

*А.П. Бызов, Е.А. Иванова*

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
МОМЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ЧАСТИЦ  
С ВРАЩАТЕЛЬНЫМИ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ**

Парные потенциалы взаимодействия типа потенциала Леннарда – Джонса широко применяются для моделирования молекулярных систем.

Эти потенциалы позволяют на качественном уровне правильно описывать многие физические явления и свойства веществ. Вместе с тем, хоро-

шо известно, что парные потенциалы имеют принципиальные недостатки. Главным является то, что парные потенциалы, как правило, могут обеспечить устойчивость только плотноупакованных кристаллических решеток. Решетки с более низкой плотностью упаковки, такие, как простая кубическая, оказываются неустойчивыми для большинства парных потенциалов. Также неустойчивыми оказываются структуры, характерные для ковалентных кристаллов, например структуры графита на плоскости и алмаза в пространстве. Кроме того, парное центральное взаимодействие не может обеспечить устойчивость пространственной структуры и адекватно описать частоты колебаний большинства многоатомных молекул. Пример – линейно ориентированная трехатомная молекула (у нее обе связи лежат на одной прямой). Если потенциальная энергия зависит только от координат входящих в нее атомов, то ее изгибные колебания будут существенно нелинейными, а соответствующая частота малых колебаний – нулевой, что противоречит экспериментальным данным. Значительные расхождения с экспериментальными данными возникают и для трехатомных молекул, у которых валентный угол отличен от  $180^\circ$ .

Традиционное решение перечисленных проблем состоит в применении многочастичных потенциалов взаимодействия [1, 2]. Подобные потенциалы зависят от углов между связями, что позволяет сделать устойчивыми структуры с низкой плотностью заполнения и адекватно описать частоты колебаний ряда молекулярных соединений. Однако форма подобных потенциалов оказывается весьма сложной, а физический смысл входящих в них констант – туманным. Константы вычисляются из соответствия физическим свойствам моделируемых веществ, правда, при переходе от одной кристаллической структуры к другой (например, графит – алмаз) приходится полностью менять потенциал взаимодействия. Многочастичные потенциалы взаимодействия получили большое распространение и при описании молекулярных систем [3], но, как правило, этот подход оказывается сугубо эмпирическим, требующим подбора большого числа констант, справедливых только для данного конкретного соединения.

Альтернативный подход заключается в учете моментного вклада в межатомное взаимодействие. В статье [4] показано, что учет парного моментного взаимодействия (дополнительно

к парному силовому) может обеспечить устойчивость кристаллических структур с низкой плотностью упаковки. Моментное взаимодействие имеет ясный физический смысл, что делает его более предпочтительным, чем многочастичное.

При описании парных силового и моментного взаимодействий возникают две трудности. Первая 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 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 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 [6–9], 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, ос-

тается открытым, поскольку все известные формулы – чисто эмпирические. В статьях [4, 5] решена задача описания парного силового и моментного взаимодействий дискретных частиц в линейном приближении. Ниже результаты работ [4, 5] обобщены на случай немалых 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.

### Тело-точка и его динамические структуры

Ниже в качестве исходного объекта, моделирующего частицы среды, вводится тело-точка [10]. Тело-точка в отличие от материальной точки реагирует не только на трансляционные, но и на спинорные движения. Тело-точка – это материальный объект, занимающий нулевой объем в пространстве, положение которого в данный момент времени считается определенным, если заданы вектор положения  $\underline{R}(t)$  и тензор поворота  $\underline{\underline{P}}(t)$ .

*Определение.* Тензором поворота называется собственно ортогональный тензор, т. е. являющийся решением уравнений

$$\underline{\underline{P}} \cdot \underline{\underline{P}}^T = \underline{\underline{P}}^T \cdot \underline{\underline{P}} = \underline{\underline{E}}, \quad \det \underline{\underline{P}} = 1. \quad (1)$$

Здесь  $\underline{\underline{E}}$  – единичный тензор. Трансляционная и угловая скорости тела-точки находятся по формулам

$$\underline{v}(t) = \dot{\underline{R}}(t), \quad \underline{\omega}(t) = -\frac{1}{2} \left( \dot{\underline{\underline{P}}}(t) \cdot \underline{\underline{P}}^T(t) \right)_x, \quad (2)$$

где знак “ $( )_x$ ” – обозначение векторного инварианта.

*Определение.* Кинетической энергией тела-точки называется квадратичная форма скоростей [10]:

$$K = \frac{1}{2} m \underline{v} \cdot \underline{v} + \underline{v} \cdot \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\omega} + \frac{1}{2} \underline{\omega} \cdot \underline{\underline{C}} \cdot \underline{\omega}. \quad (3)$$

Тензоры второго ранга  $\underline{\underline{B}}$ ,  $\underline{\underline{C}}$  называют тензорами инерции, а  $m$  – массой тела-точки. Тензоры инерции выступают объективными характеристиками тела-точки, поэтому они должны зависеть от тензора поворота следующим образом:

$$\underline{\underline{B}}(t) = \underline{\underline{P}}(t) \cdot \underline{\underline{B}}_0 \cdot \underline{\underline{P}}^T(t), \quad \underline{\underline{C}}(t) = \underline{\underline{P}}(t) \cdot \underline{\underline{C}}_0 \cdot \underline{\underline{P}}^T(t), \quad (4)$$

где  $\underline{\underline{B}}_0$ ,  $\underline{\underline{C}}_0$  – значения тензоров инерции в отсчетном положении, т. е. при тех значениях  $t_0$ , при которых  $\underline{\underline{P}}(t_0) = \underline{\underline{E}}$ .

