

ПОТЕНЦИАЛЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦ С ВРАЩАТЕЛЬНЫМИ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ

Бызов А.П., Иванова Е.А.

Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург

Развивается метод описания упругого взаимодействия частиц общего вида, обладающих как поступательными, так и вращательными степенями свободы. Вводится понятие векторов деформации системы двух частиц. Определяется общий вид соотношений упругости. Предлагается конкретный вид парного потенциала взаимодействия, который может использоваться, например, при моделировании кристаллической решетки слоя графита.

Парные потенциалы взаимодействия типа потенциала Леннарда-Джонса широко применяются для моделирования молекулярных систем. Эти потенциалы позволяют правильно описывать многие физические явления. Вместе с тем, парные потенциалы имеют принципиальные недостатки. Одним из главных недостатков является то, что парные потенциалы, как правило, могут обеспечить устойчивость только плотноупакованных кристаллических решеток. Решетки с более низкой плотностью упаковки, такие как простая кубическая решетка, оказываются неустойчивыми для большинства парных потенциалов. Также неустойчивыми оказываются структуры, характерные для ковалентных кристаллов — структура графита на плоскости и структура алмаза в пространстве. Кроме того, парное центральное взаимодействие не может обеспечить устойчивость пространственной структуры и адекватно описать частоты колебаний большинства многоатомных молекул. Примером, иллюстрирующим этот факт, является линейно ориентированная трехатомная молекула (молекула, у которой обе связи лежат на одной прямой). Если потенциальная энергия такой молекулы зависит только от координат входящих в нее атомов, то изгибные колебания такой молекулы будут существенно нелинейными, а соответствующая частота малых колебаний — нулевой, что противоречит экспериментальным данным. Значительные расхождения с экспериментальными данными возникают также и для трехатомных молекул, у которых валентный угол отличен от 180° . Традиционное решение проблемы состоит в применении многочастичных потенциалов взаимодействия [1].

Альтернативный подход состоит в учете моментного вклада в межатомное взаимодействие. В работе [2] показано, что учет парного моментного взаимодействия (дополнительно к парному силовому) может обеспечить устойчивость кристаллических структур с низкой плотностью упаковки. При описании парного силового и моментного взаимодействия возникают две трудности. Первая трудность связана с введением мер деформаций и получением определяющих уравнений. Обсудим эту проблему подробнее. В механике Ньютона силы центральные, поэтому при описании парных силовых взаимодействий между материальными точками требуется задание только величины силы. При этом, согласно принципу материальной объективности, сила не должна изменяться при движении системы как жесткого

целого. Следовательно, сила взаимодействия материальных точек зависит только от расстояния между ними. Таким образом, в случае чисто силовых взаимодействий задание силы сводится к заданию одной скалярной функции одного скалярного аргумента. При учете вращательных степеней свободы взаимодействие частиц характеризуется двумя векторными величинами - вектором силы (который в данном случае не является центральным) и вектором момента (на который также не накладывается никаких ограничений). Векторы силы и момента взаимодействия двух частиц зависят, вообще говоря, от четырех векторных аргументов - векторов положений и векторов поворотов обеих частиц. Принцип материальной объективности сокращает число аргументов сводя их к двум векторным величинам. Итак, при учете вращательных степеней свободы, описание взаимодействия частиц требует задания двух векторных величин в виде функций двух векторных аргументов. Для решения этой задачи плодотворным оказывается использование идеологии механики моментных сплошных сред [3], где выражения для сил и моментов находятся при помощи уравнения баланса энергии, которое считается независимым законом. Вторая трудность, возникающая при описании парных силовых и моментных взаимодействий, связана с заданием внутренней энергии (потенциала взаимодействия) как функции мер деформаций. В линейных и геометрически нелинейных континуальных теориях эта задача решается просто - энергия задается в виде квадратичной формы мер деформаций. В физически нелинейных континуальных теориях вопрос о задании внутренней энергии, вообще говоря, остается открытым, поскольку все известные формулы являются чисто эмпирическими.

