

На правах рукописи



Бокий Дмитрий Игоревич

**НЕЛИНЕЙНЫЕ КОЛЕБАНИЯ И АУКСЕТИЧЕСКИЕ
СВОЙСТВА ДВУМЕРНОЙ РЕШЕТКИ**

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Барнаул – 2016

Работа выполнена в ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова»

Научный руководитель: **Корзникова Елена Александровна**,
кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, ФГБУН «Институт проблем сверхпластичности металлов РАН»

Официальные оппоненты: **Четвериков Александр Петрович**,
доктор физико-математических наук, профессор, профессор каф. радиофизики и нелинейной динамики, ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»

Соболева Эльвира Гомеровна

кандидат физико-математических наук, доцент кафедры сварочного производства, Юргинский технологический институт (филиал) ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»

Ведущая организация: ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет», г. Уфа

Защита состоится «_____» января 2017 г. в _____⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета Д 212.004.04 при Алтайском государственном техническом университете им. И.И. Ползунова по адресу: 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.,
e-mail: veronika_65@mail.ru.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

<http://www.altstu.ru/structure/unit/odia/scienceevent/3053/>

Автореферат разослан «_____» _____ 2016 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук,
доцент



Романенко В.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. В последние десятилетия внимание физиков привлекают так называемые «отрицательные» материалы, например, **ауксеттики** (то есть материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона) [1], материалы с отрицательным коэффициентом теплового расширения [2], трехмерные материалы с отрицательной сжимаемостью в одном или даже двух направлениях [3], среды с отрицательным показателем преломления [4] и др. Аномальные свойства таких материалов интересны как с чисто научной точки зрения, так и ввиду того, что они могут лечь в основу новых технологий.

В настоящей работе внимание будет уделено ауксетикам, которые при приложении одноосной растягивающей нагрузки увеличиваются в размере как вдоль приложенной силы, так и в **поперечном** направлении. Однако на практике мы чаще имеем дело с материалами, которые при растяжении (положительная деформация) уменьшаются в поперечном направлении (отрицательная деформация) так, что их коэффициент Пуассона, определяемый как отношение поперечной деформации ε_t к продольной ε_l , взятое со знаком минус,

$$\nu = -\varepsilon_t / \varepsilon_l, \quad (1)$$

оказывается положительным. Следует сказать, что существование ауксетиков не противоречит базовым законам физики. Термодинамически устойчивый **изотропный** материал может иметь коэффициент Пуассона в пределах $-1 < \nu < 1$ в двумерном и $-1 < \nu < 0,5$ в трехмерном случаях. Для анизотропных материалов отсутствуют теоретические ограничения на величину коэффициента Пуассона и он зависит от выбора как оси растяжения, так и выбора направления для измерения поперечной деформации. По этой причине анизотропный материал может быть **частичным ауксетиком**, то есть иметь $\nu < 0$ при выборе одних направлений и быть обыкновенным материалом с положительным ν для других направлений. Несмотря на отсутствие теоретического запрета на существование ауксетиков, на практике они встречаются не часто. С другой стороны, монокристаллы нередко бывают частичными ауксетиками [5], становясь обычными материалами в поликристаллическом состоянии.

Необычные свойства материалов связаны с особенностями их структуры. Есть несколько классических примеров конструкций, для которых ауксетическое поведение интуитивно понятно. На рис. 1 показаны (а)

стержневая конструкция и (б) система жестких квадратов, соединенных так, что они могут поворачиваться в ходе деформации. Видно, что при растяжении в горизонтальном направлении размер конструкций в поперечном направлении также увеличивается, то есть их коэффициент Пуассона отрицателен.

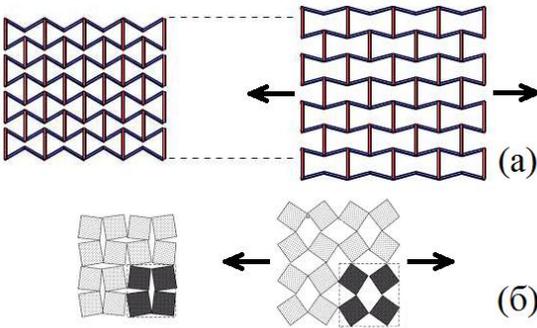


Рис. 1. Примеры ауксетических структур. (а) Стержневая конструкция. (б) Система жестких квадратов, соединенных так, что они могут поворачиваться в ходе деформации.

Анализу механических и акустических свойств таких конструкций посвящено большое количество работ [6,7]. В частности, было показано, что стержневые системы в зависимости от их конфигурации и способа соединения стержней способны не только демонстрировать ауксетические свойства, но и выступать в качестве фильтров частот [6] или приводить к явлению фокусировки упругих волн [7]. Подавляющее число работ посвящено изучению динамики таких систем в режиме малых перемещений, когда возможна линеаризация уравнений движения.

При высокоамплитудных внешних воздействиях или при значительных деформациях материал проявляет нелинейные свойства. Особый интерес представляют задачи, где нелинейные эффекты накладываются на аномальные упругие свойства материала. Волны солитонного типа, распространяющиеся в ауксетических пластинах, были проанализированы в рамках механики сплошной среды [8]. Нелинейные эффекты в двумерных решетках исследовались в работах [9-11].

Среди нелинейных колебательных мод в решетках особое положение занимают делокализованные коротковолновые моды, называемые одномерными бушами (ОБ) [12]. ОБ – это точные решения нелинейных уравнений движения решетки, продиктованные ее симметрией, вне зависимости от ти-

па взаимодействия между частицами решетки и вне зависимости от амплитуды. С ростом амплитуд этих мод все большую роль начинают играть эффекты геометрической и/или физической нелинейности.

Другой тип нелинейных колебательных мод – это пространственно локализованные моды, называемые дискретными бризерами (ДБ) [13]. Частоты их колебаний лежат вне спектра малоамплитудных бегущих волн, поэтому ДБ не теряют свою энергию на возбуждение таких волн и могут иметь очень большое время жизни. Свойства ДБ в двумерных кристаллах с гексагональной решеткой изучались в работах [14-22].

Эффективный метод решения задач о нелинейной динамике решеток – это метод молекулярной динамики, использованный в данной работе.

Численное изучение возможности возбуждения ДБ в ауксетических структурах, а также изучение влияния ОБ на ауксетические свойства нелинейных двумерных решеток представляется важной и актуальной задачей. Решение этих задач существенно расширило бы наши представления о взаимосвязи нелинейных колебаний с аномальными упругими свойствами двумерных ауксетических структур.