*Определение.* Количество движения тела-точки называется линейная форма скоростей [10]:

$$\underline{K}_1 = \frac{\partial K}{\partial \underline{v}} = m \underline{v} + \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\omega}. \quad (5)$$

*Определение.* Собственным кинетическим моментом тела-точки называется линейная форма скоростей [10]:

$$\underline{K}_2 = \frac{\partial K}{\partial \underline{\omega}} = \underline{v} \cdot \underline{\underline{B}} + \underline{\underline{C}} \cdot \underline{\omega}. \quad (6)$$

*Определение.* Кинетическим моментом тела-точки, вычисленным относительно неподвижной опорной точки  $Q$ , называется величина [10]

$$\underline{K}_2^Q = (\underline{R} - \underline{R}_Q) \times \frac{\partial K}{\partial \underline{v}} + \frac{\partial K}{\partial \underline{\omega}}. \quad (7)$$

Кинетическая энергия, количество движения и кинетический момент являются аддитивными функциями массы. Если тело  $A$  представляет собой совокупность тел-точек  $A_i$ , то

$$K(A) = \sum_i K(A_i), \quad \underline{K}_1(A) = \sum_i \underline{K}_1(A_i), \\ \underline{K}_2^Q = \sum_i \underline{K}_2^Q(A_i). \quad (8)$$

### Взаимодействия в системе тел-точек

В механике Ньютона (механике материальных точек, обладающих только трансляционными степенями свободы) взаимодействия характеризуются силами. При описании взаимодействий тел-точек, обладающих не только трансляционными, но и вращательными степенями свободы, понятия силы оказывается недостаточным. Требуется введение понятия собственно момента как независимой, никак не выражющейся через силу характеристики взаимодействия. Ниже излагается концепция взаимодействий тел общего вида, принятая в [10].

Рассмотрим некоторую совокупность тел-точек, которую будем называть телом  $A$ . Все остальные тела-точки назовем окружением тела  $A$  и обозначим символом  $A^e$ . Воздействие окружения  $A^e$  на само тело  $A$  моделируется заданием пары величин: вектора силы и вектора момента. Эти



векторы аддитивны как по телам, составляющим тело  $A$ , так и по телам, составляющим его окружение  $A^e$ . Силу, действующую на тело  $A$  со стороны тела  $B$ , будем обозначать  $\underline{F}(A, B)$ . Сила  $\underline{F}(A, B)$  – это реакция тела  $B$  на изменение положения тела  $A$ .

*Определение.* Моментом  $\underline{M}^Q(A, B)$ , действующим на тело  $A$  со стороны тела  $B$ , вычисленным относительно опорной точки  $Q$ , называется вектор, выражаемый следующей конструкцией:

$$\underline{M}^Q(A, B) = (\underline{R}_P - \underline{R}_Q) \times \underline{F}(A, B) + \underline{L}^P(A, B), \quad (9)$$

где вектор  $\underline{R}_Q$  определяет положение опорной точки  $Q$ , вектор  $\underline{R}_P$  определяет положение точки приведения  $P$ . Опорная точка  $Q$  может выбираться произвольно, но она должна быть фиксирована (неподвижна). Первое слагаемое в правой части формулы (9) называется моментом силы. Вектор  $\underline{L}^P(A, B)$  называется собственно моментом. Он зависит от выбора точки приведения  $P$ , но не зависит от выбора опорной точки  $Q$ . Собственно момент  $\underline{L}^P(A, B)$  – это реакция тела  $B$  на повороты тела  $A$  вокруг точки приведения  $P$ .

Полный момент  $\underline{M}^Q(A, B)$  по определению не зависит от выбора точки приведения. Отсюда следует, что при изменении точки приведения (например,  $S$  вместо  $P$ ) собственно момент меняется так, чтобы полный момент  $\underline{M}^Q(A, B)$  не изменился:

$$\underline{L}^S(A, B) = (\underline{R}_P - \underline{R}_S) \times \underline{F}(A, B) + \underline{L}^P(A, B). \quad (10)$$

### Уравнения баланса в механике Эйлера

В механике Ньютона уравнения балансов количества движения, кинетического момента и энергии системы материальных точек являются следствием второго закона Ньютона. В механике Эйлера, где рассматривается движение частиц, обладающих вращательными степенями свободы и внутренней структурой, все уравнения баланса – независимые законы [10]. Ниже сформулированы уравнения баланса, справедливые для закрытых (не обменивающихся массой со своим окружением), замкнутых (не обменивающихся энергией со своим окружением) тел.

