

На правах рукописи

Батанова Анастасия Александровна

РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ, АЛГОРИТМОВ
И ПРОГРАММ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СВОЙСТВ УПРУГОСТИ
ЭЛЕКТРИЧЕСКИ СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ КОЛЛОИДНЫХ
КРИСТАЛЛОВ С ИЗОТРОПНЫМ НАЧАЛЬНЫМ НАПРЯЖЕНИЕМ

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

Автореферат диссертации
на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Ульяновск

2020

Работа выполнена на кафедре «Прикладная математика и информатика» в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Ульяновский государственный технический университет»

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук, доцент
Дышловенко Павел Евгеньевич

Официальные оппоненты: **Карчевский Михаил Миронович**, доктор физико-математических наук, профессор, ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», кафедра вычислительной математики, профессор кафедры

Мартынов Сергей Иванович, доктор физико-математических наук, профессор, БУ ВО «Сургутский государственный университет», научно-образовательный центр политехнического института, главный научный сотрудник

Ведущая организация: ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва»

Защита состоится 01 апреля 2020 г. в 10:00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.278.02 при ФГБОУ ВО «Ульяновский государственный университет», расположенном по адресу: г. Ульяновск, ул. Набережная р. Свияги, 106, корп. 1, ауд. 703.

С диссертацией и авторефератом можно ознакомиться в научной библиотеке Ульяновского государственного университета и на сайте ВУЗа — <https://www.ulsu.ru>, с авторефератом — на сайте Высшей аттестационной комиссии при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации — <https://vak.minobrnauki.gov.ru>.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью организации, просим направлять по адресу: 432970, г. Ульяновск, ул. Л. Толстого, д. 42, УлГУ, Отдел подготовки кадров высшей квалификации.

Автореферат разослан «_____» _____ 2020 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета

Волков М.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность исследования

Широкое распространение коллоидных систем в различных областях производства и технологий делает актуальной задачу их компьютерного моделирования. Моделирование коллоидных систем традиционными методами Монте-Карло и молекулярной динамики требует задания тех или иных межатомных или эффективных потенциалов. Часто эффективные потенциалы задаются как парные потенциалы взаимодействия частиц между собой. Наиболее известным из таких потенциалов является потенциал Дерягина-Ландау-Фервея-Овербека (ДЛФО). Хотя такие потенциалы успешно применяются для решения многих задач, в литературе имеются свидетельства того, что парных потенциалов в ряде случаев недостаточно¹²³. Одним из способов преодоления этого недостатка является подход к описанию коллоидных систем, не опирающийся на априори заданные потенциалы взаимодействия. Среди таких подходов важное место занимает описание систем на основе нелинейного дифференциального уравнения Пуассона — Больцмана. Это уравнение описывает электрический потенциал в коллоидной системе в рамках теории среднего поля и опирается на небольшое число хорошо определенных допущений и приближений. Однако достаточно точные численные решения уравнения Пуассона — Больцмана до сих пор удается получить только в небольшом числе специальных случаев. Поэтому актуальной является задача разработки методов моделирования на основе уравнения Пуассона — Больцмана для систем с достаточно сложной геометрией и разнообразием электрических свойств частиц.

Важным классом коллоидных систем являются коллоидные кристаллы. Выделение их в отдельную группу обусловлено наличием пространственной упорядоченности частиц. Регулярная структура коллоидных кристаллов является основанием для создания на их основе фотонных кристаллов⁴⁵. В настоящее время интерес к коллоидным кристаллам возрастает в связи с исследованием процессов самоорганизации и самосборки упорядоченных структур⁶⁷⁸⁹.

¹ Brunner, M. Direct Measurement of Three-Body Interactions amongst Charged Colloids / M. Brunner, J. Dobnikar, H.-H. von Grünberg // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 92 (7). — 078301.

² Dobnikar, J. Three-body interactions in colloidal systems / J. Dobnikar, M. Brunner, H.H. von Grünberg // *Phys. Rev.* — 2004. — Vol. 69. — 031402.

³ Russ, C. Three-body forces between charged colloidal particles / C. Russ, H.H. von Grünberg // *Phys. Rev.* — 2002. — Vol. 66. — 011402.

⁴ Горелик, В.С. Комбинационное рассеяние света в нанокompозитных фотонных кристаллах / В.С. Горелик, D. Bi, G.T. Fei, S.H. Xu, X.D. Gao // *Неорганические материалы.* — 2019. — Т.55, №4. — С. 385-394.

⁵ Мазинг, Д.С. Синтез и характеристика коллоидных нанокристаллов тройных халькогенидных соединений / Д.С. Мазинг, А.И. Шульга, Л.Б. Матюшкин, О.А. Александрова, В.А. Мошников // *Оптика и спектроскопия.* — 2017. — Т.122, №1. — С. 122–125.

⁶ Frenkel, D. Plenty of room at the top / D. Frenkel // *Nature.* — 2006. — Vol. 5. — P. 85 – 86.

⁷ Leunissen, M.E. Ionic colloidal crystals of oppositely charged particles / M.E. Leunissen et al // *Nature.* — 2005. — Vol. 437 (7056). — P. 235 – 240.

⁸ Shevchenko, E.V. Structural diversity in binary nanoparticle superlattices / E.V. Shevchenko, D.V. Talapin, N.A. Kotov, S. O'Brien, C.B. Murray // *Nature.* — 2006. — Vol. 439 (7072). — P. 55 – 59.

Электрическое взаимодействие играет в этих процессах важную роль. Поэтому актуальной является разработка методов и средств математического моделирования электростатических взаимодействий в подобных упорядоченных системах, что позволит предсказывать образование тех или иных структур, их механические и электрические свойства, а также даст возможность более глубокого понимания механизмов самосборки.

Коллоидные кристаллы, рассматриваемые в данной работе, представляют собой систему одинаково заряженных частиц твердой фазы, погруженных в жидкий электролит. Стабильность по отношению к агрегированию обеспечивается взаимодействием двойных слоев, а устойчивость кристаллической фазы — внешним давлением. Одним из подходов при моделировании рассматриваемых коллоидных кристаллов является использование методов теории упругости сплошных сред, в терминах которой такие системы являются средами с начальным напряжением. Некоторые аспекты моделирования коллоидных кристаллов с начальным напряжением рассматривались ранее Дышловенко П.Е.¹⁰, Александровым Ю.В.¹¹, Гладковой Е.В. и др.¹², Чернятьевым Д.В. и др.¹³. Существенным при моделировании коллоидных кристаллов является учет анизотропии их свойств, чему в литературе до сих пор не уделялось достаточного внимания. В то же время особый интерес представляют кристаллы, которые, в силу высокой симметрии, обладают изотропным напряжением (давлением) в исходной равновесной конфигурации. Такие кристаллы как отдельный класс систем ранее систематически не рассматривались.