В работе [2], решена задача описания парного силового и моментного взаимодействия дискретных частиц в линейном приближении. Ниже результаты работы [2] обобщены на случай не малых перемещений и поворотов применительно к плоскому движению частиц. Введены понятия векторов деформации системы двух взаимодействующих частиц, получены соотношения Коши-Грина, предложены потенциалы взаимодействия. Полученные результаты могут оказаться полезными, в частности, при решении задач диссоциации молекул и разрушения кристаллических решеток методами молекулярной динамики.

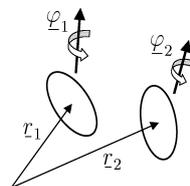


Рис. 1: Моментное взаимодействие двух частиц.

Описание движения системы двух тел-точек. Рассмотрим систему двух тел-точек A и B — Рис. 1. В актуальной конфигурации положение тел-точек задается радиус-векторами $\underline{R}_1, \underline{R}_2$, ориентация тел-точек — тензорами поворотов $\underline{P}_1, \underline{P}_2$; тела-точки обладают трансляционными скоростями $\underline{v}_1, \underline{v}_2$ и угловыми скоростями $\underline{\omega}_1, \underline{\omega}_2$. Введем следующие обозначения: $\underline{F}_1, \underline{L}_1$ — сила и собственно момент, действующие на тело-точку A со стороны тела-точки B ; $\underline{F}_2, \underline{L}_2$ — сила и собственно момент, действующие на тело-точку B со стороны тела-точки A ; $\underline{F}_1^e, \underline{L}_1^e, \underline{F}_2^e, \underline{L}_2^e$

— внешние воздействия на тела-точки A и B соответственно. Запишем уравнения движения тела-точки A , тела-точки B и системы, состоящей из обеих тел-точек:

$$\begin{aligned} \dot{\underline{K}}_1(A) &= \underline{F}_1 + \underline{F}_1^e, & \dot{\underline{K}}_2(A) &= \underline{L}_1 + \underline{L}_1^e, \\ \dot{\underline{K}}_1(B) &= \underline{F}_2 + \underline{F}_2^e, & \dot{\underline{K}}_2(B) &= \underline{L}_2 + \underline{L}_2^e, \\ [\underline{K}_1(A) + \underline{K}_1(B)]' &= \underline{F}_1^e + \underline{F}_2^e, \\ [\underline{R}_1 \times \underline{K}_1(A) + \underline{K}_2(A) + \underline{R}_2 \times \underline{K}_1(B) + \underline{K}_2(B)]' &= \\ &= \underline{R}_1 \times \underline{F}_1^e + \underline{L}_1^e + \underline{R}_2 \times \underline{F}_2^e + \underline{L}_2^e. \end{aligned} \quad (1)$$

Следствием уравнений (1) является третий закон Ньютона для сил и аналог третьего закона Ньютона для моментов [4]:

$$\underline{F}_1 + \underline{F}_2 = 0, \quad \underline{R}_1 \times \underline{F}_1 + \underline{L}_1 + \underline{R}_2 \times \underline{F}_2 + \underline{L}_2 = 0. \quad (2)$$

Приведенное уравнение баланса энергии для системы двух тел-точек. Запишем уравнение баланса энергии для системы, состоящей из двух тел-точек [4]:

$$[K(A) + K(B) + U]' = \underline{F}_1^e \cdot \underline{v}_1 + \underline{L}_1^e \cdot \underline{\omega}_1 + \underline{F}_2^e \cdot \underline{v}_2 + \underline{L}_2^e \cdot \underline{\omega}_2, \quad (3)$$

где U — внутренняя энергия системы (энергия взаимодействия тел-точек A и B). Принимая во внимание уравнения движения (1), уравнение баланса энергии (3) можно преобразовать к виду

$$\dot{U} = -\underline{F}_1 \cdot \underline{v}_1 - \underline{L}_1 \cdot \underline{\omega}_1 - \underline{F}_2 \cdot \underline{v}_2 - \underline{L}_2 \cdot \underline{\omega}_2. \quad (4)$$