В связи с этим сформулируем **цель работы:** возбуждение и изучение свойств дискретных бризеров и одномерных бушей в двумерных решетках и анализ их влияния на ауксетические свойства решеток.

Для достижения поставленной цели, с использованием методов численного моделирования, решались следующие **задачи:**

1. Формулировка молекулярно-динамических моделей двумерных нелинейных решеток, как ауксетических так и неауксетических.

2. Расчет спектров малоамплитудных колебаний двумерных решеток.

3. Возбуждение ДБ и изучение их свойств в ауксетической двумерной решетке.

4. Возбуждение ОБ в неауксетической двумерной решетке и анализ эволюции инженерных констант упругости решетки в зависимости от амплитуды ОБ.

5. Анализ модуляционной неустойчивости ОБ в неауксетической двумерной решетке. Изучение возникновения ДБ по механизму модуляционной неустойчивости ОБ.

Научная новизна:

1. Впервые показана возможность возбуждения ДБ в ауксетической двумерной решетке и описаны их свойства.

2. Установлен новый механизм появления ауксетических свойств двумерной решетки за счет возбуждения в ней ОБ совместно с приложением однородного растяжения.

3. Найдены ОБ в неауксетической двумерной решетке, модуляционная неустойчивость которых приводит к пространственной локализации энергии в форме ДБ.

Научная и практическая ценность.

Доказательство возможности возбуждения ДБ в ауксетических структурах, а также установление нового механизма появления ауксетических свойств у нелинейной решетки за счет возбуждения ОБ совместно с приложением однородного растяжения представляют научный интерес. Установленный факт взаимосвязи между нелинейными колебаниями решетки и ее аномальными упругими свойствами может иметь прикладное значение, поскольку в руках инженеров появляется новый канал управления упругими свойствами материала.

Результаты диссертационного исследования **достоверны**, так как они получены с применением хорошо известных алгоритмов расчета колебательных спектров и изучения нелинейной динамики решеток, не вступают в конфликт с базовыми физическими законами, внутренне не противоречивы, идут в согласии с известными литературными данными.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Двумерные ауксетические структуры с кубической нелинейностью могут поддерживать существование ДБ.

2. Возбуждение ОБ достаточно большой амплитуды совместно с однородным растяжением двумерной решетки с кубической нелинейностью может приводить к ее трансформации в ауксетик.

3. В результате модуляционной неустойчивости некоторых ОБ возможна самопроизвольная пространственная локализация энергии в виде ДБ.

Апробация работы.

Основные результаты работы были представлены на следующих научных форумах: International Workshop "Discrete Breathers in Crystals", 21-25 сентября 2015, г. Уфа; Всероссийская молодежная научная конференция «Мавлютовские чтения», 28-30 октября 2015, УГАТУ, г.Уфа; Международная конференция Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах 24-28 августа 2015 г., г. Челябинск; Всероссийская научная конференция «Мавлютовские чтения», посвященная 90-летию

со дня рождения член-корреспондента РАН Р.Р. Мавлютова, 21-24 марта 2016, УГАТУ г.Уфа; Всероссийская конференция "Актуальные проблемы прочности" 24-27 мая 2016 г., Севастопольский государственный университет, г. Севастополь, XIV Международная школа-семинар "Эволюция дефектных структур в конденсированных средах" (ЭДС – 2016) 12 – 17 сентября 2016 года, г. Барнаул; школа - конференция стран СНГ "Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы", 3-7 октября 2016, Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа.

Личный вклад автора состоял в формулировке молекулярно-динамических моделей двумерных решеток, проведении расчетов по нахождению спектров малоамплитудных колебаний решетки и изучению нелинейной динамики решетки, обсуждению полученных результатов, в подготовке иллюстративного материала и написании статей.

Публикации. Основное содержание диссертационной работы опубликовано в 10 научных трудах, в том числе, в 5 статьях в рецензируемых журналах, включенных в перечень изданий, рекомендованных ВАК РФ, две из которых индексируются в Web of Science и Scopus.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, приложения и списка литературы из 100 наименований. Работа изложена на 118 страницах машинописного текста, содержит 37 рисунков.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Введение посвящено определению основных понятий, на которые опирается работа, обоснованию актуальности выбранной темы исследования, формулировке цели и задач диссертационной работы, описанию научной новизны полученных результатов, их практической ценности. Там же перечислены основные защищаемые положения и дано краткое содержание работы по каждой из глав.

Глава 1. Обзор литературы

Обзорная глава затрагивает этимологию основных используемых терминов, краткую историческую справку по исследованию ауксетиков, ДБ и ОБ. Далее описываются основные механизмы появления ауксетических свойств в материалах, приводятся примеры ауксетических структур, описаны их свойства и пути практического применения. Затем обсуждаются нелинейные колебания решеток различной размерности, необходимые усло-

вия их существования, способы поиска начальных условий для возбуждения долгоживущих колебаний, роль нелинейных колебательных мод в формировании физических и механических свойств решеток.

Анализ литературных данных подводит к описанию ряда открытых проблем, связанных с возможностью возбуждения ДБ и ОБ в двумерных ауксетических решетках и с влиянием нелинейной динамики решетки на ее упругие свойства. Эти проблемы затрагиваются в последующих главах диссертации.

Глава 2. Возбуждение ДБ и анализ их свойств в двумерных нелинейных решетках

На рис. 1 представлены двумерные решетки взаимодействующих частиц единичной массы, исследуемые в данной главе. Имеется три типа связей: длинные вертикальные связи 1, короткие вертикальные связи 2 и связи в направлении зигзаг 3. Все они описываются пружинами с кубической нелинейностью, потенциальная энергия которых определяется выражением

$$\varphi(r) = \frac{k}{2}(r-L)^2 + \frac{\beta}{4}(r-L)^4, \quad (2)$$

где r – текущая длина пружины, L – равновесная длина пружины, k – коэффициент линейной жесткости пружины, β – коэффициент при кубическом слагаемом (в выражении для межатомной силы $F(r) = -d\varphi/dr$).

Расчеты проводились для следующих трех наборов параметров потенциалов:

$$\begin{aligned} \text{структура I:} & \quad k_1=1, \quad k_2=1; \\ \text{структура II:} & \quad k_1=10^{-3}, \quad k_2=1; \\ \text{структура III:} & \quad k_1=1, \quad k_2=10^{-3}; \end{aligned}$$

при этом остальные параметры брались одинаковыми для всех трех структур: $L_1=2$, $L_2=L_3=1$, $\beta_1=\beta_2=\beta_3=10$. Заметим, что в структуре I линейная жесткость длинных и коротких вертикальных связей одинакова, в структуре II длинные связи намного слабее коротких, а в структуре III слабыми являются короткие связи.