Ранее в работе¹¹ упругие постоянные вычислялись по данным вычислительного эксперимента о силовых постоянных. Рассмотрение ограничивалось только двумерными системами. Такой подход требует рассмотрения системы с большим числом частиц. Кроме того, точный расчет упругих постоянных требует знания силовых постоянных всех порядков, тогда как определение силовых постоянных порядка выше второго в вычислительном эксперименте оказывается затруднительным. В противоположность этому в данной диссертационной работе предлагается метод прямого определения упругих постоянных по зависимостям напряжения от деформации или энергии от деформации. При этом в силу

⁹ Лебедев-Степанов П. В. Введение в самоорганизацию и самосборку ансамблей наночастиц. — Москва: Москва, 2015. — 304 с.

¹⁰ Dyshlovenko, P.E. Osmotic stress tensor in charge stabilized colloidal crystals / P.E. Dyshlovenko // Colloid Journal. — 2010. — Vol. 72 (5). — P. 627-632.

¹¹ Александров, Ю.В. Моделирование упругих свойств двумерных электрически стабилизированных коллоидных кристаллов: дис. ...канд. физ.-мат. наук: 05.13.18 / Ю.В. Александров. — Ульяновск, 2012. — 138 с.

¹² Гладкова, Е.В. Упругие свойства электрически стабилизированного коллоидного кристалла с гексагональной решёткой / Е.В. Гладкова, П.Е. Дышловенко // Вестник Челябинского государственного университета, 24-28 авг. 2015 г., г. Челябинск. — Челябинск, ЧелГУ, 2015. — № 22 (377). — С. 110-115.

¹³ Чернятьев, Д.В. Осмотическое напряжение в трехмерном коллоидном кристалле в модели уравнения Пуассона — Больцмана / Д.В. Чернятьев, П.Е. Дышловенко // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. — Самара, 2013. — Т. 15, № 4 (4). — С. 940-943.

пространственной периодичности достаточно рассматривать только одну элементарную ячейку кристалла.

Все вышесказанное обосновывает актуальность темы диссертационного исследования.

Объектом исследования являются упругие свойства коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением.

Предметом исследования выступают математические модели, численные методы и алгоритмы, позволяющие проводить вычислительные эксперименты с целью изучения свойств упругости коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением.

Цели и задачи

Целью диссертационной работы является разработка и развитие математических моделей и методов моделирования процесса деформации и определения деформационных зависимостей напряжения и энергии коллоидных кристаллов, а также постановка и проведение на этой основе вычислительного эксперимента по комплексному исследованию упругих свойств коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

1. Разработка математических моделей механических и электрических свойств коллоидных кристаллов в состоянии произвольной однородной деформации.

2. Анализ моделей и исследование их свойств симметрии. Выделение группы кристаллов с изотропным начальным напряжением.

3. Разработка метода математического моделирования деформации модельных коллоидных кристаллов и определения их упругих постоянных по зависимостям напряжения и энергии от деформации.

4. Разработка численных методов и алгоритмов и их реализация в виде комплекса программ для проведения вычислительных экспериментов по определению упругих постоянных коллоидных кристаллов.

5. Проведение комплексного исследования упругих свойств модельных коллоидных кристаллов при различных геометрических и электрических параметрах моделей средствами вычислительного эксперимента.

Научная новизна

Основные представленные в диссертационной работе результаты являются новыми. В частности, предложены новые математические модели коллоидных кристаллов с постоянным потенциалом и постоянной плотностью заряда частиц. Модели строятся на основе уравнения Пуассона — Больцмана и не используют априори заданные эффективные потенциалы. Предложен новый метод математического моделирования деформационных зависимостей напряжения и энергии коллоидных кристаллов, позволяющий определять их упругие

постоянные средствами прямого вычислительного эксперимента. По точности и вычислительной эффективности предложенный метод обладает преимуществом по сравнению с известным методом вычисления упругих постоянных на основе силовых. Выделена группа модельных кристаллов с изотропным начальным напряжением и предложен новый общий для них алгоритм определения упругих постоянных. Разработаны новый численный метод и алгоритмы, реализованные в виде комплекса программ, для проведения вычислительного эксперимента по определению упругих постоянных этих кристаллов. Выполнено комплексное исследование ранее не рассматривавшихся типов коллоидных кристаллов, получены новые данные об их упругих свойствах, устойчивости и наличии многочастичных эффективных взаимодействий.

Теоретическая и практическая значимость работы

Теоретическая значимость работы состоит в разработке методов и средств математического моделирования упругих свойств электрически стабилизированных коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением, а также в выявлении новых закономерностей их упругого поведения.

Практическая значимость работы заключается в возможности использовать ее результаты при разработке новых материалов и технологических процессов с участием коллоидных кристаллов, для предсказания возможности образования и свойств упорядоченных коллоидных структур, управляемых внешним давлением, а также в дальнейшей разработке средств их моделирования.

Методология и методы исследования

Построение моделей и разработка метода моделирования коллоидных кристаллов основаны на допущении, что свойства моделируемых систем полностью описываются нелинейным дифференциальным уравнением Пуассона — Больцмана. Деформация кристалла представлена как последовательность статических состояний, каждое из которых описывается соответствующей краевой задачей. Решение краевых задач осуществлялось хорошо апробированным методом конечных элементов, дополненным учетом периодических граничных условий для потенциала и его градиента, а также унифицированным способом генерации последовательности геометрических областей. При исследовании упругих свойств использовались методы теории упругости сред с начальным напряжением, при этом механическое напряжение в коллоидной системе изначально описывалось тензором (а не скаляром), что позволило учесть анизотропию, в общем случае, упругих свойств кристалла. Программы, входящие в состав программного комплекса, написаны на языках высокого уровня Python 3, C++, Fortran 90, MATLAB.

Положения, выносимые на защиту

1. Математические модели кристаллов в состоянии произвольной однородной деформации, свободные от использования априори заданных эффективных потенциалов.

2. Доказательство изотропии начального напряжения модельных кубических кристаллов и кристаллов с квадратной и гексагональной решеткой, а также достаточные условия для определения их упругих постоянных первого и второго порядков.

3. Метод математического моделирования деформационных зависимостей напряжения и энергии коллоидных кристаллов, позволяющий определять их упругие постоянные средствами прямого вычислительного эксперимента.

4. Численный метод и алгоритмы, реализованные в виде комплекса программ, позволяющие осуществлять вычислительный эксперимент по определению упругих постоянных первого и второго порядков кристаллов с изотропным начальным напряжением при различных значениях параметров модели.

5. Результаты комплексного исследования коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением, полученные средствами вычислительного эксперимента, включающие в себя зависимости упругих постоянных от плотности системы, данные о механической устойчивости систем по отношению к деформациям различных видов и о вкладе многочастичных взаимодействий.

Степень достоверности результатов

Достоверность положений диссертации обеспечивается корректным применением математического аппарата и численных методов, использованием современных и актуальных методов при построении алгоритмов, сравнением результатов с результатами, полученными альтернативными методами, а также использованием при разработке программного комплекса апробированных библиотек программного обеспечения.