*Уравнение баланса количества движения.* Скорость изменения количества движения тела  $A$  равна силе, действующей на тело  $A$  со стороны его окружения:

$$\underline{K}_1(A) = \underline{F}(A, A^e). \quad (11)$$

*Уравнение баланса кинетического момента.* Скорость изменения кинетического момента тела  $A$ , вычисленного относительно опорной точки  $Q$ , равна моменту, действующему на тело  $A$  со стороны его окружения, вычисленному относительно той же опорной точки  $Q$ :

$$\bullet \quad \underline{K}_2^Q(A) = \underline{M}^Q(A, A^e). \quad (12)$$

*Уравнение баланса энергии.* Скорость изменения полной энергии тела  $A$  равна мощности  $N(A, A^e)$  внешних воздействий на тело  $A$  [10]:

$$\bullet \quad \dot{E}(A) = N(A, A^e). \quad (13)$$

Полная энергия тела  $E(A)$  представляет собой сумму кинетической и внутренней энергии:  $E(A) = K(A) + U(A)$ . Мощностью внешних воздействий на тело  $A$ , состоящее из тел-точек  $A_i$ , называется билинейная форма скоростей и воздействий [10]

$$N(A, A^e) = \sum_i \left( \underline{F}(A_i, A^e) \cdot \underline{v}_i + \underline{L}(A_i, A^e) \cdot \underline{\omega}_i \right). \quad (14)$$

### 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  $\underline{\underline{\Phi}}_1$ ,  $\underline{\underline{\Phi}}_2$ ; 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-

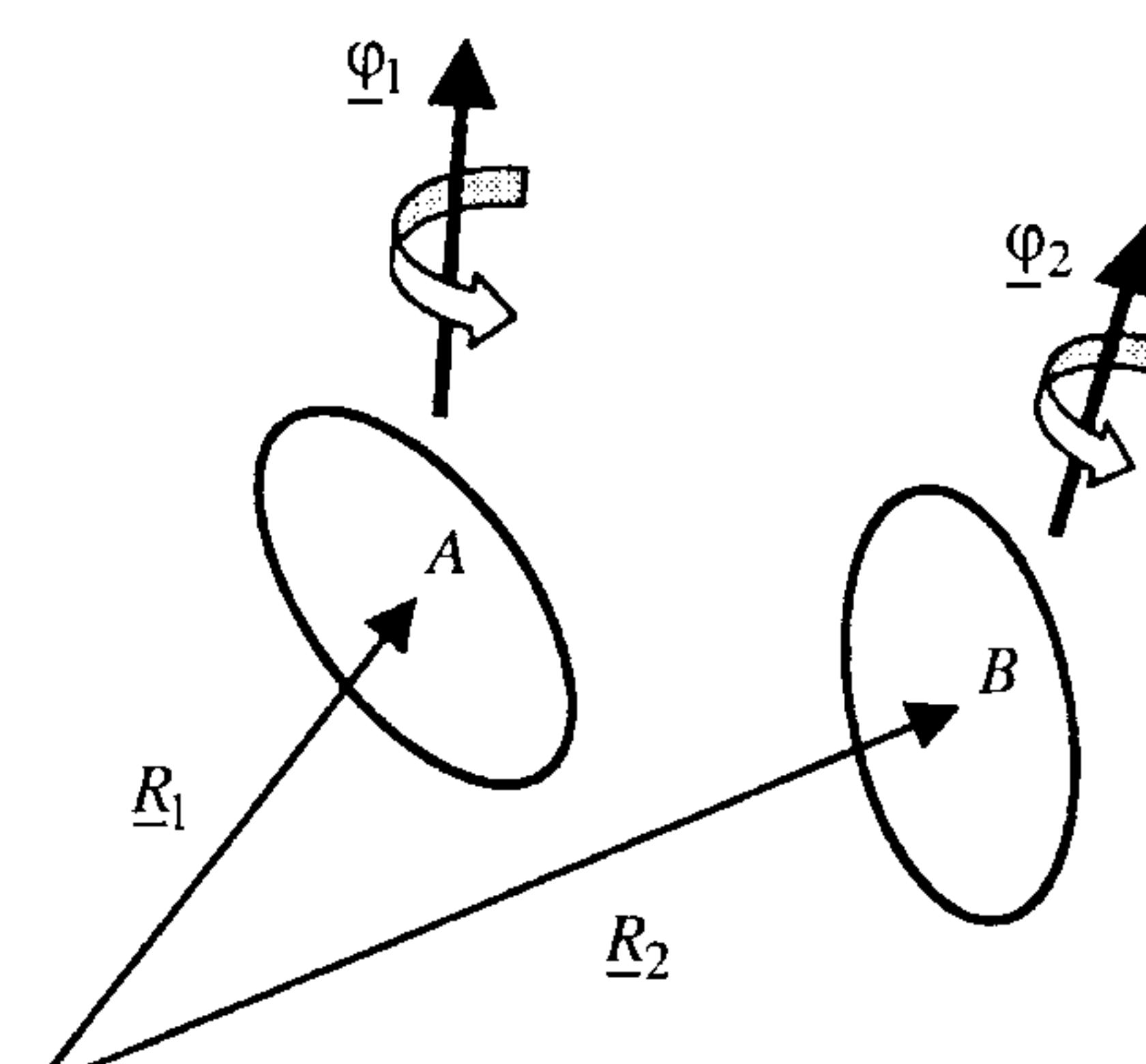


Рис. 1. Система двух тел-точек

точки  $A$ , тела-точки  $B$  и системы, состоящей из обоих тел-точек:

$$\begin{aligned}\dot{\underline{K}}_1(A) &= \dot{\underline{F}}_1 + \dot{\underline{F}}_1^e, \quad \dot{\underline{K}}_2(A) = \dot{\underline{L}}_1 + \dot{\underline{L}}_1^e, \\ \dot{\underline{K}}_1(B) &= \dot{\underline{F}}_2 + \dot{\underline{F}}_2^e, \quad \dot{\underline{K}}_2(B) = \dot{\underline{L}}_2 + \dot{\underline{L}}_2^e, \\ [\dot{\underline{K}}_1(A) + \dot{\underline{K}}_1(B)] &= \dot{\underline{F}}_1^e + \dot{\underline{F}}_2^e, \quad (15)\end{aligned}$$

