** В основе теории твердого тела, объясняющей, в частности, его деформационные и прочностные свойства, лежит квантовая механика. Используя квантово-механический подход, все эмпирические постоянные в феноменологических теориях упругости, пластичности, ползучести, разрушения и т. д. можно вычислить точно, если известны строение и химический состав тела [1]. Существующие критерии разрушения, подтвержденные экспериментально, соответствуют сложным микрофизическим процессам разрушения, происходящим в масштабе структурной ячейки и приводящим к образованию макродефекта. Однако постановка задачи, учитывающая атомную структуру материала в явном виде, настолько усложняет решение, что почти всегда приходится использовать вместо нее модель сплошного деформируемого тела [1] либо рассматривать несколько разных моделей, каждая из которых описывает явления в присутствии ей пространственном масштабе: “Чем меньше размер модели, позволяющей провести экстраполяцию до больших масштабов. . . тем шире диапазон условий, которые можно предсказать или увязать друг с другом, отправившись от существующих экспериментальных данных” [2. С. 143]. Поэтому представляется естественным, что первым этапом квантово-механического решения задачи должно быть проведение статического анализа устойчивости в рамках ньютоновской механики. Как правило, на этом этапе можно получить всю необходимую информацию для описания макроскопических механических свойств твердого тела [1. С. 33; 3. С. 107].

Одной из целей подобных исследований является предсказание разрушения в местах концентрации напряжений в нагруженном теле с использованием вычисленных критических значений усилий [3]. Так, при проведении статического анализа устойчивости идеального кристалла в [4] применяется ньютоновское приближение, причем для описания взаимодействия атомов используются полуэмпирические потенциалы типа потенциалов

Леннарда-Джонса и Борна — Майера. Следует отметить, что параметры, входящие в выражение для модельного потенциала, выбирают так, чтобы вычисленные с его помощью значения физических величин, зависящих от межатомного взаимодействия, совпадали или были достаточно близки к значениям, определяемым экспериментально. В этом случае для изучения влияния внешних консервативных сил на механическое поведение кристалла в качестве функции полной потенциальной энергии системы выбирается сумма потенциала сил и эффективной энергии межатомных взаимодействий. Хотя межатомные силы почти для всех металлов даже приблизительно не являются центральными, основной вклад в изменение энергии при изменении атомной конфигурации для постоянного атомного объема может быть определен как работа сил центрального взаимодействия. Поэтому даже если нецентральные взаимодействия дают существенный вклад в энергию атомной решетки, можно получить удовлетворительные оценки некоторых свойств с помощью простейшей модели парных центральных взаимодействий [1, 5–7].

В работе [8] показано, каким образом плоское поле перемещений одного плотноупакованного слоя атомов, вызванное однородными деформациями, может быть использовано для построения допустимого поля перемещений гранецентрированной кубической решетки с однородными деформациями. При выполнении некоторых предположений общая потенциальная энергия бесконечного слоя пропорциональна энергии элементарной ячейки, состоящей из четырех атомов, поэтому важно подробно изучить поведение элементарной ячейки, так как оно в основном определяет поведение всей системы [3. С. 118]. В [8, 9] с использованием модельных потенциалов Леннарда-Джонса и Морса показано, что при возникновении сдвига четырехатомная элементарная ячейка преждевременно теряет устойчивость.

В данной работе в рамках подхода, изложенного в [1, 8, 9], исследуется устойчивость плоской четырехатомной элементарной ячейки при больших деформациях с учетом эффекта Пуассона.

**Постановка задачи.** Будем считать, что потенциальная энергия взаимодействия любых двух атомов есть некоторая функция  $v(\gamma)$  — сферически-симметричный потенциал взаимодействия двух тел, для которого сила взаимодействия направлена вдоль прямой, соединяющей их центры ( $\gamma$  — безразмерное расстояние между центрами). В дальнейшем ограничимся рассмотрением взаимодействия только ближайших соседних атомов, поэтому будем считать, что в ненагруженном состоянии четырехатомная элементарная ячейка является ромбовидной, причем расстояние между центрами двух средних атомов равно диаметру  $g$  атома (рис. 1, *a*). Напомним, что в [1, 8, 9] рассматривался лишь случай растяжения в направлении, перпендикулярном плотной упаковке, когда приложенное к слою напряжение стремится раздвинуть плотноупакованные цепочки атомов, возможно, при этом вращая их, но не изменяя длину цепочки. В отличие от указанных работ дополнительно будем учитывать взаимодействие двух средних атомов ячейки с помощью безразмерного расстояния  $2\tau$  между их центрами: в [1, 8, 9] полагалось  $\tau = 1/2$ , в данной работе рассматриваются любые значения  $\tau > 0$ . Однако из результатов расчета следует, что решения находятся в узком диапазоне  $0,40 < \tau < 0,65$ . Таким образом, ослаблено условие недеформируемости вертикальных цепочек, что позволяет учесть эффект Пуассона и изменение конфигурации ячейки при сжатии.

На рис. 1, *a* представлена недеформированная ячейка, на рис. 1, *б* (заимствованном из [3, рис. 69]) — ромбовидная ячейка, растянутая вдоль диагонали. Независимые обобщенные координаты  $\rho$ ,  $\theta$  и  $\tau$  позволяют определить деформацию элементарной ячейки, причем для идеальной системы (без учета сдвига)  $\theta = 0$ . Введем две зависимые переменные  $\alpha$  и  $\beta$  — безразмерные расстояния между парами атомов (рис. 1, *б*), причем в ненагруженном состоянии  $\alpha = \beta = 1$ ,  $\theta = 0$ ,  $\tau = 1/2$  и  $\rho = \sqrt{3}/2$ . Переменные  $\alpha$  и  $\beta$  выражаются через  $\rho$ ,