Апробация работы

Результаты проведенных работ докладывались на следующих конференциях:

- Международная конференция « International Conference on Computer Simulations in Physics and beyond» (Москва, 6-10 сентября 2015 г.);
- Международная конференция « International Conference on Computer Simulations in Physics and beyond» (Москва, 9-12 октября 2017 г.);
- III международная конференция «Информационные технологии и нанотехнологии» (Самара, 25-27 апреля 2017 г.);
- IV международная конференция «Информационные технологии и нанотехнологии» (Самара, 24-27 апреля 2018 г.);

- Международной конференции, посвященной 80-летию члена-корреспондента РАН И. К. Камилова (Челябинск, 24-28 августа 2015 г.);
- 49-я, 50-я, 51-я, 52-я научно-техническая конференция УлГТУ «Вузовская наука в современных условиях» (Ульяновск, УлГТУ, 26-31 января 2015 г., 25-30 января 2016 г., 23-28 января 2017 г., 29 января-3 февраля 2018 г.).
- 22-я Всероссийская молодежная научная школа-семинар «Актуальные проблемы физической и функциональной электроники» (Ульяновск, 22-24 октября 2019 г.).

Получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ «Определение упругих постоянных кубических коллоидных кристаллов по зависимостям напряжения от деформации (elcon)», №2018664359, М.: РОСПАТЕНТ, 15.11.2018.

Личный вклад автора

Все основные результаты диссертационного исследования получены соискателем самостоятельно. При этом разработка метода математического моделирования процесса однородной деформации осуществлялась совместно с научным руководителем П.Е. Дышловенко.

Постановка и проведение вычислительных экспериментов выполнены соискателем также самостоятельно. Анализ результатов осуществлялся совместно с научным руководителем П.Е. Дышловенко.

Структура диссертации.

Работа состоит из введения, пяти глав (каждая из которых завершается выводами), заключения, списка литературы из 131 наименования источников (расположенных в алфавитном порядке по первому автору в ссылке), а также трех приложений. Общий объем диссертационной работы составляет 131 страницу, в том числе 126 страниц основного текста (включая 15 страниц списка литературы) и 5 страниц приложений. Диссертация содержит 39 рисунков.

Публикации по теме исследования

По теме исследования опубликованы 16 печатных работ, в том числе 5 статей в изданиях, входящих в перечень ВАК РФ (3 из них индексируются в Web of Science и Scopus, 1 — в Scopus), 10 в других изданиях, в том числе в сборниках и материалах международных и всероссийских научно-технических конференций, а также получено свидетельство о регистрации программы для ЭВМ.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** автором проводится обоснование актуальности проблемы, сформулированы цели и задачи, научная новизна, положения, выносимые на защиту; обозначены теоретическая и практическая значимость работы, внедрение результатов,

методология и методы исследования, степень достоверности результатов; приведены сведения об апробация работы и личном вкладе автора.

В **главе 1** рассмотрены теоретические подходы к моделированию электрически стабилизированных коллоидных кристаллов. В **разделе 1.1** содержится обзор существующих методов моделирования коллоидных систем с обоснованием выбор метода моделирования на основе уравнения Пуассона — Больцмана. Далее в разделе сформулированы модельные предположения и постановка задачи.

Коллоидные кристаллы, рассматриваемые в данной работе, представляют собой систему частиц твердой фазы, погруженных в жидкий бинарный симметричный одновалентный электролит. Диэлектрическая проницаемость электролита существенно превышает диэлектрическую проницаемость материала частиц. Все частицы в системе — идентичные твердые диэлектрические шары. Тепловое движение частиц пренебрежимо мало. В силу трансляционной симметрии кристалла достаточно рассмотреть только одну элементарную ячейку. При отсутствии деформации в качестве элементарной ячейки выбирается ячейка Вигнера — Зейтца.

Электрический потенциал φ в области электролита описывается нелинейным дифференциальным уравнением Пуассона — Больцмана

$$\Delta\varphi = \frac{q_e n_0}{\varepsilon_0 \varepsilon} \left[\exp\left(\frac{q_e \varphi}{k_B T}\right) - \exp\left(-\frac{q_e \varphi}{k_B T}\right) \right], \quad (1)$$

где ε — относительная диэлектрическая проницаемость среды, ε_0 — электрическая постоянная, q_e — элементарный заряд, n_0 — равновесная концентрация каждой из обеих компонент электролита, k_B — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура.

Для приведения уравнения к безразмерному виду электрический потенциал выражается в единицах $k_B T / q_e$, а координаты — в длинах Дебая $l_D = \kappa^{-1}$, где $\kappa = (2q_e^2 n_0 / \varepsilon_0 \varepsilon k_B T)^{1/2}$. Тогда уравнение (1) приводится к виду

$$\Delta\varphi = \text{sh } \varphi. \quad (2)$$

Раздел 1.2 посвящен обзору имеющихся литературных данных о математическом моделировании упругих в коллоидных системах и структурах. Отмечено использование ячеечных моделей для моделирования как упорядоченных (кристаллы), так и неупорядоченных систем.

Раздел 1.3 содержит краткие выводы по главе 1.

В **главе 2** предложен метод определения упругих постоянных электрически стабилизированных коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением.

В разделе 2.1 приводится описание математических моделей.

В исходной конфигурации плотность кристалла характеризуется параметром решетки a . Частицы имеют радиус R . Рассматриваются два типа поведения заряда на поверхности частицы: модели с постоянным потенциалом φ_0 и с постоянной поверхностной плотностью заряда σ_0 . Этим определяются граничные условия на поверхности S частицы, соответственно, граничное условие Дирихле

$$\varphi = \varphi_0 \text{ на } S, \quad (3)$$

и неоднородное граничное условие Неймана

$$\nabla \varphi \cdot \mathbf{n} = \sigma_0 \text{ на } S, \quad (4)$$

где \mathbf{n} — вектор единичной нормали, направленный внутрь частицы.

Областью задачи в исходной равновесной конфигурации является ячейка Вигнера — Зейтца кристалла, а в произвольной деформированной конфигурации — соответствующим образом деформированная область исходной задачи. Внешняя граница области в произвольной конфигурации, как исходной, так и деформированной, представляет собой объединение M пар противоположащих граней $S^{(m)}$ и $S'^{(m)}$, разделенных векторами примитивных трансляций $\mathbf{r}^{(m)}$, $m = 1, \dots, M$. Векторы $\mathbf{r}^{(m)}$ направлены от $S^{(m)}$ к $S'^{(m)}$. Пример области задачи представлен на рисунке 1.