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

Следствием уравнений (15) стал третий закон Ньютона для сил и аналог третьего закона Ньютона для моментов [10]:

$$\begin{aligned}\dot{\underline{F}}_1 + \dot{\underline{F}}_2 &= 0, \\ \dot{\underline{R}}_1 \times \dot{\underline{F}}_1 + \dot{\underline{L}}_1 + \dot{\underline{R}}_2 \times \dot{\underline{F}}_2 + \dot{\underline{L}}_2 &= 0. \quad (16)\end{aligned}$$

### Приведенное уравнение баланса энергии для системы двух тел-точек

Запишем уравнение баланса энергии для системы, состоящей из двух тел-точек [10]:

$$\begin{aligned}[\dot{K}(A) + \dot{K}(B) + U] &= \\ = \dot{\underline{F}}_1^e \cdot \dot{\underline{v}}_1 + \dot{\underline{L}}_1^e \cdot \dot{\underline{\omega}}_1 + \dot{\underline{F}}_2^e \cdot \dot{\underline{v}}_2 + \dot{\underline{L}}_2^e \cdot \dot{\underline{\omega}}_2, & (17)\end{aligned}$$

где  $U$  – внутренняя энергия системы (энергия взаимодействия тел-точек  $A$  и  $B$ ). Принимая во внимание уравнения движения (15), уравнение баланса энергии (17) можно преобразовать к виду

$$\dot{U} = -\dot{\underline{F}}_1 \cdot \dot{\underline{v}}_1 - \dot{\underline{L}}_1 \cdot \dot{\underline{\omega}}_1 - \dot{\underline{F}}_2 \cdot \dot{\underline{v}}_2 - \dot{\underline{L}}_2 \cdot \dot{\underline{\omega}}_2. \quad (18)$$

В механике сплошных сред уравнение, аналогичное (18), называется приведенным уравнением баланса энергии. Сохраним эту терминологию и для дискретной системы. Введем обозначения:

$$\underline{R} = \underline{R}_2 - \underline{R}_1, \quad \underline{F} = \underline{F}_1 = -\underline{F}_2, \quad (19)$$

$$\underline{M}^C = \underline{L}_1 - \frac{1}{2} \underline{R} \times \underline{F}_1 = -\underline{L}_2 - \frac{1}{2} \underline{R} \times \underline{F}_2.$$

Здесь  $\underline{M}^C$  имеет смысл момента, действующего на тело-точку  $A$  со стороны тела-точки  $B$ , вычисленного относительно середины отрезка  $C$ , соединяющего тела-точки (отрезка  $AB$ ). С учетом обозначений (19) приведенное уравнение баланса энергии (18) записывается так:

$$\begin{aligned}\dot{U} &= \dot{\underline{F}} \cdot \left[ \dot{\underline{R}} - \frac{1}{2} (\dot{\underline{\omega}}_1 + \dot{\underline{\omega}}_2) \times \dot{\underline{R}} \right] + \\ &+ \dot{\underline{M}}^C \cdot (\dot{\underline{\omega}}_2 - \dot{\underline{\omega}}_1) \quad (20)\end{aligned}$$

### 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  $\dot{\underline{\omega}}_1, \dot{\underline{\omega}}_2$  в виде

$$\begin{aligned}\underline{R} &= R \underline{e}_R(\theta), \quad \dot{\underline{\omega}}_1 = \dot{\varphi}_1 \underline{k}, \quad \dot{\underline{\omega}}_2 = \dot{\varphi}_2 \underline{k}, \\ \underline{e}_R(\theta) &= i \cos \theta + j \sin \theta,\end{aligned} \quad (21)$$

где  $i, j, k$  – орты декартовой системы координат.

Введем в рассмотрение тензор поворота на угол  $(\dot{\varphi}_1 + \dot{\varphi}_2)/2$  вокруг вектора  $\underline{k}$ , обозначив его  $\underline{P} = \underline{P}(\underline{k}(\dot{\varphi}_1 + \dot{\varphi}_2)/2)$ . Введем в рассмотрение также векторы  $\underline{\varepsilon}$  и  $\underline{\kappa}$ :

$$\underline{\varepsilon} = \underline{P}^T \cdot \dot{\underline{R}}, \quad \underline{\kappa} = (\dot{\varphi}_2 - \dot{\varphi}_1) \underline{k}. \quad (22)$$