Примитивная трансляционная ячейка для всех трех структур имеет форму ромба и содержит две частицы, каждая из которых имеет две степени свободы – компоненты вектора перемещения в плоскости (x,y) . Расчетная ячейка включала 32×32 примитивных ячеек. Использовались периодические граничные условия. Уравнения движения частиц (уравнения Ньютона) решались численно методом Штормера шестого порядка точности.

Исследуемые структуры анизотропны, поэтому были рассчитаны коэффициенты Пуассона при одноосном растяжении вдоль оси x (ν_{xy}) и вдоль оси y (ν_{yx}). Получены следующие результаты:

$$\begin{aligned} \text{структура I: } & \nu_{xy} = 0.003, & \nu_{yx} = 0.013; \\ \text{структура II: } & \nu_{xy} = 0.851, & \nu_{yx} = 0.858; \\ \text{структура III: } & \nu_{xy} = -0.454, & \nu_{yx} = -0.714. \end{aligned}$$

Видно, что структура I имеет коэффициенты Пуассона близкие к нулю. Структура II характеризуется большими положительными значениями коэффициентов Пуассона и высокой степенью изотропии. Структура III является ауксетиком, демонстрируя отрицательные коэффициенты Пуассона при растяжении вдоль x и вдоль y .

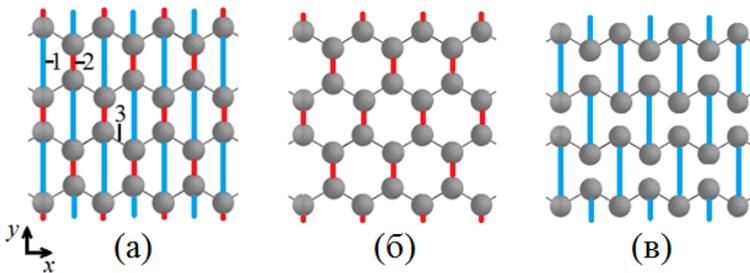


Рис. 1. (а) Двумерная гексагональная решетка взаимодействующих частиц. Имеется три типа связей: вертикальные длинные 1, вертикальные короткие 2 и связи в направлении зигзаг 3, показанные тонкими линиями. В структуре I длинные и короткие связи имеют одинаковый коэффициент линейной жесткости. (б) Случай слабых длинных вертикальных связей, структура II. (в) Случай слабых коротких вертикальных связей, структура III. Данная структура близка к той, что представлена на рис. 1(а).

На рис. 2, слева направо показаны плотности состояний малоамплитудных колебаний структур с I по III, соответственно. Хорошо видно, что спектры всех трех структур являются бесщелевыми, и это означает, что данные структуры могут поддерживать только ДБ с частотами выше спектра. Такие ДБ реализуются для межатомных взаимодействий с жестким типом нелинейности, что обеспечивается выбором положительного значения параметра β в потенциале (2). Верхняя граница спектра структуры I находится на отметке 0.356, а для структур II и III на отметке 0.276.

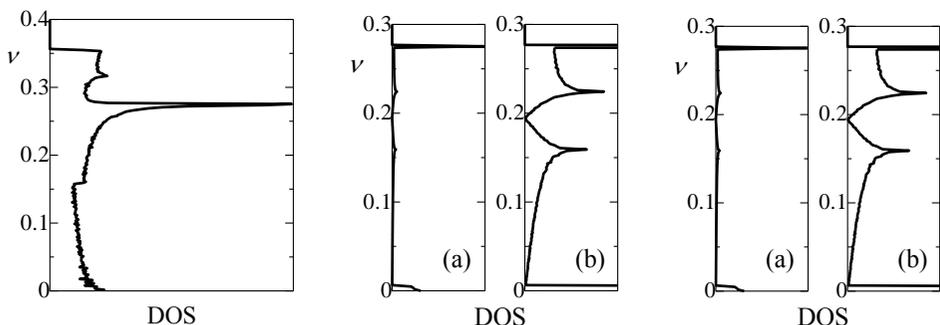


Рис. 2. Плотности состояний малоамплитудных колебаний решетки I (слева), II (в центре) и III (справа). На (а) и (б) показано одно и то же, но с выбором различных масштабов по оси абсцисс, чтобы показать детали спектров между двумя острыми пиками, расположенными вблизи нижней и верхней границ спектров.

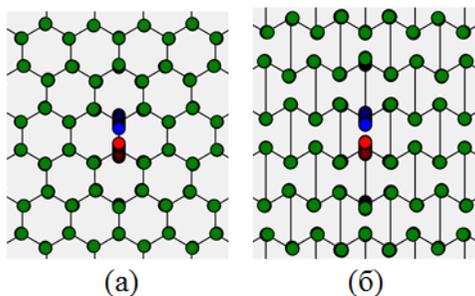


Рис. 3. Стробоскопическая картина движения атомов в окрестности ДБ в структуре (а) II и (б) III.

Во всех трех структурах удалось возбудить ДБ путем простого отклонения пары атомов, соединенных вертикальной связью, в направлении оси y в противоположные стороны. Примеры ДБ в структурах II и III показаны на рис. 3 (а) и (б), соответственно. Видно, что ДБ сильно локализованы, так что колебания с большой амплитудой совершают только два атома, двигаясь в противофазе в направлении оси y . Амплитуды колебаний других атомов малы и экспоненциально быстро убывают с удалением от центра ДБ. Более

того в структурах I и III, ДБ можно запустить как на коротких, так и на длинных вертикальных связях.