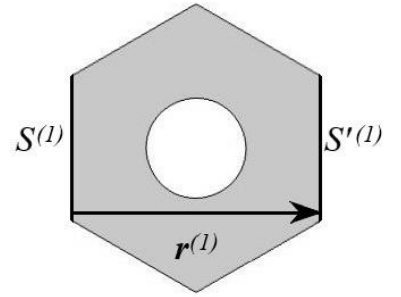


Рисунок 1 — Исходная область для кристалла с гексагональной решеткой

На внешней границе для обеспечения пространственной периодичности требуется выполнение периодических граничных условий для потенциала

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r} + \mathbf{r}^{(m)}), \quad m = 1, \dots, M, \quad (5)$$

и нормальной компоненты градиента потенциала

$$\nabla \varphi(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{n}^{(m)} = -\nabla \varphi(\mathbf{r} + \mathbf{r}^{(m)}) \cdot \mathbf{n}^{(m)}, \quad m = 1, \dots, M, \quad (6)$$

где $\mathbf{n}^{(m)}$ и $\mathbf{n}^{(m)}$, $m = 1, \dots, M$, — внешние единичные нормали в m -ой паре граней.

Краевая задача (2), (3), (5), (6) и краевая задача (2), (4), (5), (6) вместе с заданной геометрической областью представляют собой математические модели 1 и 2 соответственно для систем с постоянным потенциалом и с постоянной поверхностной плотностью заряда. Сформулировано следующее предложение.

Предложение 1. Математические модели 1 и 2 описывают состояние произвольной однородной деформации коллоидных кристаллов в рамках сделанных предположений, при этом не требуется использование априори заданных эффективных потенциалов.

Решение φ краевой задачи для уравнения Пуассона — Больцмана позволяет вычислить тензор механического напряжения и энергию в конкретной конфигурации. Тензор напряжения Максвелла Π_{ij} , ассоциированный с дифференциальным уравнением Пуассона — Больцмана, представляет собой обычный тензор напряжения Максвелла, дополненный членом, ответственным за избыточное, по отношению к объемному, осмотическое давление ионов. Для бинарного симметричного одновалентного электролита в безразмерной форме он имеет вид:

$$\Pi = \nabla\varphi \otimes \nabla\varphi - \left(\frac{1}{2}|\nabla\varphi|^2 + \text{ch}\varphi - 1\right)I, \quad (7)$$

где φ — распределение потенциала в системе, I — единичный тензор.

Тензор механического напряжения T_{ij} для кристалла определяется с помощью тензора напряжений Максвелла Π_{ij} . В безразмерной форме он имеет вид:

$$T_{ik} = \frac{1}{V_c} \sum_{m=1}^M r_k^{(m)} \int_{S^{(m)}} \Pi_{ij} ds_j, \quad (8)$$

где V_c — объем элементарной ячейки, Π_{ij} — компоненты тензора Максвелла (7), величины $S^{(m)}$, $S^{(m)}$ и $\mathbf{r}^{(m)}$, $m = 1, \dots, M$, определены выше. Интегрирование в (8) осуществляется только по одной из каждой пары противоположащих граней, по $S^{(m)}$. Ориентация $S^{(m)}$ определяется направлением их внешних нормалей. В (8) подразумевается суммирование по повторяющимся индексам.

Вычисление энергии зависит от граничных условий. Для модели с постоянным потенциалом энергия в безразмерной форме записывается следующим образом:

$$E = \int_V \left(\frac{1}{2} \varphi \text{sh}\varphi - \text{ch}\varphi + 1 \right) dV + \frac{1}{2} \int_{S_{part}} \frac{\partial\varphi}{\partial n} \varphi dS. \quad (9)$$

Здесь интегрирование в первом слагаемом в правой части осуществляется по объему ячейки, а во втором — по поверхности частицы.

В данной работе исследуются коллоидные кристаллы с изотропным начальным напряжением. В **разделе 2.2** приведено доказательство изотропии начального напряжения для модельных коллоидных кристаллов с простой кубической, объемноцентрированной кубической, гранецентрированной кубической, квадратной и гексагональной кристаллическими решетками. В результате сформулировано следующее предложение.

Предложение 2. Модельные кубические кристаллы, а также двумерные кристаллы с квадратной и гексагональной решетками, являются кристаллами с изотропным начальным напряжением.

Раздел 2.3 посвящен описанию метода определения упругих постоянных первого и второго порядков кристаллов с изотропным начальным напряжением. В **пунктах 2.3.1-2.3.2**

отмечено, что для таких кристаллов имеется два типа упругих постоянных, обозначаемых в данной работе символами C и B . В силу высокой симметрии для рассматриваемых кристаллов с изотропным начальным напряжением имеется одна упругая постоянная первого порядка: C_{11} либо B_{11} , и три независимых упругих постоянных второго порядка: C_{1111} , C_{1122} , C_{1212} , либо B_{1111} , B_{1122} , B_{1212} . Описана взаимосвязь упругих постоянных двух типов. **Пункт 2.3.3** посвящен описанию алгоритма определения упругих постоянных первого и второго порядков типа B по зависимостям напряжения от деформации. Зависимость компонент тензора напряжения T_{ij} от компонент тензора инфинитезимальных деформаций ε_{ij} для кристаллов с изотропным начальным напряжением имеет вид:

$$T_{ij} = B_{11}\delta_{ij} + B_{ijkl}\varepsilon_{kl} + \dots, \quad (10)$$

где δ_{ij} — дельта-символ Кронекера, а многоточием обозначены члены степеней выше первой по компонентам ε_{ij} .

Из (10) следует, что при однородной деформации растяжения вдоль оси x

$$T_{11} = B_{11} + B_{1111}\varepsilon + \dots, \quad (11)$$

$$T_{22} = B_{11} + B_{1122}\varepsilon + \dots, \quad (12)$$

где $\varepsilon = \varepsilon_{11}$, а при деформации сдвига в плоскости xy

$$T_{12} = 2B_{1212}\varepsilon + \dots. \quad (13)$$

где $\varepsilon = \varepsilon_{12} = \varepsilon_{21}$.

Три зависимости (11), (12), (13), содержащие только один параметр деформации ε , подлежат определению в ходе вычислительного эксперимента. Полиномиальная аппроксимация полученных зависимостей позволяет вычислить все искомые упругие постоянные. Сформулировано следующее предложение.

Предложение 3. Для нахождения упругих постоянных первого и второго порядка исследуемых коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением по зависимостям напряжения от деформации достаточно трех зависимостей (11), (12), (13), определяемых в двух вычислительных экспериментах по растяжению и сдвигу.

На основании Предложения 3 предлагается следующий общий алгоритм нахождения упругих постоянных.

1. Подвергнуть кристалл однородной деформации растяжения вдоль оси x в некотором диапазоне значений параметра деформации ε и найти экспериментальные зависимости $T_{11} = T_{11}(\varepsilon)$ и $T_{22} = T_{22}(\varepsilon)$.

2. Подвергнуть кристалл однородной деформации сдвига в плоскости xu в некотором диапазоне значений параметра деформации ε и найти экспериментальную зависимость $T_{12} = T_{12}(\varepsilon)$.