Нетрудно показать, что в случае плоского движения тел-точек с учетом обозначений (21), (22) приведенное уравнение баланса энергии (20) можно переписать в форме

$$\begin{aligned}\dot{U} &= \dot{\underline{F}}_* \cdot \dot{\underline{\varepsilon}} + \dot{\underline{M}}_* \cdot \dot{\underline{\kappa}}, \quad \dot{\underline{F}}_* = \underline{P}^T \cdot \dot{\underline{F}}, \\ \dot{\underline{M}}_* &= \underline{P}^T \cdot \dot{\underline{M}}^C = \dot{\underline{M}}^C.\end{aligned} \quad (23)$$

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

$$\dot{\underline{F}}_* = \frac{\partial U}{\partial \dot{\underline{\varepsilon}}}, \quad \dot{\underline{M}}_* = \frac{\partial U}{\partial \dot{\underline{\kappa}}}. \quad (24)$$

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

$$\dot{\underline{\varepsilon}} = R \dot{\underline{e}}_R(\gamma), \quad \dot{\underline{\kappa}} = \kappa \underline{k}, \quad \dot{\underline{e}}_R(\gamma) = i \cos \gamma + j \sin \gamma, \quad (25)$$

$$\gamma = \theta - (\dot{\varphi}_1 + \dot{\varphi}_2)/2, \quad \kappa = \dot{\varphi}_2 - \dot{\varphi}_1.$$

Величина  $R$  характеризует расстояние между телами-точками в актуальной конфигурации. Угол  $\gamma$  представляет собой разность между углом  $\theta$ , определяющим направление прямой, соединяю-



щей тела-точки, и углом  $(\varphi_1 + \varphi_2)/2$ , характеризующим ориентацию тел-точек; в механике сплошных сред аналог угла  $\gamma$  называется углом сдвига. Угол  $\kappa$  характеризует относительный поворот тел-точек.

Перепишем соотношения Коши – Грина (24) в скалярной форме. В цилиндрической системе координат выражения для векторов силы и момента имеют вид

$$\underline{F} = F_R \underline{e}_R(\theta) + F_\theta \underline{e}_\theta(\theta), \quad \underline{M}^C = M^C \underline{k}, \quad (26)$$

где радиальная  $F_R$  и поперечная  $F_\theta$  составляющие вектора силы и величина вектора момента  $M^C$  вычисляются по формулам

$$F_R = \frac{\partial U}{\partial R}, \quad F_\theta = \frac{1}{R} \frac{\partial U}{\partial \gamma}, \quad M^C = \frac{\partial U}{\partial \kappa}. \quad (27)$$

Если задана внутренняя энергия системы двух тел-точек  $U$  как функция мер деформации  $R, \gamma, \kappa$ , формулы (26), (27) позволяют вычислить векторы силы и момента. Таким образом, задача описания парных силового и моментного взаимодействий 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, то крайне трудно непосредственно описать их внутреннюю структуру. 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:

$$U(R, \gamma, \kappa) = \Pi_0(R) + \Pi_1(R) \sin(n\gamma) \sin(n\kappa/2). \quad (28)$$

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  $R$ . Параметр  $n$  отражает тип решетки. Напри-

мер, для частиц, образующих квадратную решетку,  $n = 4$ ; треугольную –  $n = 6$ ; шестиугольную в плоскости (структуре графита) –  $n = 3$ .

### Описание взаимодействия частиц, образующих шестиугольную решетку в плоскости

Ниже исследуется взаимодействие частиц, внутренняя структура которых соответствует геометрии слоя графита (шестиугольной решетки в плоскости). Атом, находящийся в узле шестиугольной решетки, взаимодействует с тремя атомами первой координационной сферы, причем валентные связи расположены под углом  $120^\circ$  друг к другу. Следовательно, частица, моделирующая атом, должна иметь такую структуру, чтобы при повороте на угол, кратный  $120^\circ$ , она переходила бы в самое себя. Простейшей частицей, обладающей таким свойством, является совокупность трех жестко связанных между собой материальных точек, расположенных в углах равностороннего треугольника. Размер частицы характеризуется параметром  $a$ , определяющим расстояние от центра треугольника до его вершины. Предполагается, что  $a$  существенно меньше межатомного расстояния.

Итак, рассмотрим систему, состоящую из двух описанных выше частиц. Положение системы определяется радиусом-вектором  $\underline{R}_1$ , задающим положение центра частицы 1, радиусом-вектором  $\underline{R}$ , проведенным из центра частицы 1 в центр частицы 2, и углами поворота частиц  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$ . Поскольку взаимодействие частиц зависит только от их взаимного расположения и не зависит от перемещения системы как жесткого целого, без ущерба общности частицу 1 можно считать неподвижной. В этом случае  $\underline{R}_1 = 0$ ,  $\varphi_1 = 0$ , и актуальная конфигурация системы полностью задается тремя скалярными величинами: расстоянием между центрами частиц  $R = |\underline{R}|$ , полярным углом  $\theta$ , определяющим направление вектора  $\underline{R}$ , и углом поворота  $\varphi = \varphi_2$ .