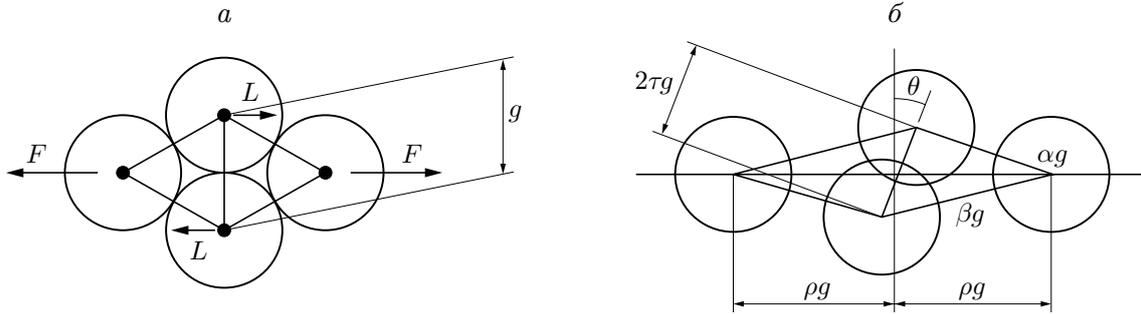


Рис. 1. Четырехатомная элементарная ячейка:  
*a* — недеформированная, *б* — растянутая вдоль диагонали

$\theta$  и  $\tau$  по формулам

$$\alpha^2 = \tau^2 + \rho^2 - 2\tau\rho \sin \theta, \quad \beta^2 = \tau^2 + \rho^2 + 2\tau\rho \sin \theta. \quad (1)$$

Рассмотрим деформацию системы под действием сил  $F$  и  $L$ , направленных вдоль большей диагонали ромба (рис. 1, *a*). Функцию общей потенциальной энергии элементарной ячейки запишем в виде [3]

$$V(\rho, \theta, \tau, F, L) = 2v(\alpha) + 2v(\beta) + v(2\tau) - 2F\rho g - 2L\tau g \sin \theta. \quad (2)$$

Минимум функции  $V$  является достаточным условием устойчивости состояния равновесия системы. Исследуем на устойчивость плоскую четырехатомную элементарную ячейку, используя в качестве потенциала взаимодействия двух атомов  $v(\gamma)$  потенциалы Леннарда-Джонса и Морса.

**Алгоритм решения.** При заданных силах  $F$  и  $L$  состояние равновесия ячейки определяется из равенства нулю производных функции общей потенциальной энергии, т. е. из системы трех нелинейных уравнений с тремя неизвестными  $\rho$ ,  $\theta$  и  $\tau$ :

$$V_\rho = 0, \quad V_\theta = 0, \quad V_\tau = 0. \quad (3)$$

Устойчивость состояния равновесия проверяется с помощью критерия Сильвестра по матрице Гессе производных второго порядка. Очевидно, что в начале системы координат, т. е. в точке  $F = 0$ ,  $L = 0$ , элементарная ячейка устойчива. Для построения области устойчивости на плоскости  $(F, L)$  зафиксируем одну из координат, например  $F$ , и, изменяя с некоторым шагом  $\Delta L$  вторую координату  $L = i\Delta L$  ( $i = 0, 1, 2, \dots$ ), исследуем соответствующую точку на устойчивость. Таким образом находится граница области устойчивости ячейки на плоскости  $(F, L)$ . Область устойчивости является симметричной относительно оси  $OF$  или смены знака  $L$ , поэтому в дальнейшем результаты расчетов приводятся только для положительных значений  $L$ , что следует из физических соображений.

**Область устойчивости в случае потенциала Морса.** Потенциал Морса запишем в виде [5, 6]

$$v(\gamma) = Ag^{-6} (e^{-2b(\gamma-1)}/2 - e^{-b(\gamma-1)}), \quad (4)$$

где  $A$ ,  $b$ ,  $g$  — параметры, определяемые типом атомов. Частные производные первого и второго порядков по  $\rho$ ,  $\theta$  и  $\tau$  функций  $\alpha(\rho, \theta, \tau)$  и  $\beta(\rho, \theta, \tau)$  находятся из соотношений (1) как производные неявных функций:

$$\begin{aligned} \alpha_\rho &= (\rho - \tau \sin \theta)/\alpha, & \alpha_\theta &= -\rho\tau \cos \theta/\alpha, & \alpha_\tau &= (\tau - \rho \sin \theta)/\alpha, \\ \beta_\rho &= (\rho + \tau \sin \theta)/\beta, & \beta_\theta &= \rho\tau \cos \theta/\beta, & \beta_\tau &= (\tau + \rho \sin \theta)/\beta, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\alpha_{\rho\rho} &= \tau^2 \cos^2 \theta / \alpha^3, & \alpha_{\rho\theta} &= \tau^2 \cos \theta (\rho \sin \theta - \tau) / \alpha^3, & \alpha_{\rho\tau} &= -\rho\tau \cos^2 \theta / \alpha^3, \\
\alpha_{\theta\theta} &= \rho\tau (\alpha^2 \sin \theta - \rho\tau \cos^2 \theta) / \alpha^3, & \alpha_{\theta\tau} &= \rho^2 \cos \theta (\tau \sin \theta - \rho) / \alpha^3, & & (5) \\
\beta_{\rho\rho} &= \tau^2 \cos^2 \theta / \beta^3, & \beta_{\rho\theta} &= \tau^2 \cos \theta (\rho \sin \theta + \tau) / \beta^3, & \beta_{\rho\tau} &= -\rho\tau \cos^2 \theta / \beta^3, \\
\beta_{\theta\theta} &= -\rho\tau (\beta^2 \sin \theta + \rho\tau \cos^2 \theta) / \beta^3, & \beta_{\theta\tau} &= \rho^2 \cos \theta (\tau \sin \theta + \rho) / \beta^3, & & \\
\alpha_{\tau\tau} &= \rho^2 \cos^2 \theta / \alpha^3, & \beta_{\tau\tau} &= \rho^2 \cos^2 \theta / \beta^3.
\end{aligned}$$

Используя соотношения (2), (4) и (5), систему (3) запишем в виде

$$(e^{-2b(\alpha-1)} - e^{-b(\alpha-1)})(\rho - \tau \sin \theta) / \alpha + (e^{-2b(\beta-1)} - e^{-b(\beta-1)})(\rho + \tau \sin \theta) / \beta + f = 0; \quad (6)$$

$$\rho(e^{-2b(\beta-1)} - e^{-b(\beta-1)}) / \beta - \rho(e^{-2b(\alpha-1)} - e^{-b(\alpha-1)}) / \alpha + l = 0; \quad (7)$$

$$\begin{aligned}
(e^{-2b(\alpha-1)} - e^{-b(\alpha-1)})(\tau - \rho \sin \theta) / \alpha + (e^{-2b(2\tau-1)} - e^{-b(2\tau-1)}) + \\
+ (e^{-2b(\beta-1)} - e^{-b(\beta-1)})(\tau + \rho \sin \theta) / \beta + l \sin \theta = 0, \quad (8)
\end{aligned}$$