В механике сплошных сред уравнение, аналогичное (4), называется приведенным уравнением баланса энергии. Сохраним эту терминологию и для дискретной системы. Введем обозначения

$$\begin{aligned} \underline{R} &= \underline{R}_2 - \underline{R}_1, & \underline{F} &= \underline{F}_1 = -\underline{F}_2, \\ \underline{M}^C &= \underline{L}_1 - \frac{1}{2}\underline{R} \times \underline{F}_1 = -\underline{L}_2 - \frac{1}{2}\underline{R} \times \underline{F}_2. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь \underline{M}^C имеет смысл момента, действующего на тело-точку A со стороны тела-точки B , вычисленного относительно середины отрезка, соединяющего тела-точки. С учетом обозначений (5) приведенное уравнение баланса энергии (4) записывается так:

$$\dot{U} = \underline{F} \cdot \left[\dot{\underline{R}} - \frac{1}{2}(\underline{\omega}_1 + \underline{\omega}_2) \times \underline{R} \right] + \underline{M}^C \cdot (\underline{\omega}_2 - \underline{\omega}_1). \quad (6)$$

Векторы деформации и соотношения Коши-Грина в случае плоского движения тел-точек. Рассмотрим плоское движение системы тел-точек. Используя цилиндрическую систему координат, представим вектор относительного положения тел-точек \underline{R} и векторы угловых скоростей $\underline{\omega}_1, \underline{\omega}_2$ в виде

$$\underline{R} = R \underline{e}_R(\theta), \quad \underline{\omega}_1 = \dot{\varphi}_1 \underline{k}, \quad \underline{\omega}_2 = \dot{\varphi}_2 \underline{k}, \quad \underline{e}_R(\theta) = \cos \theta \underline{i} + \sin \theta \underline{j}. \quad (7)$$

Введем в рассмотрение тензор поворота на угол $\frac{1}{2}(\varphi_1 + \varphi_2)$ вокруг вектора \underline{k} , обозначив его $\underline{\underline{P}} = \underline{\underline{P}}(\frac{1}{2}[\varphi_1 + \varphi_2]\underline{k})$. Введем в рассмотрение также векторы $\underline{\varepsilon}$ и $\underline{\kappa}$:

$$\underline{\varepsilon} = \underline{\underline{P}}^T \cdot \underline{R}, \quad \underline{\kappa} = (\varphi_2 - \varphi_1)\underline{k}. \quad (8)$$

Нетрудно показать, что в случае плоского движения тел-точек, с учетом обозначений (7), (8), приведенное уравнение баланса энергии (6) можно переписать в форме

$$\dot{U} = \underline{F}_* \cdot \dot{\underline{\varepsilon}} + \underline{M}_* \cdot \dot{\underline{\kappa}}, \quad \underline{F}_* = \underline{\underline{P}}^T \cdot \underline{F}, \quad \underline{M}_* = \underline{\underline{P}}^T \cdot \underline{M}^C \equiv \underline{M}^C. \quad (9)$$

Здесь векторы \underline{F}_* и \underline{M}_* называются энергетическими векторами силы и момента. Векторы $\underline{\varepsilon}$ и $\underline{\kappa}$, на которых совершают работу энергетический вектор силы \underline{F}_* и энергетический вектор момента \underline{M}_* , называются векторами деформации. Далее будем рассматривать упругое деформирование системы, т. е. будем предполагать, что внутренняя энергия, вектор \underline{F}_* и вектор \underline{M}_* зависят только от векторов деформации и не зависят от скоростей. Тогда имеют место соотношения Коши-Грина

$$\underline{F}_* = \frac{\partial U}{\partial \underline{\varepsilon}}, \quad \underline{M}_* = \frac{\partial U}{\partial \underline{\kappa}}. \quad (10)$$

Поясним геометрический смысл векторов деформации $\underline{\varepsilon}$, $\underline{\kappa}$. Для этого представим векторы $\underline{\varepsilon}$, $\underline{\kappa}$ в цилиндрической системе координат

$$\underline{\varepsilon} = R \underline{e}_R(\gamma), \quad \underline{\kappa} = \kappa \underline{k}, \quad \gamma = \theta - \frac{1}{2}(\varphi_1 + \varphi_2), \quad \kappa = \varphi_2 - \varphi_1. \quad (11)$$