На рис. 2 представлены отсчетная и актуальная конфигурации системы: отсчетная соответствует значениям  $R = R_0$ ,  $\theta = 0$ ,  $\varphi = 0$ , актуальная – произвольным значениям  $R$ ,  $\theta$  и  $\varphi$ . Векторы деформации (25) в рассматриваемой задаче выглядят так:

$$\begin{aligned} \underline{\varepsilon} &= R(i \cos \gamma + j \sin \gamma), \quad \gamma = \theta - \varphi/2, \quad \underline{k} = \underline{k} \\ \kappa &= \varphi. \end{aligned} \quad (29)$$

Предполагается, что каждая точка частицы 1 взаимодействует с каждой точкой частицы 2. Вза-

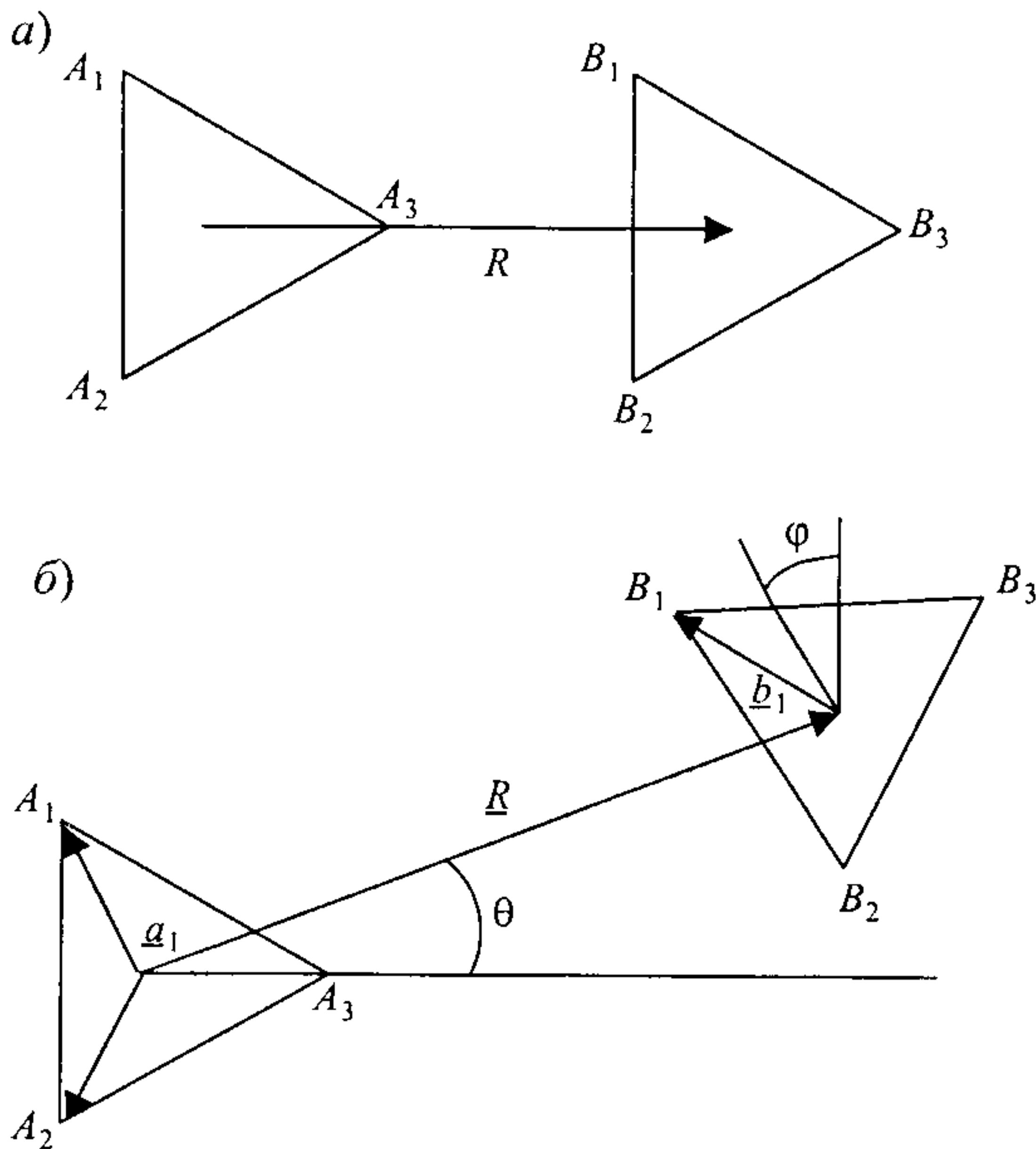


Рис. 2. Положения системы: отсчетное (а) и актуальное (б)

имодействие между точками, находящимися на расстоянии  $r$ , описывается потенциалом Леннарда – Джонса

$$\Pi(r) = D \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right], \quad (30)$$

где  $D$  и  $r_0$  – энергия связи и равновесное расстояние. Соответствующая сила взаимодействия  $F(r) = -\Pi'(r)$  имеет вид

$$F(r) = \frac{12D}{r_0} \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{13} - \left( \frac{r_0}{r} \right)^7 \right]. \quad (31)$$

Векторы силы и момента, характеризующие воздействие частицы 2 на частицу 1, вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} \underline{F}(R, \gamma, \kappa) &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \underline{F}_{ij}(R, \gamma, \kappa), \\ \underline{M}^C(R, \gamma, \kappa) &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \underline{M}_{ij}^C(R, \gamma, \kappa). \end{aligned} \quad (32)$$