где  $f = Fg^7 / (bA)$ ;  $l = Lg^7 / (bA)$ . Исключая  $l$  из уравнений (7) и (8), получим уравнение

$$(e^{-2b(\alpha-1)} - e^{-b(\alpha-1)})\tau / \alpha + e^{-2b(2\tau-1)} - e^{-b(2\tau-1)} + (e^{-2b(\beta-1)} - e^{-b(\beta-1)})\tau / \beta = 0, \quad (9)$$

которое вместе с (6) и (7) равносильно системе (6)–(8) или системе (3) для определения состояния равновесия элементарной ячейки при заданных  $F$  и  $L$  в случае потенциала Морса. Найденные решения  $(\rho, \theta, \tau)$  системы (6), (7), (9) подставим в выражения для вторых производных функции (2):

$$\begin{aligned}
V_{\rho\rho} &= b(2e^{-2b(\alpha-1)} - e^{-b(\alpha-1)})(1 - \tau^2 \cos^2 \theta / \alpha^2) - \\
&- (e^{-2b(\alpha-1)} - e^{-b(\alpha-1)})\tau^2 \cos^2 \theta / \alpha^3 - (e^{-2b(\beta-1)} - e^{-b(\beta-1)})\tau^2 \cos^2 \theta / \beta^3 + \\
&+ b(2e^{-2b(\beta-1)} - e^{-b(\beta-1)})(1 - \tau^2 \cos^2 \theta / \beta^2),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
V_{\rho\theta} &= \tau \cos \theta [-b(2e^{-2b(\alpha-1)} - e^{-b(\alpha-1)})\rho(\rho - \tau \sin \theta) / \alpha^2 + \\
&+ (e^{-2b(\alpha-1)} - e^{-b(\alpha-1)})\tau(\tau - \rho \sin \theta) / \alpha^3 - (e^{-2b(\beta-1)} - e^{-b(\beta-1)})\tau(\tau + \rho \sin \theta) / \beta^3 + \\
&+ b(2e^{-2b(\beta-1)} - e^{-b(\beta-1)})\rho(\rho + \tau \sin \theta) / \beta^2],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
V_{\rho\tau} &= b(2e^{-2b(\alpha-1)} - e^{-b(\alpha-1)})(\rho - \tau \sin \theta)(\tau - \rho \sin \theta) / \alpha^2 + \\
&+ (e^{-2b(\alpha-1)} - e^{-b(\alpha-1)})\rho\tau \cos^2 \theta / \alpha^3 + (e^{-2b(\beta-1)} - e^{-b(\beta-1)})\rho\tau \cos^2 \theta / \beta^3 + \\
&+ b(2e^{-2b(\beta-1)} - e^{-b(\beta-1)})(\tau + \rho \sin \theta)(\rho + \tau \sin \theta) / \beta^2,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
V_{\theta\theta} &= b(2e^{-2b(\alpha-1)} - e^{-b(\alpha-1)})(\rho\tau \cos \theta / \alpha)^2 - \\
&- (e^{-2b(\alpha-1)} - e^{-b(\alpha-1)})\rho\tau (\alpha^2 \sin \theta - \rho\tau \cos^2 \theta) / \alpha^3 + \\
&+ (e^{-2b(\beta-1)} - e^{-b(\beta-1)})\rho\tau (\beta^2 \sin \theta + \rho\tau \cos^2 \theta) / \beta^3 + \\
&+ b(2e^{-2b(\beta-1)} - e^{-b(\beta-1)})(\rho\tau \cos \theta / \beta)^2 + l\tau \sin \theta,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
V_{\theta\tau} &= \rho \cos \theta [-b(2e^{-2b(\alpha-1)} - e^{-b(\alpha-1)})\tau(\tau - \rho \sin \theta) / \alpha^2 + \\
&+ (e^{-2b(\alpha-1)} - e^{-b(\alpha-1)})\rho(\rho - \tau \sin \theta) / \alpha^3 - (e^{-2b(\beta-1)} - e^{-b(\beta-1)})\rho(\rho + \tau \sin \theta) / \beta^3 + \\
&+ b(2e^{-2b(\beta-1)} - e^{-b(\beta-1)})\tau(\tau + \rho \sin \theta) / \beta^2] - l \cos \theta,
\end{aligned}$$

Таблица 1

Координаты  $(f, l)$  граничных точек основной области устойчивости в случае потенциала Морса при  $b = 6$ , геометрические параметры ячейки  $\theta, \rho, \tau, \alpha, \beta$  и потенциальная энергия  $V$

$f$	$l$	$\theta$	$\rho$	$\tau$	$\alpha$	$\beta$	$V$
-0,3605	0	0	0,802	0,548	0,972	0,972	0,095
-0,36	0,096	0,013	0,802	0,549	0,966	0,978	0,094
-0,35	0,376	0,053	0,809	0,549	0,953	1,001	0,081
-0,33	0,610	0,099	0,825	0,547	0,944	1,034	0,055
-0,30	0,780	0,181	0,870	0,545	0,939	1,107	0,018
-0,25	0,732	0,189	0,889	0,526	0,944	1,115	-0,021
-0,20	0,675	0,190	0,898	0,518	0,948	1,118	-0,061
-0,15	0,619	0,187	0,904	0,513	0,952	1,119	-0,100
-0,10	0,563	0,182	0,908	0,509	0,957	1,118	-0,140
-0,05	0,507	0,174	0,911	0,505	0,962	1,115	-0,181
0	0,452	0,169	0,916	0,502	0,968	1,116	-0,222
0,05	0,397	0,160	0,919	0,499	0,974	1,114	-0,263
0,10	0,343	0,155	0,925	0,497	0,980	1,115	-0,305
0,15	0,289	0,143	0,928	0,495	0,987	1,112	-0,347
0,20	0,235	0,128	0,930	0,493	0,996	1,107	-0,390
0,25	0,184	0,124	0,940	0,491	1,005	1,113	-0,434
0,30	0,132	0,104	0,943	0,490	1,017	1,107	-0,478
0,35	0,083	0,091	0,954	0,488	1,031	1,110	-0,523
0,40	0,035	0,059	0,963	0,487	1,053	1,104	-0,569
0,44	0	0	0,981	0,486	1,095	1,095	-0,607