Величина R характеризует расстояние между телами-точками в актуальной конфигурации. Угол γ представляет собой разность между углом θ , определяющим направление прямой, соединяющей тела-точки, и углом $\frac{1}{2}(\varphi_1 + \varphi_2)$, характеризующим ориентацию тел-точек; в механике сплошных сред аналог угла γ называется углом сдвига. Угол κ характеризует относительный поворот тел-точек. Перепишем соотношения Коши-Грина (10) в скалярной форме. В цилиндрической системе координат выражения для векторов силы и момента имеют вид

$$\underline{F} = F_R \underline{e}_R(\theta) + F_\theta \underline{e}_\theta(\theta), \quad \underline{M}^C = M^C \underline{k}, \quad (12)$$

где радиальная F_R и поперечная F_θ составляющие вектора силы и величина вектора момента M вычисляются по формулам

$$F_R = \frac{\partial U}{\partial R}, \quad F_\theta = \frac{1}{R} \frac{\partial U}{\partial \gamma}, \quad M^C = \frac{\partial U}{\partial \kappa}. \quad (13)$$

Если задана внутренняя энергия системы двух тел-точек U как функция мер деформации R , γ , κ , формулы (12), (13) позволяют вычислить векторы силы и момента. Таким образом задача описания парного силового и моментного взаимодействия тел-точек сводится к заданию внутренней энергии системы (потенциала взаимодействия).

Моментные потенциалы взаимодействия. Очевидно, что конкретный вид моментного потенциала взаимодействия $U(R, \gamma, \kappa)$ зависит от внутренней структуры взаимодействующих частиц (тел-точек). Если тела-точки являются механическими моделями атомов, непосредственно описать их внутреннюю структуру крайне трудно. Однако, геометрия молекулярных соединений и кристаллических решеток, образуемых данным типом атомов, позволяет косвенно судить о том, какой симметрией должны обладать тела-точки, моделирующие атомы. Этой информации оказывается достаточно, чтобы определить общий вид моментного потенциала взаимодействия. В качестве примера приведем потенциал взаимодействия однотипных частиц, способных образовать кристаллическую решетку в плоскости:

$$U(R, \gamma, \kappa) = \Pi_0(R) + \Pi_1(R) \sin(n\gamma) \sin\left(\frac{n\kappa}{2}\right). \quad (14)$$

Здесь n — параметр, характеризующий порядок симметрии частицы, $\Pi_0(R)$ — безмоментный потенциал взаимодействия типа Леннарда-Джонса, $\Pi_1(R)$ — некоторая функция расстояния, которая должна стремиться к нулю при больших R . Для частиц, которые могут образовать квадратную решетку, $n = 4$. Для частиц, образующих структуру графита (шестиугольная решетка в плоскости), $n = 3$. Для частиц, образующих треугольную решетку, $n = 6$.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект 05-01-00094.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Tersoff J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems // Phys. Rev. B. 1988. **37**. P. 6991–7000.
- [2] Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Фирсова А.Д. Описание кристаллической упаковки частиц с учетом моментных взаимодействий // Известия РАН. Механика твердого тела. 2003. № 4. С. 110–127.
- [3] Жилин П.А. Основные уравнения неклассической теории оболочек. Тр. ленингр. политехн. ин-та. 1982. Т. 386. С. 29–46.
- [4] Жилин П.А. Теоретическая механика. фундаментальные законы механики. Учеб. пособие. СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2003. 340 с.

Byzov A.P., Ivanova E.A. *Interaction potentials for particles with rotational degrees of freedom.* Method of description of elastic interaction of particles of general kind (having both translation and rotation degrees of freedom) is developed. Strain vectors of the system of two particles are determined. Structure of relations of elasticity is determined. Pair potential of interaction, which can be used for simulation of crystal lattice of graphite lay, is proposed.