

УДК 539.3

© 2003 г. **Е.А. ИВАНОВА, А.М. КРИВЦОВ, Н.Ф. МОРОЗОВ,
А.Д. ФИРSOVA**

ОПИСАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ УПАКОВКИ ЧАСТИЦ С УЧЕТОМ МОМЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Парные потенциалы взаимодействия, такие, как потенциал Леннарда – Джонса, Ми или Морзе, широко применяются для моделирования молекулярных систем. Они имеют ясный физический смысл, и, несмотря на свою простоту, позволяют на качественном уровне описать свойства многих веществ. Однако хорошо известно, что они имеют принципиальные недостатки, не позволяющие использовать их более широко. Одним из важнейших недостатков является то, что парные потенциалы, как правило, могут обеспечить устойчивость только плотноупакованных кристаллических решеток. В двумерном случае это треугольная решетка, в трехмерном – гранецентрированная кубическая или какая-либо аналогичная ей решетка. Решетки с более низкой плотностью упаковки, такие как простая кубическая решетка, оказываются неустойчивыми и в двумерном и в трехмерном случае для большинства парных потенциалов. Причина этого состоит в том, что расстояние между вторыми соседями (по диагоналям куба) оказывается на неустойчивом участке диаграммы сила-расстояние, т.е. при увеличении расстояния возникает не возвращающая, а дестабилизирующая сила. Это приводит к тому, что, например, деформирование квадратной ячейки в ромбическую, оказывается энергетически выгодным. Также неустойчивыми оказываются структуры, характерные для ковалентных кристаллов – шестиугольная решетка на плоскости (структура графита) и структура алмаза в пространстве. Традиционное решение этой проблемы состоит в применении многочастичных потенциалов взаимодействия [1, 2]. Подобные потенциалы зависят от углов между связями, что позволяет сделать устойчивыми структуры с низкой плотностью заполнения. Однако форма подобных потенциалов оказывается весьма сложной, а физический смысл входящих в них констант – туманным. Константы вычисляются из соответствия физическим свойствам моделируемых веществ, однако при переходе от одной кристаллической структуры к другой (скажем, графит – алмаз) приходится полностью менять потенциал взаимодействия.

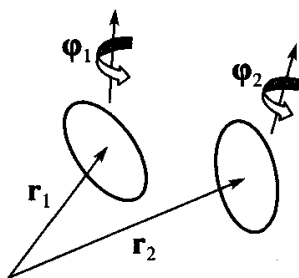
Альтернативный подход состоит в учете моментального вклада в межатомное взаимодействие. Известно, что ковалентные связи являются направленными, что свидетельствует о возможности передачи ими моментных взаимодействий. Необходимость учета моментного взаимодействия давно подтверждена для описания полимеров, где без учета торсионного взаимодействия (взаимодействия, отвечающего повороту вокруг направления связи) невозможно адекватно описать структурные свойства полимерных молекул. В данной работе будет показано, что учет парного моментного взаимодействия (дополнительно к парному силовому) может обеспечить устойчивость кристалли-

ческих структур с низкой плотностью упаковки. Моментное взаимодействие имеет ясный физический смысл, что делает его более предпочтительным, чем многочастичное взаимодействие.

Однако в общем случае моментное взаимодействие также весьма сложно. Поэтому необходима механическая модель моментного взаимодействия, достаточно простая, чтобы возможно было ясное аналитическое описание, и вместе с тем позволяющая обеспечить устойчивость рассматриваемых кристаллических решеток. В качестве такой модели могут выступать группы частиц, жестко связанных между собой и имеющих симметрию, свойственную данной кристаллической структуре. Каждая частица представляет собой материальную точку, взаимодействующую с частицами другой группы с помощью парного силового взаимодействия. Однако суммарное взаимодействие между группами частиц уже будет содержать и силовую и моментную составляющие. Полученный таким образом закон взаимодействия может использоваться для описания взаимодействия между атомами в кристалле с низкой плотностью заполнения. Отметим, что при подобном подходе число параметров в модели оказывается очень небольшим – это параметры парного силового взаимодействия и параметры, описывающие геометрию группы жестко связанных частиц.