3. Построить полиномиальные аппроксимации зависимостей $T_{11} = T_{11}(\varepsilon)$, $T_{22} = T_{22}(\varepsilon)$ и $T_{12} = T_{12}(\varepsilon)$, определить коэффициенты аппроксимации.

4. Вычислить упругие постоянные через коэффициенты аппроксимации.

В пункте 2.3.4 представлен алгоритм определения упругих постоянных первого и второго порядков типа B по зависимостям энергии от деформации. Основное отличие этого алгоритма от алгоритма, представленного в пункте 2.3.3, в том, что для полного определения всех упругих постоянных необходим третий тип деформации, в качестве которого выбрано всестороннее растяжение в плоскости xu .

Достоинство обоих алгоритмов в том, что зависимые величины являются функцией только одного параметра деформации ε , что позволяет использовать при обработке данных хорошо апробированные методы однопараметрической полиномиальной аппроксимации. В пункте 2.3.5 проведено сопоставление двух подходов, позволяющее сделать вывод о предпочтительности алгоритма на основе зависимости напряжения от деформации. В данной работе преимущественно использовался этот алгоритм. Зависимости энергии от деформации использовались в главе 5 для проверки точности.

Раздел 2.4 содержит краткие выводы по главе 2.

Глава 3 посвящена описанию численных алгоритмов и комплекса программ для моделирования коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением и определения их упругих свойств. Разработанный программный комплекс реализует два основных алгоритма: первый описывает вычислительный эксперимент по определению зависимостей напряжения от деформации при изменении параметра решетки a ; второй — обработку результатов вычислительных экспериментов и определение упругих постоянных. Данные алгоритмы подробно описаны ниже в разделах 3.2 и 3.3 соответственно.

В разделе 3.1 представлена постановка вычислительного эксперимента по определению упругих постоянных по зависимостям напряжения от деформации. При этом для конкретного кристалла учитываются следующие факторы: 1) тип кристаллической решетки, 2) геометрические и электрические параметры моделей, 3) количество и вид зависимостей, определяемых в ходе вычислительного эксперимента.

Раздел 3.2 посвящен описанию алгоритма получения численных данных о зависимостях напряжение-деформация при однородных деформациях растяжения и сдвига, который для

каждого набора параметров модели a , R , σ_0/φ_0 состоит в циклическом по параметру ε повторении следующих шагов:

- 1) построение геометрической области, являющейся областью определения краевой задачи для уравнения Пуассона — Больцмана;
- 2) численное решение краевой задачи для уравнения Пуассона — Больцмана на этой области;
- 3) вычисление компонент тензора напряжений и плотности энергии, а также, при необходимости, визуализация результатов.

Блок-схема алгоритма по определению зависимостей напряжения от деформации при изменении параметра решетки a представлена на рисунке 2а.

В пункте 3.2.1 приведен алгоритм построения последовательности геометрических областей для моделирования процесса однородной деформации кристалла. Каждая геометрическая область представляет собой элементарную ячейку кристалла в текущей конфигурации, в центре которой находится сферическая полость, отвечающая коллоидной частице. Предложенный алгоритм позволяет единообразно формировать области как в исходной, так и в деформированных конфигурациях, при этом достаточно задания информации только об исходной конфигурации и величины параметра ε . Алгоритм реализован в виде программы на языке Python 3 с использованием библиотеки Open CASCADE Technology.

В пункте 3.2.2 описана процедура решения краевых задач для уравнения Пуассона — Больцмана для каждого значения параметра деформации ε . Решение осуществлялось методом конечных элементов с использованием лагранжевых элементов второго порядка. Использовались нерегулярные сетки тетраэдральных и треугольных элементов, при этом для реализации периодических граничных условий обеспечивалась идентичность разбиения противоположных граней и сторон внешней границы области.

Пункт 3.2.3 посвящен вычислению компонент тензора напряжений и визуализации результатов. Результатом решения краевой задачи является распределение электрического потенциала $\varphi = \varphi(x, y, z)$ модельной системы на данном шаге деформации. Вычисление тензора напряжений T_{ij} осуществляется по формуле (8). Для визуализации используется пакет программ ParaView.

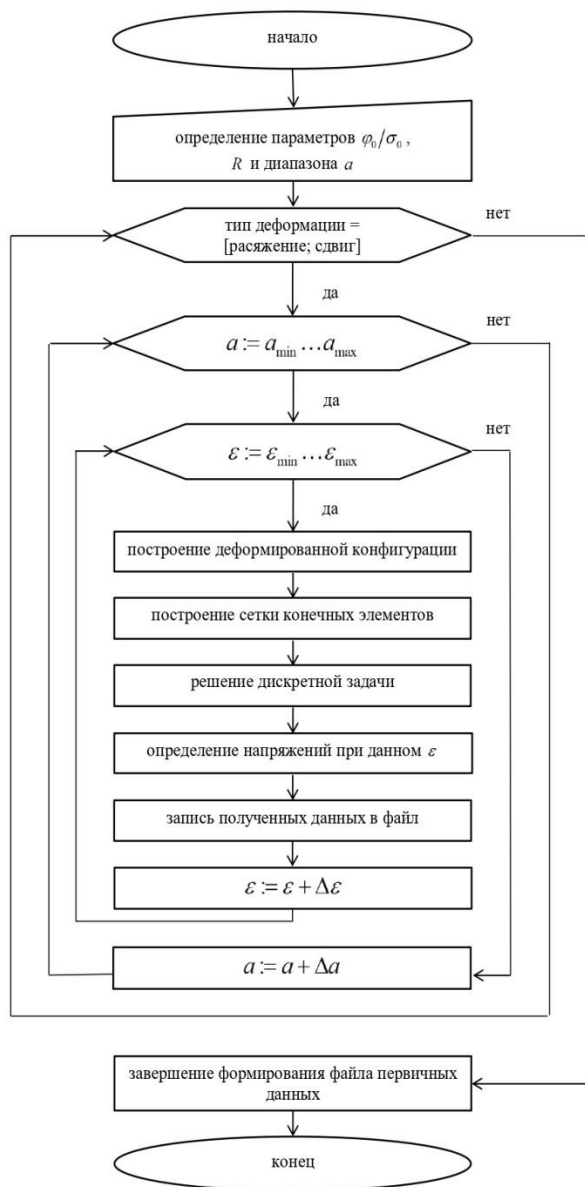
Раздел 3.3 посвящен описанию программного комплекса, осуществляющего обработку результатов вычислительных экспериментов. Блок-схема алгоритма обработки результатов эксперимента и вычисления упругих постоянных представлена на рисунке 2б.