$$\begin{aligned}
 V_{\tau\tau} = & b(2e^{-2b(\alpha-1)} - e^{-b(\alpha-1)})(\tau - \rho \sin \theta)^2 / \alpha^2 - \\
 & - (e^{-2b(\alpha-1)} - e^{-b(\alpha-1)})\rho^2 \cos^2 \theta / \alpha^3 - (e^{-2b(\beta-1)} - e^{-b(\beta-1)})\rho^2 \cos^2 \theta / \beta^3 + \\
 & + b(2e^{-2b(\beta-1)} - e^{-b(\beta-1)})(\tau + \rho \sin \theta)^2 / \beta^2 + 2b(2e^{-2b(2\tau-1)} - e^{-b(2\tau-1)}).
 \end{aligned}$$

Здесь во всех выражениях опущен положительный множитель  $2bAg^{-6}$ , что не оказывает влияния на знаки главных миноров матрицы Гессе.

В табл. 1 приведены приближенные координаты  $(f, l)$  некоторых граничных точек области устойчивости элементарной ячейки в случае потенциала Морса при  $b = 6$  и соответствующие им значения геометрических величин, определяющих конфигурацию ячейки. (В табл. 1–5 значения параметров  $\theta, \rho, \tau$  указаны с тремя значащими цифрами, так как задания двух верных знаков в качестве начальных приближений часто недостаточно для сходимости метода Ньютона к решению, определяющему устойчивую конфигурацию ячейки.) В последней графе приведены отнесенные к величине  $2bAg^{-6}$  значения потенциальной функции, вычисленные по формуле (2). В табл. 2 при том же значении  $b = 6$  для некоторых значений  $f$  приведены граничные значения  $l$ , при которых возможна вторая устойчивая конфигурация элементарной ячейки, а также ее геометрические характеристики. Например, при  $f = -0,3$  и  $l = 0,467$  кроме решения  $(\theta, \rho, \tau)$ , приведенного в табл. 2, возможны еще три решения:  $(0,072; 0,796; 0,58)$ ,  $(0,746; 1,234; 0,523)$  и  $(0,074; 0,831; 0,528)$ , причем последнее решение соответствует устойчивому состоянию равновесия.

В табл. 3 приведены результаты расчета при  $b = 1$ .

**Область устойчивости для потенциала Леннарда-Джонса.** В данном случае потенциал взаимодействия двух атомов задается равенством [8]

$$v(\gamma) = Ag^{-6}(\gamma^{-12}/2 - \gamma^{-6}) \quad (10)$$

Таблица 2

Координаты  $(f, l)$  граничных точек дополнительной области устойчивости в случае потенциала Морса при  $b = 6$ , геометрические параметры ячейки  $\theta, \rho, \tau, \alpha, \beta$  и потенциальная энергия  $V$

$f$	$l$	$\theta$	$\rho$	$\tau$	$\alpha$	$\beta$	$V$
-0,3605	0,563	1,435	1,478	0,527	0,958	2,001	0,123
	0,551	0,953	1,338	0,531	0,956	1,797	0,129
-0,36	0,563	1,543	1,485	0,527	0,959	2,011	0,123
	0,550	0,939	1,332	0,531	0,956	1,788	0,129
-0,35	0,546	1,429	1,476	0,525	0,959	1,998	0,117
	0,535	0,966	1,344	0,528	0,957	1,804	0,122
-0,30	0,467	1,509	1,481	0,519	0,964	1,999	0,084
	0,459	0,996	1,356	0,521	0,962	1,816	0,088
-0,25	0,388	1,431	1,475	0,514	0,968	1,986	0,050
	0,384	1,088	1,394	0,515	0,967	1,865	0,052
-0,20	0,310	1,364	1,468	0,511	0,973	1,970	0,016
	0,309	1,223	1,438	0,511	0,973	1,926	0,017
-0,15	0,233	1,251	1,447	0,508	0,979	1,936	-0,019

Таблица 3

Координаты  $(f, l)$  граничных точек области устойчивости в случае потенциала Морса при  $b = 1$ , геометрические параметры ячейки  $\theta, \rho, \tau, \alpha, \beta$  и потенциальная энергия  $V$

$f$	$l$	$\theta$	$\rho$	$\tau$	$\alpha$	$\beta$	$V$
-0,179	0	0	0,615	0,644	0,890	0,890	-1,111
-0,15	0,196	0,204	0,666	0,632	0,820	1,006	-1,142
-0,10	0,360	0,372	0,751	0,628	0,785	1,141	-1,207
-0,05	0,528	0,574	0,895	0,632	0,766	1,347	-1,295
-0,03	0,642	0,995	1,213	0,597	0,782	1,744	-1,360
-0,02	0,621	1,027	1,229	0,582	0,791	1,753	-1,362
0	0,582	1,075	1,254	0,562	0,806	1,769	-1,367
0,05	0,491	1,052	1,256	0,530	0,838	1,736	-1,387
0,10	0,408	1,056	1,279	0,508	0,873	1,740	-1,413
0,15	0,329	0,976	1,276	0,492	0,911	1,705	-1,443
0,20	0,256	0,925	1,292	0,478	0,955	1,699	-1,478
0,25	0,187	0,799	1,286	0,467	1,006	1,653	-1,518
0,30	0,125	0,696	1,300	0,458	1,067	1,632	-1,563
0,35	0,070	0,558	1,317	0,450	1,144	1,601	-1,614
0,40	0,025	0,386	1,348	0,445	1,250	1,571	-1,671
0,446	0	0	1,399	0,441	1,467	1,467	-1,731