Здесь  $\underline{F}_{ij}(R, \gamma, \kappa)$  и  $\underline{M}_{ij}^C(R, \gamma, \kappa)$  – векторы силы и момента, действующие со стороны  $j$ -й точки частицы 2 на  $i$ -ю точку частицы 1. Все векторы моментов вычислены относительно середины отрезка, соединяющего центры частиц 1 и 2. Векторы сил  $\underline{F}_{ij}(R, \gamma, \kappa)$  имеют следующий вид:

$$\underline{F}_{ij}(R, \gamma, \kappa) = F(r_{ij}) \underline{e}_{ij},$$

$$r_{ij} = |\underline{r}_{ij}|, \quad e_{ij} = \underline{r}_{ij} / r_{ij}, \quad (33)$$

где скалярная величина  $F(r_{ij})$  определяется формулой (31). Радиус-вектор  $\underline{r}_{ij}$ , проведенный из  $i$ -й точки частицы 1 в  $j$ -ю точку частицы 2, вычисляется следующим образом:

$$\underline{r}_{ij} = -\underline{a}_i + \underline{R}(R, \gamma, \kappa) + \underline{P}(\kappa) \cdot \underline{a}_j, \quad (34)$$

где  $\underline{P}(\kappa)$  – тензор поворота частицы 2;  $\underline{a}_i$  – радиус-вектор, определяющий положение  $i$ -й точки относительно центра частицы в отсчетной конфигурации (для обеих частиц векторы  $\underline{a}_i$  одинаковы,  $|\underline{a}_i| = a$ ). Векторы моментов  $\underline{M}_{ij}^C(R, \gamma, \kappa)$  вычисляются по формуле

$$\begin{aligned} \underline{M}_{ij}^C(R, \gamma, \kappa) &= \\ &= \left( \frac{1}{2} \underline{R}(R, \gamma, \kappa) + \underline{P}(\kappa) \cdot \underline{a}_j \right) \times \underline{F}_{ij}(R, \gamma, \kappa). \end{aligned} \quad (35)$$

Спроектировав вектор сил (32) на единичные векторы  $\underline{e}_R = \underline{R}/R$  и  $\underline{e}_0 = \underline{k} \times \underline{e}_R$ , получим соответственно продольную и поперечную составляющие вектора сил. Вектор момента (32) имеет одну составляющую, направленную по вектору  $\underline{k}$ . Таким образом, скалярные величины, характеризующие взаимодействие частиц, имеют вид

$$\begin{aligned} F_R(R, \gamma, \kappa) &= \underline{e}_R \cdot \underline{F}(R, \gamma, \kappa), \\ F_\theta(R, \gamma, \kappa) &= \underline{e}_\theta \cdot \underline{F}(R, \gamma, \kappa), \\ M^C(R, \gamma, \kappa) &= \underline{k} \cdot \underline{M}^C(R, \gamma, \kappa). \end{aligned} \quad (36)$$

Введем в рассмотрение малый безразмерный параметр  $\varepsilon = \frac{a}{r_0}$ . Разложим функции (36) в ряд по параметру  $\varepsilon$  в окрестности  $\varepsilon = 0$ . В результате получим следующие асимптотические приближения:

$$F_R(R, \gamma, \kappa) = f_0(R) + f_R(R) \sin(3\gamma) \sin(3\kappa/2),$$

$$F_\theta(R, \gamma, \kappa) = f_0(R) \cos(3\gamma) \sin(3\kappa/2), \quad (37)$$

$$M^C(R, \gamma, \kappa) = M(R) \sin(3\gamma) \cos(3\kappa/2),$$

где функции  $f_0(R)$ ,  $f_R(R)$ ,  $f_\theta(R)$  и  $M(R)$  имеют вид

$$f_0(R) = \frac{108D}{r_0} \left[ -\left( \frac{r_0}{R} \right)^{13} + \left( \frac{r_0}{R} \right)^7 \right] +$$



$$\begin{aligned}
 & + \frac{1296D}{r_0} \left[ -7\left(\frac{r_0}{R}\right)^{15} + 2\left(\frac{r_0}{R}\right)^9 \right] \left(\frac{a}{r_0}\right)^2, \\
 f_R(R) &= \frac{2160D}{r_0} \left[ -14\left(\frac{r_0}{R}\right)^{16} + 3\left(\frac{r_0}{R}\right)^{10} \right] \left(\frac{a}{r_0}\right)^3, \quad (38) \\
 f_\theta(R) &= \frac{432D}{r_0} \left[ -14\left(\frac{r_0}{R}\right)^{16} + 5\left(\frac{r_0}{R}\right)^{10} \right] \left(\frac{a}{r_0}\right)^3, \\
 M(R) &= 216D \left[ -14\left(\frac{r_0}{R}\right)^{15} + 5\left(\frac{r_0}{R}\right)^9 \right] \left(\frac{a}{r_0}\right)^3.
 \end{aligned}$$

Формулы (37), (38) записаны с асимптотической ошибкой порядка  $O(\varepsilon^4)$ . Заметим, что при учете членов более высокого порядка малости в выражениях (37) появляются высшие гармоники.