Обработка включает в себя сортировку и переформатирование первичных данных вычислительного эксперимента, вычисление на их основе упругих постоянных и формирование

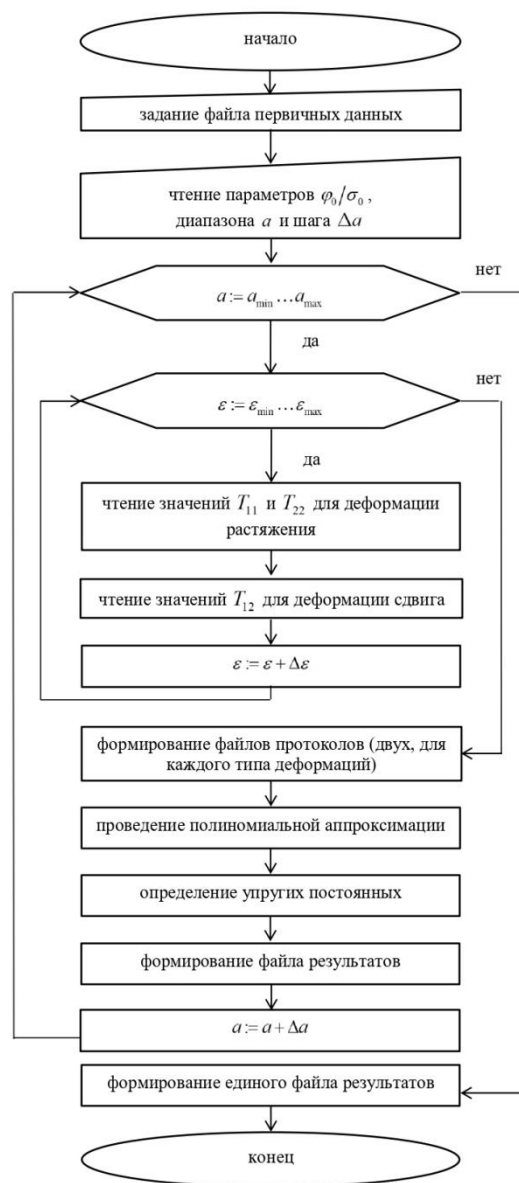
файлов результатов. Определение упругих постоянных осуществлялось посредством полиномиальной аппроксимации экспериментальных зависимостей напряжения от деформации. Пакет программ, реализующий обработку данных, составлен на языке MATLAB.

Для каждой модели кристалла проведена процедура определения оптимальной степени полинома аппроксимации. Во всех случаях оптимальной оказался полином третьей степени. Соответствующая программа также была разработана на языке MATLAB.

Раздел 3.4 содержит краткие выводы по главе 3.



а) блок-схема алгоритма по определению зависимостей напряжения от деформации

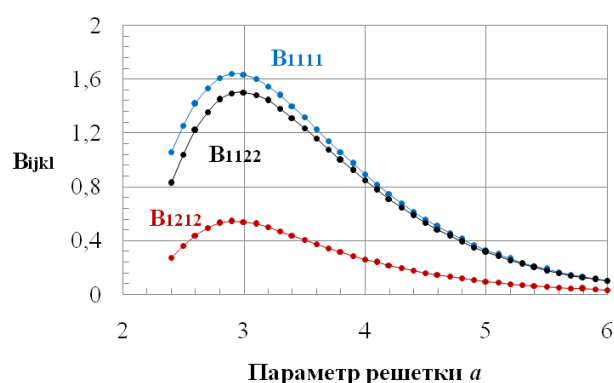
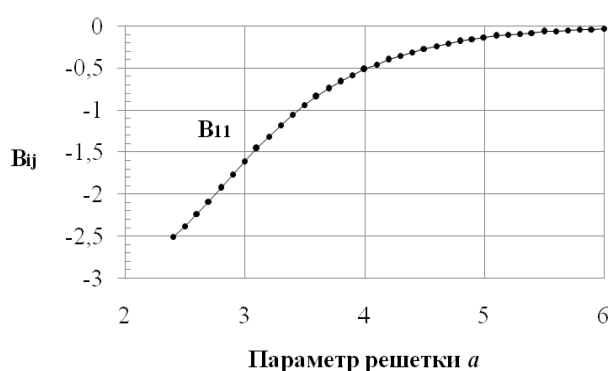


б) блок-схема алгоритма обработки результатов и вычисления упругих постоянных

Рисунок 2 – Блок-схема комплекса программ, реализующего процедуру определения упругих постоянных при различных значениях параметра решетки

В главе 4, разделы 4.1-4.4 предложены модели коллоидных кристаллов с о.ц.к, п.к. и гексагональной решетками и проведено комплексное исследование упругих свойств указанных кристаллов. На рисунках 3 и 4 приведены графики зависимостей упругих постоянных от плотности кристалла для двух моделей. Аналогичные результаты получены также для следующих моделей:

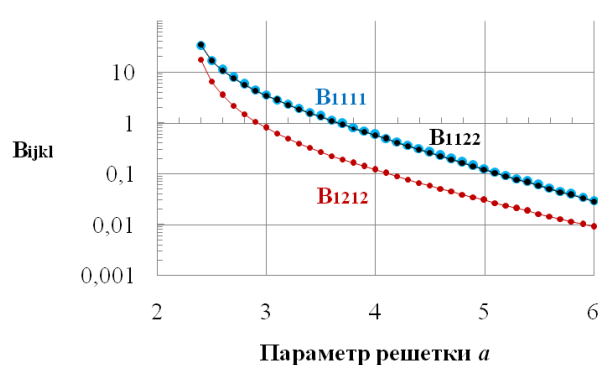
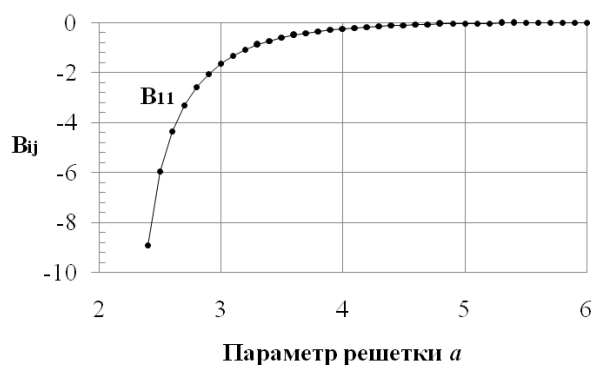
1. Тип решетки: п.к. Модель с постоянным потенциалом $\varphi_0 = 2,0$, радиус частицы $R = 1$, параметр решетки $a \in [2,1;6,0]$.
2. Тип решетки: гексагональная. Модель с постоянным потенциалом $\varphi_0 = 2,0$, радиус частицы $R = 1$, параметр решетки $a \in [2,1;6,0]$.