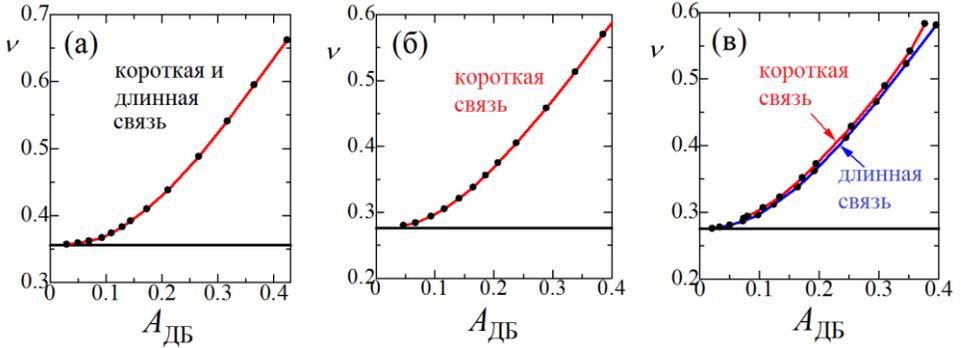


Рис. 4. Зависимости частоты от амплитуды для ДБ в структурах (а) I, (б) II и (в) III. Верхняя граница спектра показана горизонтальной линией.

На рис. 4 показаны зависимости частоты от амплитуды для всех найденных ДБ. Видно, что частота ДБ растет с амплитудой, отщепляясь от верхней границы спектра (показана горизонтальной линией).

Таким образом, показано, что в двумерной решетки с полиномиальным потенциалом взаимодействия с кубической нелинейностью, можно возбудить сильно локализованные в пространстве ДБ. Рассмотрены три варианта параметров модели, обеспечивающих практически нулевой, положительный, либо отрицательный коэффициент Пуассона (структуры I, II и III, соответственно). Несмотря на значительные различия в упругих свойствах рассмотренных структур, все они поддерживают существование дискретных бризеров одного и того же типа.

Глава 3. Влияние ОБ на упругие свойства двумерной решетки

Данная глава посвящена изучению влияния ОБ на константы упругости двумерной решетки. В данном исследовании каждый узел гексагональной решетки соединен с тремя ближайшими и с тремя третьими соседями, как показано на рис. 5(a). Взаимодействие со вторыми соседями не учитывается для упрощения модели. Масса частиц равна 1 и используются следующие параметры потенциала (2): $L=1$ для коротких и $L=2$ для длинных связей, $k=1$ для обоих типов связи. Рассматривается случай линейных связей $\beta=0$ и нелинейных связей $\beta=10$. Отметим, что неотрицательные значе-

ния параметра β означают, что связь не может быть разорвана.

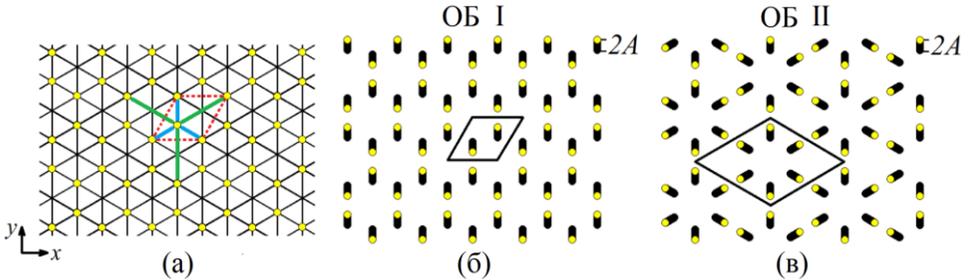


Рис. 5. (а) исследуемая в главе 3 двумерная решетка. (б,в) Две колебательные моды (ОБ), возбуждаемые в решетке. Показаны трансляционные ячейки мод и определение амплитуды мод, A .

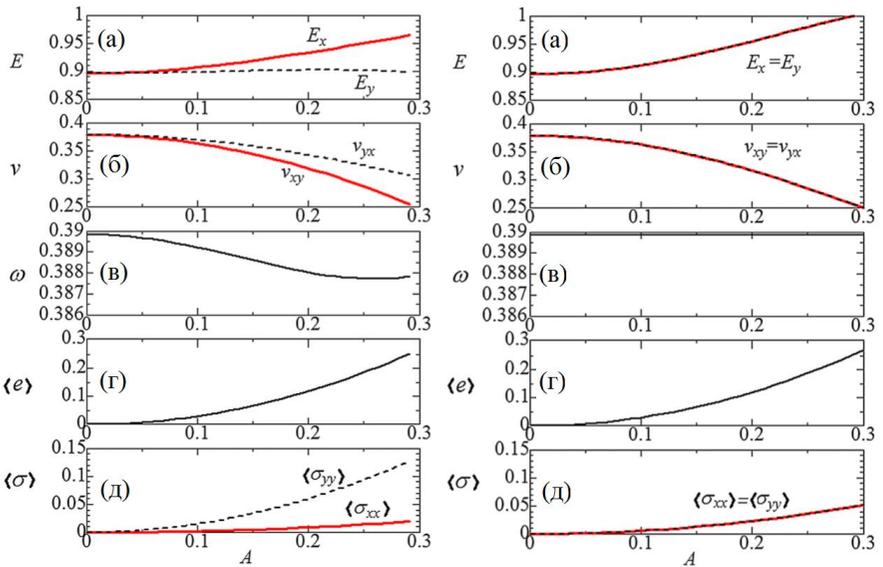


Рис. 6. Результаты для ОБ I (слева) и II (справа) в случае линейных связей, $\beta=0$. Как функции амплитуды моды A показаны: (а) модули Юнга E_x, E_y ; (б) коэффициенты Пуассона ν_{xy}, ν_{yx} ; (в) частота моды; (г) осредненная за период полная (кинетическая плюс потенциальная) энергия в расчете на частицу; (д) осредненные за период напряжения $\langle \sigma_{xx} \rangle, \langle \sigma_{yy} \rangle$ ($\sigma_{xy}=0$).

Численные эксперименты сводятся к следующему. В решетке возбуждается одна из колебательных мод, изображенных на рис. 5(б,в) и вычисляются осредненные за период колебания T компоненты тензора напряжений

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \sigma_{ij}(t) dt. \quad (3)$$

Компоненты тензора деформаций решетки не изменяются со временем, поэтому закон Гука для случая плоского напряженного состояния берем в форме

$$\begin{bmatrix} \langle \sigma_{xx} \rangle \\ \langle \sigma_{yy} \rangle \\ \langle \sigma_{xy} \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix}. \quad (4)$$

Далее придаем поочередно каждой из компонент деформации малое приращение δ при нулевых значениях двух других компонент. Таким образом, находим C_{ij} и усредняем их значения, найденные для положительных и отрицательных значений δ . Практически одинаковые результаты получались для $10^{-3} \leq \delta \leq 10^{-7}$. Для уменьшения эффекта анизотропии, наведенной вариацией деформаций, бралось $\delta=10^{-7}$. Инженерные константы упругости вычислялись следующим образом: коэффициенты Пуассона $\nu_{xy}=C_{21}/C_{22}$, $\nu_{yx}=C_{12}/C_{11}$, модули Юнга $E_x=C_{11}(1-\nu_{xy}\nu_{yx})$, $E_y=C_{22}(1-\nu_{xy}\nu_{yx})$, модуль сдвига $G_{xy}=C_{33}$.