и система уравнений (3) для определения состояния равновесия ячейки при заданных  $f$  и  $l$  записывается в виде

$$\begin{aligned}
 (1/\alpha^8 - 1/\alpha^{14})(\rho - \tau \sin \theta) + (1/\beta^8 - 1/\beta^{14})(\rho + \tau \sin \theta) - f &= 0, \\
 \rho(-1/\alpha^8 + 1/\alpha^{14} + 1/\beta^8 - 1/\beta^{14}) - l &= 0, \\
 1/\alpha^8 - 1/\alpha^{14} + 1/\beta^8 - 1/\beta^{14} + 2/(2\tau)^8 - 2/(2\tau)^{14} &= 0,
 \end{aligned} \tag{11}$$

где  $f = Fg^7/(6A)$ ;  $l = Lg^7/(6A)$ ; функции  $\alpha, \beta$  и их производные находятся из соотношений (1) и (5). Устойчивость найденного состояния равновесия определяется с помощью

Таблица 4

Координаты  $(f, l)$  граничных точек области устойчивости в случае потенциала Леннарда-Джонса, геометрические параметры ячейки  $\theta, \rho, \tau, \alpha, \beta$  и потенциальная энергия  $V$

$f$	$l$	$\theta$	$\rho$	$\tau$	$\alpha$	$\beta$	$V$
-0,327	0	0	0,809	0,543	0,975	0,975	0,093
-0,30	0,585	0,097	0,832	0,545	0,949	1,038	0,056
-0,277	0,708	0,176	0,876	0,543	0,947	1,108	0,029
-0,25	0,681	0,183	0,890	0,529	0,949	1,114	0,012
-0,20	0,625	0,177	0,896	0,519	0,953	1,111	-0,023
-0,15	0,570	0,178	0,904	0,513	0,957	1,115	-0,061
-0,10	0,514	0,168	0,906	0,508	0,961	1,110	-0,099
-0,05	0,459	0,164	0,911	0,505	0,966	1,111	-0,139
0	0,404	0,156	0,914	0,502	0,971	1,109	-0,178
0,05	0,349	0,146	0,916	0,499	0,977	1,105	-0,219
0,10	0,295	0,137	0,920	0,497	0,984	1,103	-0,259
0,15	0,242	0,129	0,925	0,495	0,991	1,104	-0,301
0,20	0,189	0,116	0,929	0,493	1,000	1,101	-0,343
0,25	0,138	0,107	0,937	0,491	1,010	1,103	-0,386
0,30	0,087	0,086	0,943	0,490	1,024	1,099	-0,430
0,35	0,039	0,062	0,954	0,488	1,044	1,098	-0,475
0,399	0	0	0,982	0,487	1,096	1,096	-0,520

критерия Сильвестра после подстановки решения  $(\rho, \theta, \tau)$  системы (11) в выражения для вторых производных функции (2), отнесенные к величине  $12Ag^{-6}$ :

$$\begin{aligned}
 V_{\rho\rho} &= 13/\alpha^{14} - 7/\alpha^8 + 13/\beta^{14} - 7/\beta^8 - (14/\alpha^{16} - 8\alpha^{10} + 14/\beta^{16} - 8/\beta^{10})(\tau \cos \theta)^2, \\
 V_{\rho\theta} &= \tau \cos \theta [(2/\alpha^{16} - 1/\alpha^{10} + 2/\beta^{16} - 1/\beta^{10})6\rho\tau \sin \theta + \\
 &\quad + (1/\alpha^{16} - 1/\alpha^{10} - 1/\beta^{16} + 1/\beta^{10})\tau^2 - (13/\alpha^{16} - 7/\alpha^{10} - 13/\beta^{16} + 7/\beta^{10})\rho^2], \\
 V_{\rho\tau} &= (14/\alpha^{16} - 8/\alpha^{10} + 14/\beta^{16} - 8/\beta^{10})\rho\tau \cos^2 \theta - (13/\alpha^{14} - 7/\alpha^8 - 13/\beta^{14} + 7/\beta^8) \sin \theta, \\
 V_{\theta\theta} &= (14/\alpha^{16} - 8/\alpha^{10} + 14/\beta^{16} - 8/\beta^{10})(\rho\tau \cos \theta)^2, \\
 V_{\theta\tau} &= -l \cos \theta + \rho \cos \theta [(2/\alpha^{16} - 1/\alpha^{10} + 2/\beta^{16} - 1/\beta^{10})6\rho\tau \sin \theta + \\
 &\quad + (1/\alpha^{16} - 1/\alpha^{10} - 1/\beta^{16} + 1/\beta^{10})\rho^2 - (13/\alpha^{16} - 7/\alpha^{10} - 13/\beta^{16} + 7/\beta^{10})\tau^2], \\
 V_{\tau\tau} &= 13/\alpha^{14} - 7/\alpha^8 + 13/\beta^{14} - 7/\beta^8 + 2[13/(2\tau)^{14} - 7/(2\tau)^8] - \\
 &\quad - (14/\alpha^{16} - 8\alpha^{10} + 14/\beta^{16} - 8/\beta^{10})(\rho \cos \theta)^2.
 \end{aligned}$$

В табл. 4 указаны приближенные координаты  $(f, l)$  некоторых граничных точек области устойчивости элементарной ячейки в случае потенциала Леннарда-Джонса.

Исследуем более подробно некоторые частные случаи равновесных состояний ячейки. При  $\tau = 1/2$  третье уравнение системы (11) записывается в виде

$$1/\alpha^8 - 1/\alpha^{14} + 1/\beta^8 - 1/\beta^{14} = 0. \quad (12)$$

Тогда при  $\theta = 0$  (т. е.  $\alpha = \beta$ ) единственным равновесным состоянием является исходная конфигурация ячейки  $\alpha = \beta = 1$  при  $f = l = 0$ . Рассмотрим вспомогательную функцию  $t(x) = 1/x^8 - 1/x^{14}$  при  $x > 0$ , которая монотонно возрастает до  $t_{\max} \approx 0,203$  в точке  $x_{\max} = (7/4)^{1/6} \approx 1,098$ , а затем монотонно убывает до нуля, причем  $t(x) < 0$  при  $x < 1$  и  $t(x) > 0$  при  $x > 1$ . В этом случае при  $\alpha \neq \beta$  (т. е.  $\theta \neq 0$ ) для каждого  $\alpha < 1$  уравнение (12)

может иметь два решения  $1 < \beta_1 < 1,098 < \beta_2$ , соответствующих двум возможным состояниям равновесия, одно из которых оказывается устойчивым. Отметим, что первые два уравнения системы (11) можно использовать для вычисления значений  $f$  и  $l$ , при которых достигаются именно эти состояния равновесия:  $(\alpha, \beta_1)$  и  $(\alpha, \beta_2)$ . Кроме того, из (12) следует, что при  $\tau = 1/2$  и  $\theta \neq 0$  равновесие ячейки в случае, если  $\alpha$  и  $\beta$  одновременно больше или меньше единицы, невозможно.