а) упругие постоянные первого порядка

б) упругие постоянные второго порядка

Рисунок 3 – Тип решетки: о.ц.к. Модель с постоянным потенциалом $\varphi_0 = 2,0$, радиус частицы $R = 1$, параметр решетки $a \in [2,4;6,0]$

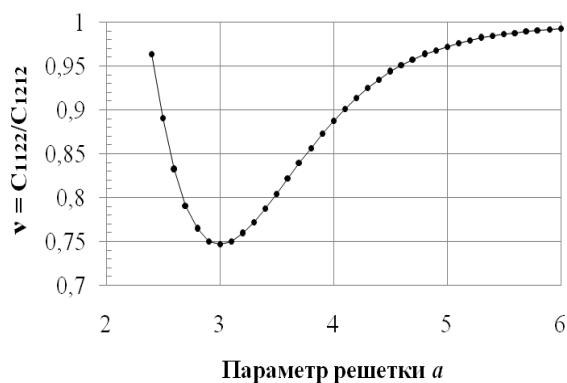
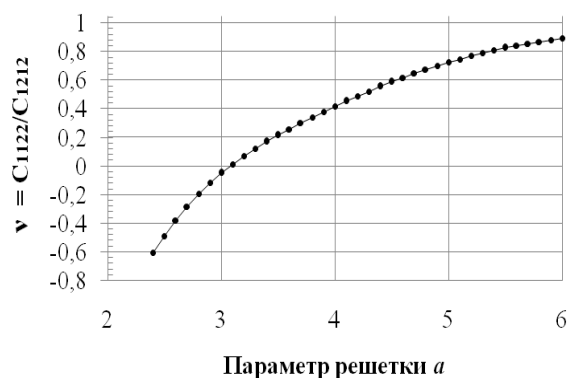


а) упругие постоянные первого порядка

б) упругие постоянные второго порядка

Рисунок 4 – Тип решетки: о.ц.к. Модель с постоянной плотностью заряда на частице $\sigma_0 = 2,0$, радиус частицы $R = 1$, параметр решетки $a \in [2,4;6,0]$

В разделе 4.5 на основании данных предыдущих разделов исследовалась выполнимость соотношения Коши $C_{1122} = C_{1212}$. На рисунке 5 приведены соотношения Коши для двух моделей. Аналогичные результаты получены также для всех остальных сформированных моделей.



а) Тип решетки: о.ц.к. Модель с постоянным потенциалом $\varphi_0 = 2,0$, радиус частицы $R = 1$, параметр решетки $a \in [2, 4; 6, 0]$

б) Тип решетки: о.ц.к. Модель с постоянной плотностью заряда на частице $\sigma_0 = 2,0$, радиус частицы $R = 1$, параметр решетки $a \in [2, 4; 6, 0]$

Рисунок 5 – Соотношение Коши

На основании результатов вычислительных экспериментов, приведенных в данном разделе, сформулировано следующее предложение.

Предложение 4. Для всех типов исследованных кристаллов с изотропным начальным напряжением имеет место существенное отклонение от соотношения Коши, что свидетельствует о значительном вкладе многочастичных взаимодействий в общее эффективное взаимодействие частиц в этих системах.

Раздел 4.6 содержит краткие выводы по главе 4.

В **главе 5** проведено сопоставление результатов, представленных в главе 4, с полученными другими методами.

Раздел 5.1 посвящен описанию вычислительного эксперимента по определению упругих постоянных по зависимостям энергии от деформации. Данный подход реализован для коллоидного кристалла с о.ц.к. решеткой для модели с постоянной плотностью заряда на частице $\sigma_0 = 2,0$. Радиус частицы $R = 1$. Рассмотрена одна конфигурация, при фиксированном параметре решетки $a = 3$. Сравнение результатов приведено в таблице 1.

Таблица 1 — Сравнение упругих постоянных, полученных по зависимостям напряжения от деформаций и энергии от деформации

Тип зависимости	B_{11}	B_{1111}	B_{1122}	B_{1212}
Энергия-деформация	-1,6512871	3,60017	3,48699	0,80800
Напряжение-деформация	-1,6512857	3,60053	3,48685	0,80799

Очень хорошее совпадение результатов двух подходов свидетельствует о согласованности и корректности проведенных расчетов.

В **разделе 5.2** приведено описание вычислительного эксперимента по определению силовых постоянных для модели с гексагональной решеткой с постоянным потенциалом

$\varphi_0 = 2,0$, радиусом частиц $R = 1$ при изменении параметра решетки a в диапазоне от 2,1 до 8,0. Подтверждены ранее известные данные¹⁴ для силовых постоянных первого и второго порядков, впервые получена информация о постоянных третьего порядка. Проведено сравнение упругих постоянных, вычисленных через силовые постоянные, с данными прямого вычислительного эксперимента, описанного в разделе 4.4. Результаты для трех параметров решетки приведены в таблице 2. Наблюдается хорошее согласие результатов двух подходов.

Таблица 2 — Сравнение результатов для упругих постоянных, полученных прямым экспериментом и вычисленных через силовые постоянные

Тип эксперимента	B_{1111}	B_{1122}	B_{1212}
Параметр решетки $a = 2,1$			
Прямой эксперимент	0,90228	0,54715	0,17735
Через силовые постоянные	0,90164	0,54738	0,17713
Параметр решетки $a = 4,0$			
Прямой эксперимент	1,37674	0,85045	0,26312
Через силовые постоянные	1,35560	0,84263	0,25649
Параметр решетки $a = 6,0$			
Прямой эксперимент	0,21336	0,12723	0,04316
Через силовые постоянные	0,21033	0,12605	0,04214

Раздел 5.3 посвящен проверке специального случая для кристалла с гексагональной решеткой. В силу ее высокой симметрии выполняется дополнительное, по сравнению с другими решетками, соотношение между упругими постоянными второго порядка: $C_{1111} = C_{1122} + 2C_{1212}$. В вычислительном эксперименте в главе 4 эти три постоянные определялись независимо, что позволяет провести проверку выполнимости этого соотношения. В таблице 3 приведены результаты для трех значений параметра решетки. Наблюдается очень хорошее согласие результатов, что свидетельствует о корректности и высокой точности проведенных расчетов.

Таблица 3 — Проверка соотношения $C_{1111} = C_{1122} + 2C_{1212}$

Параметр решетки	C_{1122}	C_{1212}	Расчетное C_{1111} , $C_{1122} + 2C_{1212}$	C_{1111}
$a = 3,0$	0,10422	1,97692	4,05806	4,05803
$a = 4,0$	0,35435	0,75923	1,87281	1,87285
$a = 5,0$	0,19623	0,26582	0,72787	0,72787

¹⁴ Александров, Ю.В. Моделирование упругих свойств двумерных электрически стабилизированных коллоидных кристаллов: дис. ...канд.физ.-мат. наук: 05.13.18 / Ю.В. Александров. — Ульяновск, 2012. — 138 с.

Раздел 5.4 содержит краткие выводы по главе 5.

В заключении приведены основные результаты диссертационного исследования:

1. Разработаны новые математические модели для кристаллов в состоянии произвольной однородной деформации, свободные от использования априори заданных эффективных потенциалов.

2. Определены типы моделей, относящихся к кристаллам с изотропным начальным напряжением. Приведено доказательство изотропии начального напряжения модельных кубических кристаллов и кристаллов с квадратной и гексагональной решеткой, а также достаточные условия для определения их упругих постоянных первого и второго порядков.