На рис. 6 приводятся результаты для ОБ I (слева) и ОБ II (справа) в случае линейных связей, $\beta=0$. В зависимости от амплитуды моды A рассчитаны: (а) модули Юнга E_x, E_y ; (б) коэффициенты Пуассона ν_{xy}, ν_{yx} ; (в) частота моды; (г) осредненная за период полная (кинетическая плюс потенциальная) энергия в расчете на частицу; (д) осредненные за период напряжения $\langle \sigma_{xx} \rangle, \langle \sigma_{yy} \rangle$ ($\sigma_{xy}=0$). Отметим, что несмотря на линейность межчастичного взаимодействия, система проявляет нелинейные свойства за счет изменения геометрии при больших амплитудах колебательных мод.

На рис. 7 представлены те же результаты, что и на рис. 6, но для случая нелинейных связей, $\beta=10$. В данном случае эффекты нелинейности проявляются значительно ярче, что приводит к большим изменениям параметров системы с увеличением амплитуды колебательных мод.

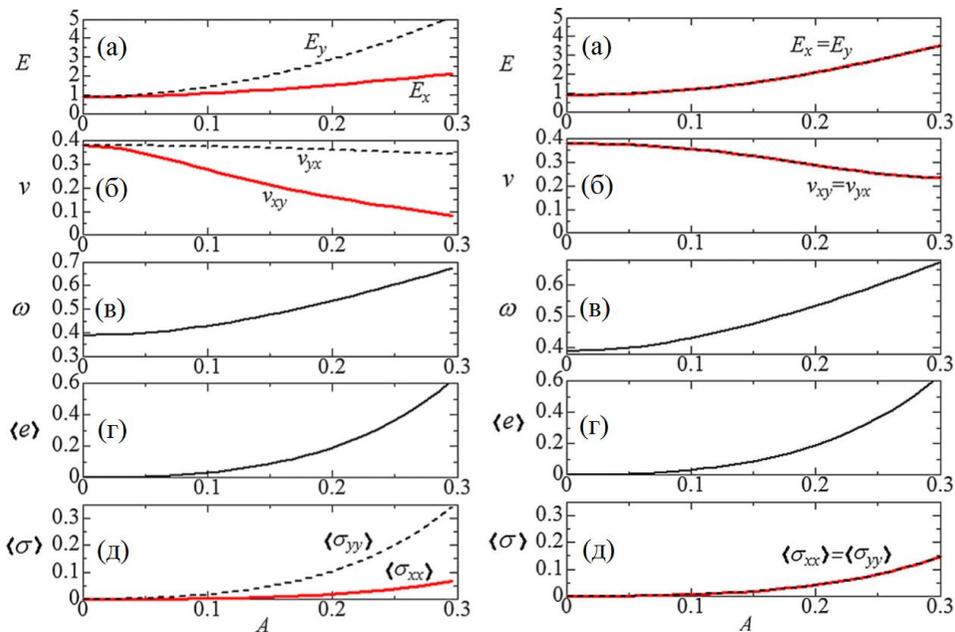


Рис. 7. То же, что и на рис. 6, но для случая нелинейных связей, $\beta=10$.

Как видно из рис. 6 и рис. 7, важное отличие между ОБ I и ОБ II состоит в том, что первая мода разрушает упругую изотропию решетки, а вторая нет. Обе моды проявляют модуляционную неустойчивость при не слишком малых амплитудах, что будет исследовано более детально в следующей главе. С ростом амплитуды мод решетка становится более жесткой, поскольку модули Юнга растут. С другой стороны, коэффициенты Пуассона падают с ростом A . Частота мод слабо зависит от амплитуды при $\beta=0$, но заметно возрастает с амплитудой при $\beta=10$. Полная энергия системы растет с амплитудой квадратично, $\langle e \rangle \sim A^2$. Отметим, что решетка с возбужденной в ней ОБ модой испытывает положительные (сжимающие) напряжения.

Войцеховским было доказано, что отрицательное гидростатическое давление достаточной величины превращает любое изотропное упругое тело в ауксетик в пределах области его термодинамической устойчивости [23]. Как отмечалось, с ростом амплитуд ОБ мод наблюдается снижение значений коэффициентов Пуассона (см. рис. 6 и рис. 7), но они не достига-

ют отрицательных значений в пределах исследованных амплитуд $A < 0,3$. Представляется интересным изучить совместный эффект влияния ОБ моды и всестороннего растяжения решетки на коэффициенты Пуассона.

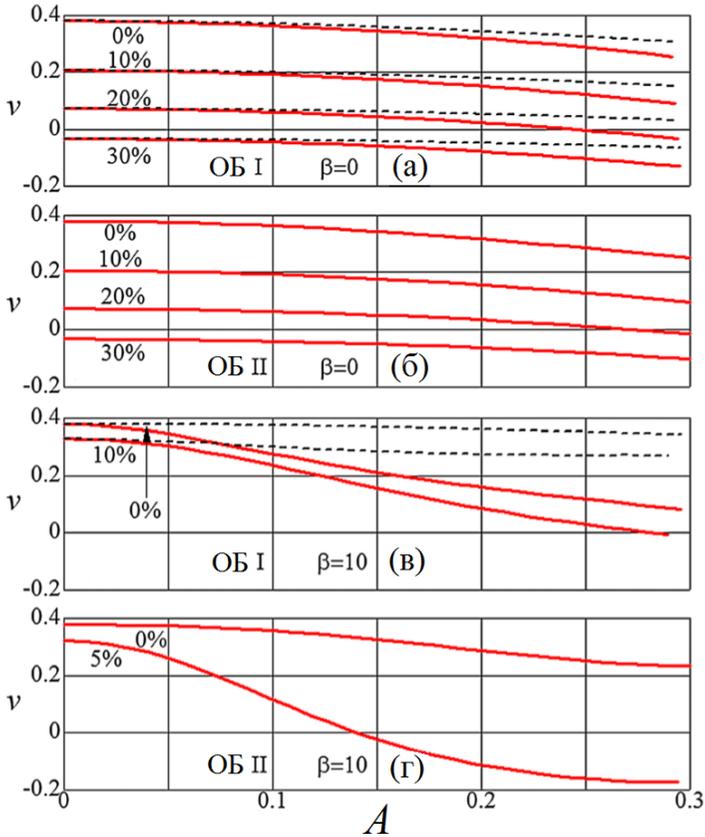


Рис. 8. Комбинированный эффект ОБ амплитуды A и равноосного растяжения решетки $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$ на коэффициенты Пуассона (величина деформации указана для каждой кривой). (а) ОБ I, $\beta=0$, (б) ОБ II, $\beta=0$, (в) ОБ I, $\beta=10$, и (г) ОБ II, $\beta=10$. На (а) и (в) сплошные (пунктирные) кривые показывают ν_{xy} (ν_{yx}). На (б) и (г) $\nu_{xy} = \nu_{yx}$.