При  $\tau = 1/2$  из первого уравнения системы (11), учитывая (12), находим  $f = (1/\beta^8 - 1/\beta^{14}) \sin \theta$ . Отсюда следует, что  $f$  может быть равно нулю только для исходной конфигурации четырех атомов, т. е. при  $f = 0$ ,  $\tau = 1/2$ ,  $l \neq 0$  (“чистый сдвиг без обжатия”) равновесие ячейки невозможно.

Если  $\theta = 0$  ( $\alpha = \beta$ ), то третье уравнение системы (11) принимает вид

$$-1/\alpha^8 + 1/\alpha^{14} = 1/(2\tau)^8 - 1/(2\tau)^{14}. \quad (13)$$

Решениями этого уравнения при  $\tau < 1/2$  являются значения  $1 < \alpha_1 < 1,098 < \alpha_2$ , а при  $\tau > 1/2$  — значения  $\alpha < 1$ . Наибольшее значение  $\tau$  ( $\tau > 1/2$ ), при котором существует решение уравнения (13), а следовательно, и состояние равновесия, равно  $\tau = (7/4)^{1/6}/2 \approx 0,549$ , что соответствует значениям, приведенным в первой строке табл. 4. Наименьшее значение  $\tau$  ( $\tau < 1/2$ ), при котором существует состояние равновесия, является корнем уравнения  $-1/x^8 + 1/x^{14} - \varepsilon = 0$  или  $x^2(1/x^8)^2 - 1/x^8 - \varepsilon = 0$ , где  $x = 2\tau$ ;  $\varepsilon = (4/7)^{4/3} - (4/7)^{7/3}$ . Отсюда находим  $1/x^8 = (1 + \sqrt{1 + 4\varepsilon x^2})/(2x^2) < (1 + \sqrt{1 + 4\varepsilon})/(2x^2)$  или  $\tau > [2/(1 + \sqrt{1 + 4\varepsilon})]^{1/6}/2 \approx 0,487$ , что соответствует значениям, приведенным в последней строке табл. 4. В этом случае из первого уравнения системы (11) получим формулу  $f = 2\rho(1/\alpha^8 - 1/\alpha^{14})$  для вычисления растягивающей нагрузки, значение которой незначительно больше значения, вычисленного по формуле (56) в [3. С. 119], так как  $\alpha^2 < \rho^2 + 1/4$ , вследствие того что  $\tau \approx 0,487$  незначительно меньше  $1/2$ .

Наконец, если  $\tau \neq 1/2$  или  $\theta \neq 0$ , третье уравнение системы (11) может иметь бесконечно много решений, часть которых может соответствовать устойчивым состояниям равновесия элементарной ячейки.

В табл. 5 приведены результаты аналогичных расчетов при дополнительном условии  $\tau = 1/2$ , которое эквивалентно условию, что при вращении плотноупакованных цепочек атомов их длина не меняется, т. е. коэффициент Пуассона равен нулю. В этом случае система уравнений равновесия содержит только два уравнения  $V_\rho = 0$ ,  $V_\theta = 0$ . Эти уравнения подробно изучены в [3] для области растяжения-сдвига ( $f > 0$ ).

Таблица 5

Координаты  $(f, l)$  граничных точек области устойчивости  
в случае потенциала Леннарда-Джонса при  $\tau = 1/2$   
(несжимаемость вертикальных цепочек плотноупакованного слоя атомов),  
геометрические параметры ячейки  $\theta$ ,  $\rho$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  и потенциальная энергия  $V$

$f$	$l$	$\theta$	$\rho$	$\tau$	$\alpha$	$\beta$	$V$
-0,5	0,974	0,214	0,902	0,5	0,934	1,120	0,223
-0,4	0,858	0,207	0,905	0,5	0,939	1,120	0,145
-0,3	0,742	0,192	0,904	0,5	0,946	1,113	0,066
-0,2	0,628	0,181	0,906	0,5	0,953	1,111	-0,014
-0,1	0,515	0,168	0,909	0,5	0,961	1,108	-0,095
0	0,404	0,155	0,913	0,5	0,971	1,107	-0,177
0,1	0,295	0,140	0,920	0,5	0,984	1,107	-0,261
0,2	0,188	0,117	0,927	0,5	1,000	1,103	-0,346
0,3	0,085	0,085	0,938	0,5	1,025	1,100	-0,434
0,397	0	0	0,977	0,5	1,097	1,097	-0,524

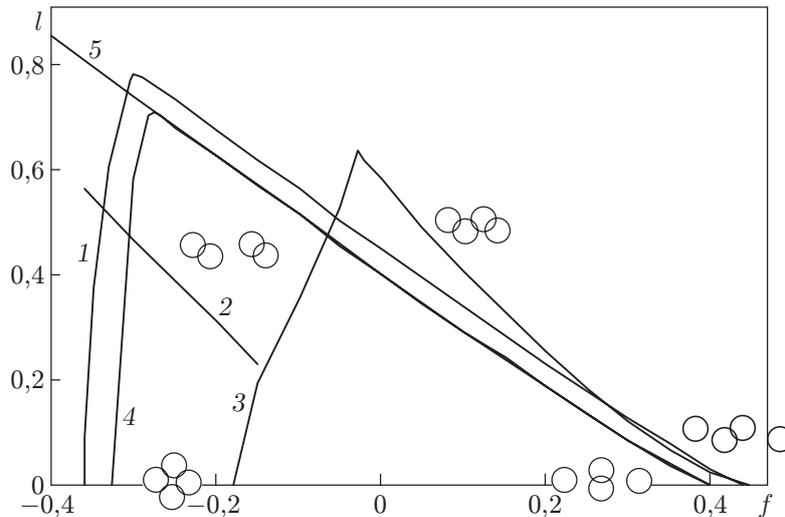


Рис. 2. Границы областей устойчивости, построенные по данным табл. 1–5 (кривые 1–5 соответственно)