3. Предложен новый метод математического моделирования деформационных зависимостей напряжения и энергии коллоидных кристаллов, позволяющий определять их упругие постоянные средствами прямого вычислительного эксперимента.

4. Разработан численный метод и алгоритмы, реализованные в виде комплекса программ, позволяющие осуществлять вычислительный эксперимент по определению упругих постоянных первого и второго порядков кристаллов с изотропным начальным напряжением при различных значениях параметров модели.

5. Проведены комплексные исследования коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением средствами вычислительного эксперимента, включающие в себя зависимости упругих постоянных от плотности системы, данные о механической устойчивости систем по отношению к деформациям различных видов и о вкладе многочастичных взаимодействий.

6. Средствами прямого вычислительного эксперимента установлено отклонение от соотношения Коши в исследуемых моделях, что свидетельствует о значительном вкладе многочастичных взаимодействий в общее эффективное взаимодействие частиц в этих системах.

В приложениях приведены: перечень векторов примитивных трансляций для моделей ячеек, геометрическая и топологическая информация для исследуемых кристаллов, а также примеры файлов протоколов программы.

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ АВТОРОМ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Публикации в изданиях, входящих в перечень ВАК, индексируемые Web of Science и Scopus:

1. Alexandrov, Y.V. Elastic properties of static charge-stabilized colloidal crystal with two-dimensional hexagonal lattice / Y.V. Alexandrov, A.A. Batanova, E.V. Gladkova [et al.] // Journal of Physics: Conference Series. — Feb. 2016. — Vol. 681. — 012044.

2. Dyshlovenko, P. Elastic Properties of Charge Stabilized Colloidal Crystals with Simple Cubic Lattice / P. Dyshlovenko, A. Batanova, E. Gladkova [et al.] // Materials Science Forum. — Mar. 2016. — Vol. 845. — P. 178-181.

3. Batanova, A.A. Elastic properties of charge-stabilized colloidal crystals with static body-centered cubic lattice / A.A. Batanova, P.E. Dyshlovenko // Journal of Physics: Conference Series. — Jan. 2018. — Vol. 955. — 012011.

4. Batanova, A.A. Elastic constants of colloidal crystals with body-centered cubic lattice and constant potential on the particles / A.A. Batanova, P.E. Dyshlovenko // Procedia Engineering. — 2017. — Vol. 201. — P. 543–548.

Публикации в изданиях, входящих в перечень ВАК:

5. Батанова, А.А. Математическое моделирование свойств упругости коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением / А.А. Батанова // Автоматизация процессов управления. — 2019. — №4 (58) — С. 90-96.

Публикации в других изданиях:

6. Батанова, А.А. Моделирование упругих свойств коллоидного кристалла с объемноцентрированной кубической решеткой / А.А. Батанова, П.Е. Дышловенко // Вузовская наука в современных условиях: сб. мат. 49-й науч.-техн. конф., 26-31 янв. 2015 года, г. Ульяновск. Ч. 2. — Ульяновск, УлГТУ, 2015. — С. 109-112.

7. Batanova, A.A. Elastic constants of charge stabilized colloidal crystal with body-centered cubic lattice / A.A. Batanova, P.E. Dyshlovenko // Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах: Тезисы докладов Международной конференции, посвященной 80-летию члена-корреспондента РАН И. К. Камилова, 24-28 авг. 2015 года, г. Челябинск. — Челябинск: Изд-во ЧелГУ, 2015. — С. 157.

8. Dyshlovenko, P.E. Elastic properties of charge stabilized colloidal crystals / P.E. Dyshlovenko, A.A. Batanova, E.V. Gladkova [et al.] // Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах: Тезисы докладов Международной конференции, посвященной 80-летию члена-корреспондента РАН И. К. Камилова, 24-28 авг. 2015 года, г. Челябинск. — Челябинск: Изд-во ЧелГУ, 2015. — С. 162.

9. Dyshlovenko, P.E. Computer Simulation of Charge Stabilized Colloidal Crystals / P.E. Dyshlovenko, A.A. Batanova, E.V. Gladkova [et al.] // International Conference on Computer Simulation in Physics and beyond, Sept. 6-10, 2015, Moscow. — Book of Abstracts. — P.49.

10. Батанова, А.А. Построение элементарной ячейки коллоидного кристалла в состоянии произвольной однородной деформации / А.А. Батанова // Вузовская наука в современных условиях: сб. мат. 50-й науч.-техн. конф., 25-30 янв. 2016 года, г. Ульяновск. Ч. 2. — Ульяновск, УлГТУ, 2016. — С. 155-158.

11. Батанова, А.А. Определение упругих постоянных коллоидного кристалла с моноатомной объемноцентрированной кубической решеткой и постоянным потенциалом частиц / А.А. Батанова, П.Е. Дышловенко // Вузовская наука в современных условиях: сб. мат. 51-й науч.-техн. конф., 23-28 янв. 2017 года, г. Ульяновск. Ч. 2. — Ульяновск, УлГТУ, 2017. — С. 177-180.
12. Batanova, A.A. Modeling of elastic properties of charge stabilized colloidal crystals with body-centered cubic lattice / A.A. Batanova, P.E. Dyshlovenko // «Информационные технологии и нанотехнологии» (ИТНТ-2017): сборник трудов III международной конференции и молодежной школы, 25-27 апр. 2017 года, г. Самара. — Самара: Новая техника, 2017. — С. 1128-1130.
13. Батанова, А.А. Нарушение соотношения Коши в электрически стабилизированных коллоидных кристаллах с о.ц.к. кристаллической решеткой / А.А. Батанова // Вузовская наука в современных условиях: сб. мат. 52-й науч.-техн. конф., 29 янв. – 3 февр. 2018 года, г. Ульяновск. Ч. 2. — Ульяновск, УлГТУ, 2018. — С. 150-153.
14. Батанова, А.А. Энергия и упругие постоянные электрически стабилизированного коллоидного кристалла с объемноцентрированной кубической решеткой / А.А. Батанова, П.Е. Дышловенко // «Информационные технологии и нанотехнологии» (ИТНТ-2018): сборник трудов IV международной конференции и молодежной школы, 24-27 апр. 2018 года, г. Самара. — Самара: Новая техника, 2018. — С. 1624-1627.
15. Батанова, А.А. Формирование геометрических областей при моделировании однородно деформированных коллоидных кристаллов / А.А. Батанова, П.Е. Дышловенко // «Актуальные проблемы физической и функциональной электроники» (АПФФЭ-2019): сборник трудов 22-й Всероссийской молодежной научной школы-семинара, 22-24 окт. 2019 года, г. Ульяновск. — Ульяновск: УлГТУ, 2019. — С. 146-148.

Свидетельства о регистрации программ:

16. Дышловенко, П.Е. Определение упругих постоянных кубических коллоидных кристаллов по зависимостям напряжения от деформации (elcon) / П.Е. Дышловенко, А.А. Батанова // Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2018664359, М.: РОСПАТЕНТ, 15.11.2018.