Результаты таких вычислений приведены на рис. 8. Величина равноосной деформации растяжения $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$ указана в процентах для каждой кривой. (а) ОБ I, $\beta=0$, (б) ОБ II, $\beta=0$, (в) ОБ I, $\beta=10$, и (г) ОБ II, $\beta=10$. На (а) и (в) сплошные (пунктирные) кривые показывают ν_{xy} (ν_{yx}). На (б) и (г) изотропия решетки сохраняется и $\nu_{xy} = \nu_{yx}$. Отметим, что на всех четырех панелях рис. 8 видны отрицательные значения коэффициентов Пуассона для достаточно больших A и достаточно большой равноосной растягивающей деформации.

Можно заключить, что одновременное действие ОБ и равноосной растягивающей деформации могут превратить рассматриваемую решетку в ауксетик.

Глава 4. Модуляционная неустойчивость ОБ

В четвертой главе детально изучается модуляционная неустойчивость ОБ. Этот эффект неоднократно наблюдался в нелинейных решетках [13,24,25]. Для полноты изложения следует заметить, что помимо двух ОБ представленных на рис. 5(б,в), в гексагональной решетке существуют еще два ОБ, показанных на рис. 9 [12]. Эти ОБ также проявляют модуляционную неустойчивость при не слишком малых амплитудах, но при этом не происходит пространственной локализации энергии в виде ДБ. Поэтому далее сосредоточимся на анализе мод, показанных на рис. 5(б,в), которые при разрушении приводят к появлению ДБ.

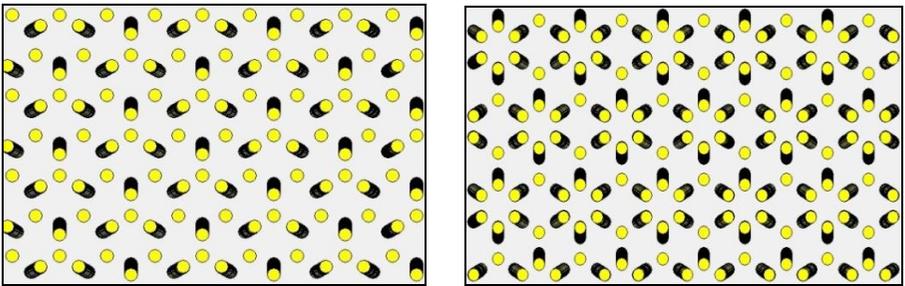


Рис. 9. Два ОБ, которые наряду с ОБ показанными на рис. 5(б,в) также проявляют модуляционную неустойчивость, но при этом не происходит пространственной локализации энергии в виде ДБ.

Для изучения временной эволюции колебательных мод I и II, показанных на рис. 5(б,в), будем следить за изменением параметра локализации,

$$l = \frac{\sum_{n=1}^N e_n^2}{\left(\sum_{n=1}^N e_n\right)^2}, \quad (5)$$

где e_n – это полная энергия одной частицы, осредненная за период колебания ОБ и суммирование ведется по всем N частицам в расчетной ячейке. Отметим, что если вся энергия была бы локализована на одной частице, то имели бы $l=1$. При равном распределении энергии по всем частицам имеем $l=1/N$, что при больших N близко к нулю.

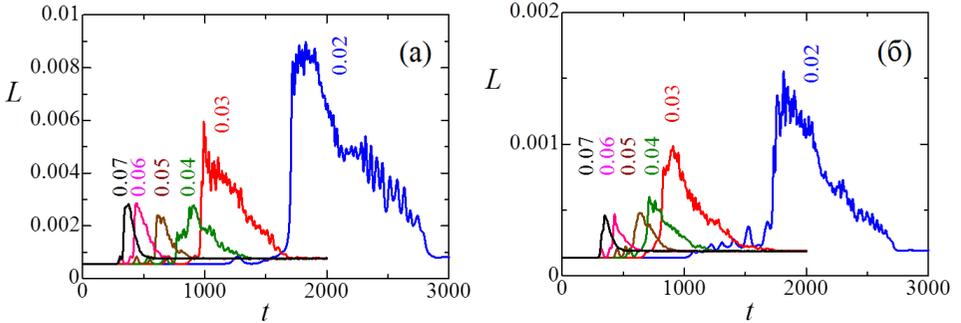


Рис. 10. Параметр локализации (5) как функция времени для ОБ I для различных амплитуд, значения которых указаны для каждой кривой. На (а) и (б) представлены результаты для расчетной ячейки, содержащей 30x30 и 60x60 примитивных трансляционных ячеек, соответственно.

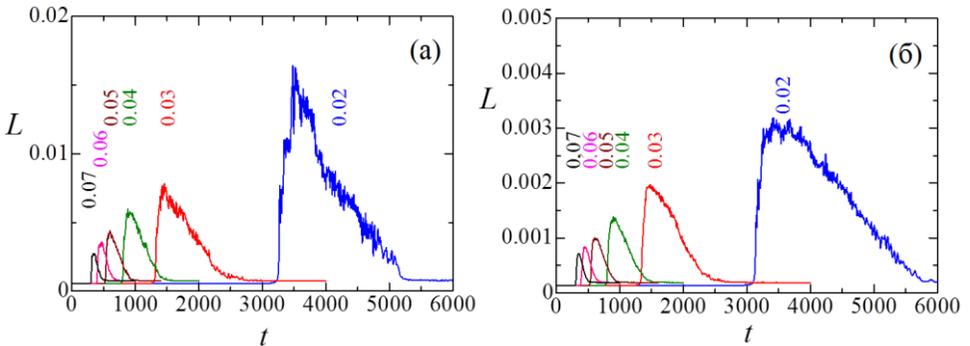


Рис. 11. То же, что и на рис. 10, но для ОБ II.