**Обсуждение результатов.** На рис. 2 приведены границы областей устойчивости, построенные по данным табл. 1–5 (кривые 1–5 соответственно). Границы показаны лишь в верхней полуплоскости, так как область устойчивости симметрична относительно оси  $f$ . Действительно, если точка с координатами  $(f, l)$  соответствует равновесному состоянию ячейки, то система уравнений (6)–(8) имеет решение  $(\rho, \tau, \theta, \alpha, \beta)$ . Легко проверить, что в этом случае совокупность величин  $(\rho, \tau, -\theta, \beta, \alpha)$  является решением системы (6)–(8) для точки  $(f, -l)$ . Следовательно, точка  $(f, -l)$ , симметричная точке  $(f, l)$ , является также точкой равновесия элементарной ячейки. Аналогично по матрице Гессе аналитически проверяется одновременная устойчивость симметричных состояний равновесия  $(f, l)$  и  $(f, -l)$ . Результаты расчетов подтверждают правильность сделанных заключений, тем самым подтверждается соответствие математической модели физическим соображениям.

На рис. 2 кружками схематично показано изменение конфигурации элементарной ячейки вдоль границ областей устойчивости в зависимости от величины и направления сил  $f$  и  $l$ . На рис. 2 видно, что границы областей устойчивости в случаях  $\tau \neq 1/2$  и  $\tau = 1/2$  (кривые 4 и 5 соответственно) различаются незначительно при  $f = -0,25 \div 0,40$ . Аналогичные кривые (см. [10, рис. 4, 5]) получены при исследовании напряженного состояния трехатомной ячейки. Заметим, что кривая 5 на рис. 2 является практически прямой, что согласуется с результатами исследований, проведенных в [3. С. 121], лишь при  $f > 0$ , т. е. в режиме растяжения-сдвига.

Для всех точек  $(f, l)$ , информация для которых приведена в табл. 1–5, дополнительно вычислялся “атомный объем”  $S = 2\rho\tau \cos \theta$  как площадь параллелограмма с вершинами в центрах атомов элементарной ячейки, причем для ненагруженной исходной ячейки  $S = \sqrt{3}/2 \approx 0,866$ . Оказалось, что наибольшее значение  $S \leq 0,977$  для точек, приведенных в табл. 1, 4, 5, и  $S = 1,234$  для точек, приведенных в табл. 3, достигалось при  $l = 0$ ,  $f > 0$ , т. е. при наибольшей растягивающей нагрузке. Наименьшее значение  $S \geq 0,866$  достигалось для точек, приведенных в табл. 1, 4, 5, а  $S = 0,66$  — для точек, приведенных в табл. 3. Кроме того, для точек, приведенных в табл. 1, 3, 4, 5, при наибольшем значении  $l$  площадь  $S$  достигала локального максимума  $S \leq 0,950$ . Для всех точек, приведенных в табл. 2, значение  $S$  изменялось от 0,044 до 0,835, что позволяет усомниться в физической возможности второй устойчивой конфигурации.

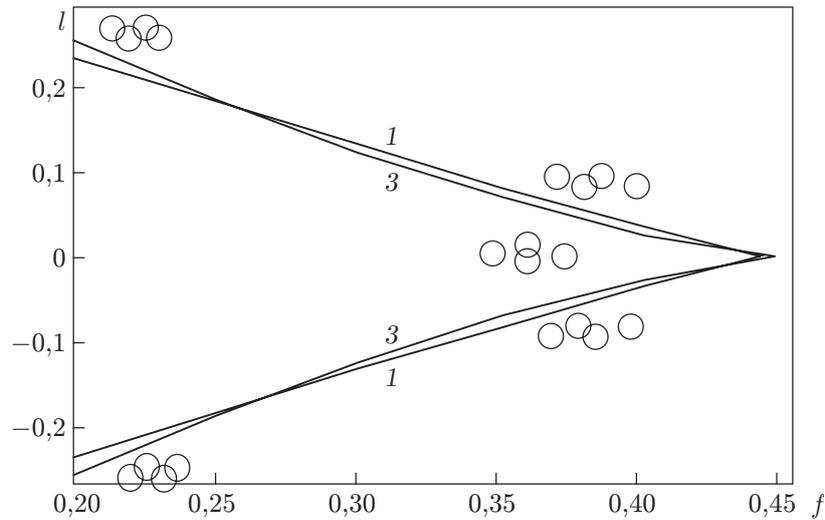


Рис. 3. Заостренная часть границы области устойчивости в случае потенциала Морса:  
1 —  $b = 6$ ; 3 —  $b = 1$

Если межатомные расстояния приближенно равны диаметрам атомов, то потенциал Леннарда-Джонса (10) приближенно совпадает с потенциалом Морса (4) при  $b = 6$ . Действительно, полагая  $\alpha = 1 + x$ ,  $x \approx 0$ , запишем разложения потенциалов в ряд Маклорена:

$$\begin{aligned} e^{-2b(\alpha-1)}/2 - e^{-b(\alpha-1)} &= e^{-2bx}/2 - e^{-bx} = -1/2 + (bx)^2/2 - (bx)^3/2 + \dots = \\ &= -1/2 + (6x)^2/2 - (6x)^3/2 + \dots \approx -1/2 + 36x^2/2 - 252x^3/2 + \dots = \\ &= (1+x)^{-12}/2 - (1+x)^{-6} = \alpha^{-12}/2 - \alpha^{-6}. \end{aligned}$$

Можно ожидать, что поведение элементарной ячейки в случае потенциала Морса при  $b = 6$  будет приближенно совпадать с поведением ячейки в случае потенциала Леннарда-Джонса, так как  $2\tau \approx 1$ ,  $\alpha \approx 1$ ,  $\beta \approx 1$  (см. табл. 1). Это предположение подтверждается результатами расчетов (см. табл. 1, 4 и кривые 1, 4 на рис. 2).