Энергия взаимодействия частиц 1 и 2 вычисляется по формуле

$$U(R, \gamma, \kappa) = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 U_{ij}(R, \gamma, \kappa). \quad (39)$$

Разложим функцию (39) в ряд по параметру  $\varepsilon$  в окрестности  $\varepsilon = 0$ . В результате получим асимптотическое приближение

$$U(R, \gamma, \kappa) = \Pi_0(R) + \Pi_1(R) \sin(3\gamma) \sin(3\kappa/2),$$

$$\begin{aligned}
 \Pi_0(R) &= 9D \left[ \left(\frac{r_0}{R}\right)^{12} - 2\left(\frac{r_0}{R}\right)^6 \right] + \\
 & + 324D \left[ 2\left(\frac{r_0}{R}\right)^{14} - \left(\frac{r_0}{R}\right)^8 \right] \left(\frac{a}{r_0}\right)^2, \quad (40) \\
 \Pi_1(R) &= 144D \left[ -14\left(\frac{r_0}{R}\right)^{15} + 5\left(\frac{r_0}{R}\right)^9 \right] \left(\frac{a}{r_0}\right)^3.
 \end{aligned}$$

Потенциал взаимодействия (40) имеет такую же структуру, как и (28). Заметим, что подстановка выражений (40) в соотношения (27) дает формулы для составляющих силы и момента (37), (38), что является подтверждением правильности полученных выше результатов.

### Обсуждение результатов

Потенциал (40) легко обобщается на случай частиц общего вида, обладающих симметрией  $n$ -го порядка и имеющих характерный размер  $a$ :

$$\begin{aligned}
 U(R, \gamma, \kappa) &= \Pi_0(R) + \Pi_1(R) \sin(n\gamma) \sin(n\kappa/2), \\
 \Pi_0(R) &= D_0 \left[ \left(\frac{r_0}{R}\right)^{12} - 2\left(\frac{r_0}{R}\right)^6 \right] + \\
 & + D_2 \left[ \left(\frac{r_2}{R}\right)^{12} - 2\left(\frac{r_2}{R}\right)^6 \right] \left(\frac{r_2}{R}\right)^{n-1} \left(\frac{a}{r_2}\right)^{n-1}, \quad (41) \\
 \Pi_1(R) &= D_1 \left[ \left(\frac{r_1}{R}\right)^{12} - 2\left(\frac{r_1}{R}\right)^6 \right] \left(\frac{r_1}{R}\right)^n \left(\frac{a}{r_1}\right)^n.
 \end{aligned}$$

Заметим, что второе слагаемое в выражении для функции  $\Pi_0(R)$  не оказывает существенного влияния на ее вид и поэтому может быть опущено. В результате потенциал (41) примет вид

$$\begin{aligned}
 U(R, \gamma, \kappa) &= D_0 \left[ \left(\frac{r_0}{R}\right)^{12} - 2\left(\frac{r_0}{R}\right)^6 \right] + \\
 & + \tilde{D}_1 \left[ \left(\frac{r_1}{R}\right)^{12} - 2\left(\frac{r_1}{R}\right)^6 \right] \left(\frac{r_1}{R}\right)^n \times \\
 & \times \sin(n\gamma) \sin(n\kappa/2), \quad (42)
 \end{aligned}$$

где константа  $\tilde{D}_1$  представляет собой малую величину порядка  $D_0 \left(\frac{a}{r_1}\right)^n$  и может быть как положительной, так и отрицательной, а  $r_1$  является величиной, сравнимой с  $r_0$ . Потенциал (42) содержит четыре параметра:  $D_0$ ,  $\tilde{D}_1$ ,  $r_0$ ,  $r_1$ . Эти параметры можно определить по экспериментальным данным, относящимся к микроскопическим характеристикам вещества, таким, как межатомные расстояния и жесткости межатомных связей. Жесткости межатомных связей можно определить также из макроэкспериментов, связав их с модулем Юнга и коэффициентом Пуассона. Потенциал (42) является моментным потенциалом, обобщающим потенциал Леннарда – Джонса на случай частиц с вращательными степенями свободы. Аналогичным образом можно любой парный потенциал распространить на случай вращающихся частиц.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tersoff J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems // Phys. Rev. B. 1988. Vol. 37. P. 6991–7000.
2. Brenner D.W. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 42. P. 9458–9471.
3. Erkoc S. Empirical many-body potential energy functions used in computer simulations of condensed matter properties // Physics Reports. 1997. Vol. 278, № 2. P. 80–105.
4. 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.
5. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Фирсова А.Д. Учет моментного взаимодействия при расчете изгибной жесткости наноструктур // ДАН. 2003. Т. 391, № 6. С. 764–768.
6. Жилин П.А. Основные уравнения неклассической теории оболочек // Труды ЛПИ. 1982. Вып. 386. С. 29–46.
7. Альтенбах Х., Жилин П.А. Общая теория упругих простых оболочек // Успехи механики Advances in mechanics (Warszawa, Polska). 1988. № 4. С. 107–148.
8. Жилин П.А., Сергеев А.Д., Товстик Т.П. Нелинейная теория стержней: статика, динамика, устойчивость // Анализ и синтез нелинейных механических колебательных систем: Тр. XXIV Всесоюз. школы-семинара. СПб., 1996, 1997. С. 313–337.
9. Grekova E., Zhilin P. Basic equations of Kelvin's medium and analogy with ferromagnetics // Journal of elasticity. 2001. Vol. 64. P. 29–70.
10. Жилин П.А. Теоретическая механика. Фундаментальные законы механики: Учеб. пособие. СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2003. 340 с.