На рис. 10 и рис. 11 показана эволюция в времени параметр локализации (5) для Моды I и Моды II, соответственно. Результаты получены для различных амплитуд ОБ, как указано на вставках рисунков. Хорошо видно, что с уменьшением A увеличивается время развития модуляционной неустойчивости, когда величина l остается малой. Затем происходит резкий рост l , что свидетельствует о пространственной локализации энергии в системе. Анализ показал, что энергия локализуется на ДБ. Далее ДБ медленно излучают энергию, и параметр локализации уменьшается со временем примерно по линейному закону. В итоге система приходит к тепловому равновесию со статистически однородным распределением энергии по расчетной ячейке. С уменьшением A наблюдается рост максимального значения l , а так же рост времени жизни ДБ.

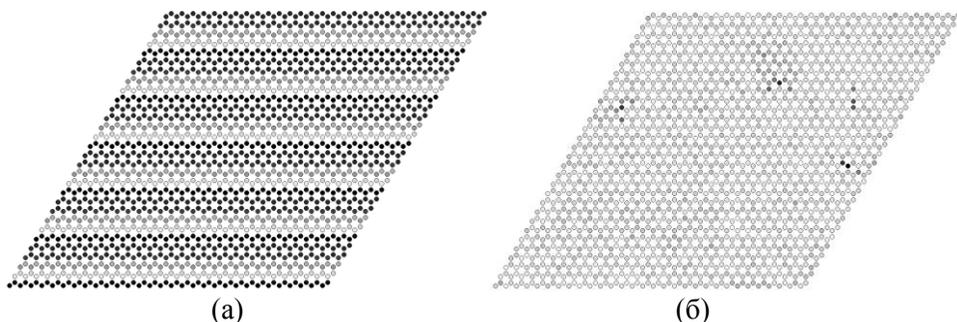


Рис. 12. (а) Развитие модуляционной неустойчивости ОБ I ($t=680$) и (б) формирование четырех ДБ ($t=1160$) для случая $A=0,03$.

На рис. 12 дан пример (а) развития модуляционной неустойчивости ОБ I ($t=680$) и (б) формирования четырех ДБ ($t=1160$) для случая $A=0,03$ и расчетной ячейки состоящей из 30×30 примитивных ячеек. Частицы окрашены в соответствии с их полной энергией, осредненной за один период колебания. Черный цвет соответствует максимальной энергии, а белый - минимальной.

Таким образом, установлено, что два из четырех ОБ, существующих в гексагональной решетке, приводят к пространственной локализации энергии в виде ДБ.

В Приложении дана методика расчета спектров малоамплитудных колебаний решеток.

Основные результаты и выводы:

1. Методами компьютерного моделирования исследованы нелинейная динамика и упругие характеристики двумерной гексагональной решетки с кубически нелинейными связями. Акцент сделан на изучении ауксетических свойств решетки.

2. В зависимости от параметров, характеризующих различные связи между частицами, можно получить решетку с положительными, близкими к нулю и отрицательными коэффициентами Пуассона.

3. Вне зависимости от значения коэффициентов Пуассона в решетках с кубической нелинейностью удалось возбудить ДБ локализованные на паре связанных атомов, колеблющихся в противофазе. Частоты ДБ растут с амплитудой, отщепляясь от верхней границы бесщелевого спектра малоамплитудных колебаний.

4. Исследовано влияние двух ОБ на упругие характеристики изотропной неауксетической решетки. Показано, что с ростом амплитуд ОБ растут модули Юнга решетки и уменьшаются коэффициенты Пуассона. Однако в пределах исследованного интервала амплитуд ОБ решетка не становится ауксетиком. Комбинированное влияние ОБ и равноосного растяжения решетки привело к появлению ауксетических свойств.

5. Детально изучен процесс модуляционной неустойчивости всех четырех ОБ гексагональной решетки. Все ОБ проявляют модуляционную неустойчивость при не слишком малых амплитудах. Два ОБ из четырех, в результате развития модуляционной неустойчивости, приводят к пространственной локализации энергии на долгоживущих ДБ.

6. Результаты данной работы свидетельствуют о том, что упругими свойствами нелинейных решеток можно управлять путем возбуждения в них высокоамплитудных колебаний. Кроме того, для таких решеток возможна пространственная локализация колебательной энергии в форме ДБ.

Цитированная литература

1. K. W. Wojciechowski, F. Scarpa, J. N. Grima, A. Alderson, Auxetics and other systems of “negative” characteristics // Phys. Status Solidi B 253, No. 7, 1241–1242 (2016).

2. Wu, L., Li, B., Zhou, J. Isotropic negative thermal expansion metamaterials, 2016 ACS Applied Materials and Interfaces 8 (27), pp. 17721-17727.

3. Attard, D., Caruana-Gauci, R., Gatt, R., Grima, J.N. Negative linear compressibility from rotating rigid units // 2016 Physica Status Solidi (B) 253 (7), pp. 1410-1418.
4. Веселаго В.Г. Электродинамика веществ с одновременно отрицательными значениями ϵ и μ // УФН. — 1967. — т. 92. — С. 517–526.
5. Goldstein R.V., Gorodtsov V.A., Lisovenko D.S. The elastic properties of hexagonal auxetics under pressure. Physica Status Solidi (b), 2016, V.253, N 7, P.1261-1269.
6. P. Wang, F. Casadei, S.H. Kang, K. Bertoldi, Locally resonant band gaps in periodic beam lattices by tuning connectivity // Phys. Rev. B 91, 020103(R) (2015).
7. M. Ruzzene, F. Scarpa, F. Soranna, Wave beaming effects in two-dimensional cellular structures // Smart Mater. Struct. 12, 363 (2003).
8. P. Kolat, B. M. Maruszewski, K. W. Wojciechowski, Solitary waves in auxetic plates // J. Non-Cryst. Solids 356, 2001 (2010).
9. A. V. Porubov, I. E. Berinskii, Non-linear plane waves in materials having hexagonal internal structure // Int. J. Nonlinear Mech. 67, 27-33 (2014).
10. A. V. Porubov, I. E. Berinskii, Two-dimensional nonlinear shear waves in materials having hexagonal lattice structure // Math. Mech. Solids 21, 94-103 (2016).
11. S. V. Dmitriev, J. Li, N. Yoshikawa, Y. Shibutani, Theoretical strength of 2D hexagonal crystals: application to bubble raft indentation // Philos. Mag. 85, 2177 (2005).
12. G.M. Chechin, D.S. Ryabov, S.A. Shcherbinin, Nonlinear vibrational modes in graphene: group-theoretical results // Letters on materials 6 (1), 2016 pp. 9-15.
13. С.В. Дмитриев, Е.А. Корзникова, Ю.А. Баимова, М.Г. Веларде, Дискретные бризеры в кристаллах // УФН. - 2016. - Vol. 186. - P. 471–488.
14. E. A. Korznikova, A. V. Savin, Y. A. Baimova, S. V. Dmitriev, R. R. Mulyukov, Discrete breather on the edge of the graphene sheet with the armchair orientation // JETP Lett. 96, 222 (2012).
15. B. Liu, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, X. Wang, H. Zhu, K. Zhou, Discrete breathers in hydrogenated graphene // J. Phys. D: Appl. Phys. 46, 305302 (2013).