На рис. 3 в диапазоне  $0,20 \leq f \leq 0,45$ ,  $-0,24 \leq l \leq 0,24$  показаны границы областей устойчивости ячейки в случае потенциала Морса при  $b = 6$  (кривая 1) и  $b = 1$  (кривая 3). Поведение кривых 1, 3 в указанном диапазоне соответствует критерию разрушения Кулона — Мора, рассмотренному в [11. С. 415], где обсуждается усечение поверхности разрушения в области растяжения-сдвига. Кулон предположил, что на процесс разрушения влияет “внутреннее трение”. Мор предложил гипотезу, согласно которой разрушение начинается в тот момент, когда напряжение сдвига на произвольной площадке достигает предельного значения, являющегося функцией нормального напряжения на этой площадке. Поэтому критерий разрушения, соответствующий уравнению прямолинейной огибающей всех больших кругов Мора, в свою очередь, соответствующих состояниям начала разрушения, называется критерием Кулона — Мора. В [11] показано, что предельная кривая в виде линейной огибающей дает критерий разрушения, пригодный для многих хрупких материалов. В рассматриваемом случае результаты расчетов подтверждают, что аппроксимация Кулона — Мора приемлема при нагружении силой  $f$  в диапазоне от  $-0,25$  до  $0,40$  (кривая 1 для потенциала Морса при  $b = 6$  и кривая 4 для потенциала Леннарда-Джонса на рис. 2). Поэтому можно ожидать, что в макроэксперименте для плотноупакованного слоя значения критических нагрузок будут мало отличаться от значений, соответствующих точкам предельных кривых.

Заметим, что в режиме сжатия-сдвига поведение границ областей устойчивости, полученных численно, хорошо согласуется с теоретическими предсказаниями в [12. С. 218].

**Выводы.** Таким образом, численно построена область устойчивости четырехатомной ромбовидной элементарной ячейки, соответствующей плотноупакованному слою атомов, в случае потенциалов Морса и Леннарда-Джонса в зависимости от двух параметров, моделирующих растяжение-сжатие вдоль большей диагонали ячейки и сдвиг. Получена непрерывная замкнутая первая ветвь кривой критических устойчивых состояний (кривые 1, 3, 4 на рис. 2) во всем рассмотренном диапазоне параметров нагружения. Выявлено, что для четырехатомной ячейки потенциал Леннарда-Джонса оказывается практически эквивалентным частному случаю потенциала Морса при  $b = 6$ . Обнаружена подобласть области устойчивости, внутри которой существует две различных устойчивых конфигурации ячейки при одинаковом нагружении. Для некоторых участков границы области устойчивости удалось провести сравнение, результаты которого хорошо согласуются с известными результатами. Показано, что в режиме растяжения-сдвига эффект Пуассона можно не учитывать, однако в режиме сжатия-сдвига граница области устойчивости имеет другой вид.

Программа нагружения, реализованная в численных расчетах для четырехатомной ячейки, соответствует сложному нагружению образцов из оргстекла в [13]. В работе [13] экспериментально установлено, что при простом (пропорциональном) и сложном нагружении значения критических нагрузок практически совпадают (см. [13]). Таким образом, по характеру предельных кривых для плотноупакованного слоя атомов можно судить о макроскопических механических свойствах твердого тела.

По-видимому, экспериментально не удастся получить заостренный участок границы области устойчивости (см. кривые 1, 3 на рис. 3), так как затруднительно осуществить “чистое растяжение без сдвига” из-за влияния крепления образцов, что отмечается в [13–15]. Предположительно в окрестности этого заостренного участка границы области устойчивости будут наблюдаться большие разбросы экспериментальных значений критических нагрузок.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Черепанов Г. П.** Механика хрупкого разрушения. М.: Наука, 1974.
2. **Макклинток Ф. А., Ирвин Дж. Р.** Вопросы пластичности в механике разрушения // Прикладные вопросы вязкости разрушения. М.: Мир, 1968.
3. **Томпсон Дж. М. Т.** Неустойчивости и катастрофы в науке и технике. М.: Мир, 1985.
4. **Maxmillan N. H., Kelly A.** The mechanical properties of perfect crystals // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A. 1972. V. 330. P. 291–308.
5. **Коттерилл Р., Дояма М.** Энергия и атомная конфигурация полной и расщепленной дислокаций // Актуальные вопросы теории дислокаций: Сб. ст. М.: Мир, 1968. С. 135–168.
6. **Кристиан Дж.** Теория превращений в металлах и сплавах. М.: Мир, 1978. Ч. 1. С. 164–192.
7. **Finnis M. W., Sinclair J. E.** A simple empirical  $N$ -body potential for transition metals // Philos. Mag. Ser. A. 1984. V. 50, N 1. P. 45–55.
8. **Thompson J. M. T., Shorrock P. A.** Bifurcational instability of an atomic lattice // J. Mech. Phys. Solids. 1975. V. 23. P. 21–37.
9. **Астапов Н. С., Корнев В. М.** Влияние деформаций сдвига на теоретическую прочность атомной решетки // ПМТФ. 1999. Т. 40, № 4. С. 208–213.
10. **Kornev V. M., Kurguzov V. D.** A discrete-integral strength criterion for complicated stress states // Fatigue Fract. Engng Mater. Struct. 1999. V. 22. P. 989–995.
11. **Поль Б.** Макроскопические критерии пластического течения и хрупкого разрушения // Разрушение: В 7 т. Т. 2. Математические основы теории разрушения. М.: Мир, 1975. С. 336–520.

12. **Хендин Д.** Прочность и пластичность // Справочник физических констант горных пород. М.: Мир, 1969. С. 211–272.
13. **Баев Л. В., Коробейников С. Н.** Выпучивание круговой цилиндрической оболочки из оргстекла при совместном действии крутящего момента и осевой силы // Механика полимеров. 1977. № 6. С. 1051–1057.
14. **Корнев В. М., Тихомиров Ю. В.** Деформирование и потеря устойчивости участка цепочки атомов в вершине трещины // ПМТФ. 1993. Т. 34, № 3. С. 160–172.
15. **Макмилан Н.** Идеальная прочность твердых тел // Атомистика разрушения: Сб. ст. 1983–1985 гг. / Сост. А. Ю. Ишлинский. М.: Мир, 1987. С. 35–103.

*Поступила в редакцию 1/VII 2005 г.,  
в окончательном варианте — 20/III 2006 г.*

---