16. E. A. Korznikova, J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, Effect of strain on gap discrete breathers at the edge of armchair graphene nanoribbons // Europhys. Lett. 102, 60004 (2013).

17. G. M. Chechin, S. V. Dmitriev, I. P. Lobzenko, D. S. Ryabov, Properties of discrete breathers in graphane from ab initio simulations // Phys. Rev. B 90, 045432 (2014).

18. Y. Yamayose, Y. Kinoshita, Y. Doi, A. Nakatani, T. Kitamura, Excitation of intrinsic localized modes in a graphene sheet // Europhys. Lett. 80, 40008 (2007).

19. Y. Kinoshita, Y. Yamayose, Y. Doi, A. Nakatani, T. Kitamura, Selective excitations of intrinsic localized modes of atomic scales in carbon nanotubes // Phys. Rev. B 77, 024307 (2008).

20. T. Shimada, D. Shirasaki, T. Kitamura, Stone-Wales transformations triggered by intrinsic localized modes in carbon nanotubes // Phys. Rev. B 81, 035401 (2010).

21. T. Shimada, D. Shirasaki, Y. Kinoshita, Y. Doi, A. Nakatani, T. Kitamura, Influence of nonlinear atomic interaction on excitation of intrinsic localized modes in carbon nanotubes // Physica D 239, 407 (2010).

22. Y. Doi and A. Nakatani, Structure and stability of nonlinear vibration mode in graphene sheet // Procedia Eng. 10, 3393 (2011).

23. K. W. Wojciechowski, Negative Poisson ratios at negative pressures // Mol. Phys. Rep. 10, 129 (1995).

24. V. M. Burlakov, S. A. Kiselev, and V. I. Rupasov, Localized vibrations of homogeneous anharmonic chains // Phys. Lett. A 147, 130 (1990).

25. Yu.S. Kivshar, M. Peyrard, Modulational instabilities in discrete lattices // Phys. Rev. A 46, 3198 (1992).

Список публикаций автора по теме диссертации

Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК РФ:

1. Корзникова, Е.А. Молекулярно-динамическое изучение дискретных бризеров с жестким типом нелинейности в моноатомной двумерной решетке с морзевским взаимодействием / Е.А. Корзникова, Д.И. Бокий, С.Ю. Фомин, Дмитриев С.В. // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.*– 2015.– Т. 12. № 3.– С. 311-315.
2. Мурзаев, Р.Т. Свойства неподвижных дискретных бризеров в альфа-урани / Р.Т. Мурзаев, Е.А. Корзникова, Д.И. Бокий, С.Ю. Фомин, С.В.

- Дмитриев // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2015. Т. 12. № 3. – С. 324-329.
3. Dmitriev, S. V. Auxeticity from nonlinear vibrational modes / S. V. Dmitriev, E. A. Korznikova, D. I. Bokij, and K. Zhou // *Physica Status Solidi B*. -2016. - V. 253.- I. 7. - P.1310–1317.
 4. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2016610362, Программа для исследования нелинейных локализованных колебаний в ауксетических материалах. Авторы: Корзникова Е.А., Бокий Д.И., Дмитриев С.В., Фомин С.Ю.–2016.
 5. Кистанов, А.А. Почему существуют дискретные бризеры в двумерных и трехмерных монокристаллах Морзе? / А.А. Кистанов, Е.А. Корзникова, К.С. Сергеев, Д.А. Шепелев, А.Р. Давлетшин, Д.И. Бокий, С.В. Дмитриев // *Письма о материалах*.- 2016.- Т. 6.- № 3.- С. 221-226.

Прочие публикации.

1. Discrete breathers in alpha uranium / Murzaev R.T., Korznikova E.A., Bokiy D.I., Dmitriev S.V. / *Discrete Breathers in Crystals International workshop*, г. Уфа.– 2015.– С. 50-51.
2. Возможность существования дискретных бризеров в кристаллах с отрицательным коэффициентом Пуассона. /Фомин С.Ю., Корзникова Е.А., Бокий Д.И. //Тез. Докл. Всероссийской конференции "Мавлютовские чтения", г.Уфа.–2016.–Т.7.– С.144-149.
3. Дискретные бризеры в двумерной решетке с кубической нелинейностью./Д.И. Бокий, С.Ю. Фомин, Е.А. Корзникова.// Тез. докл. IX Всероссийской молодежной научной конференции «Мавлютовские чтения», г.Уфа.–2015.–Т.3–С.177-178.
4. Исследование дискретных бризеров в уране / Мурзаев Р.Т., Корзникова Е.А., Бокий Д.И., Дмитриев С.В./ *Сборник тезисов международной конференции " Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах"* г. Челябинск.– 2015. С. 137.
5. Структура, свойства и роль дискретных бризеров в металлах./Корзникова Е.А., Фомин С.Ю., Бокий Д.И., Дмитриев С.В.// Тез. докл. открытой школы-конференции стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы», г. Уфа.–2016.–С.78.

Бокий Дмитрий Игоревич

**НЕЛИНЕЙНЫЕ КОЛЕБАНИЯ И АУКСЕТИЧЕСКИЕ
СВОЙСТВА ДВУМЕРНОЙ РЕШЕТКИ**

Специальность: 01.04.07 — физика конденсированного состояния

АВТОРФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Подписано в печать 26.10.16 г. Формат 60x84_{1/16}
Печать оперативная. Усл. п. л. 1,2.
Тираж 100 экз. Заказ 2015-21

Отпечатано в типографии АлтГТУ,
656038, г. Барнаул, проспект Ленина, 46