Представляется, что подобный подход позволит смоделировать большинство существующих кристаллических структур и, более того, сделает возможным описание перехода от одной структуры к другой без изменения закона взаимодействия.

Уравнения континуальной теории упругости сред с вращательными степенями свободы хорошо известны (см., например [3]). В данной работе разрабатывается метод описания кристаллической упаковки частиц, позволяющий получить для нее в длинноволновом приближении [4] уравнения линейной моментной теории упругости. При этом используется подход, предложенный в работах [5, 6] для безмоментного случая. При описании моментного взаимодействия между частицами, находящимися в узлах кристаллической решетки, наибольшую трудность составляет введение мер деформации и получение определяющих уравнений. Действительно, при чисто силовом взаимодействии частиц сила является центральной, а ее величина зависит от расстояния между частицами. При учете моментного взаимодействия ситуация существенно усложняется. Вектор силы и вектор момента могут иметь произвольные направления; причем оба вектора зависят и от взаимного расположения частиц, и от их взаимной ориентации. Ниже при определении векторов деформации и получении определяющих уравнений для двух взаимодействующих частиц используется подход, аналогичный применяемому в механике сплошных сред при построении моментных теорий [7–10]. Используемый подход позволил показать для частиц общего вида (без конкретизации их структуры), что в случае длинноволнового приближения динамика кристаллической решетки описывается уравнениями макроскопической моментной теории упругости. В работе получены выражения тензоров жесткости четвертого ранга, характеризующих упругие свойства кристаллической решетки, через тензоры жесткости второго ранга, характеризующие жесткости межатомных связей, и векторы, задающие геометрию решетки. В качестве примера исследована устойчивость квадратной кристаллической решетки с учетом моментного взаимодействия, позволяющего обеспечить стабилизацию кристалла.



Фиг. 1

Рассмотрим две частицы, моделирующие атомы кристаллической решетки. Будем считать, что взаимодействие этих частиц зависит не только от их взаимного расположения в пространстве, но и от их взаимной ориентации. Взаимодействие между частицами характеризуется вектором силы и вектором момента. Определим зависимость силы и момента от взаимного расположения и ориентации частиц, соблюдая полную аналогию с тем, как это делается в теории оболочек и стержней [7, 9]. Рассмотрим две взаимодействующие частицы (фиг. 1). В актуальной конфигурации положение частиц задается радиус-векторами \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 , а ориентация частиц – векторами поворотов $\boldsymbol{\varphi}_1$, $\boldsymbol{\varphi}_2$. В равновесном положении $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_0$, $\boldsymbol{\varphi}_1 = 0$, $\boldsymbol{\varphi}_2 = 0$. Введем следующие обозначения: \mathbf{F}_1 , \mathbf{M}_1 – сила и момент, действующие на частицу 1 со стороны частицы 2; \mathbf{F}_2 , \mathbf{M}_2 – сила и момент, действующие на частицу 2 со стороны частицы 1; \mathbf{F}_1^e , \mathbf{M}_1^e , \mathbf{F}_2^e , \mathbf{M}_2^e – внешние воздействия на частицы 1 и 2 соответственно. Моменты \mathbf{M}_1 и \mathbf{M}_1^e вычислены относительно частицы 1, моменты \mathbf{M}_2 и \mathbf{M}_2^e вычислены относительно частицы 2. Следуя моментной теории упругости [11], запишем уравнения движения частицы 1, частицы 2 и системы, состоящей из обеих частиц:

$$\begin{aligned} m_1 \dot{\mathbf{v}}_1 &= \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_1^e, & (\boldsymbol{\theta}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_1) \dot{} &= \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_1^e \\ m_2 \dot{\mathbf{v}}_2 &= \mathbf{F}_2 + \mathbf{F}_2^e, & (\boldsymbol{\theta}_2 \cdot \boldsymbol{\omega}_2) \dot{} &= \mathbf{M}_2 + \mathbf{M}_2^e \\ (m_1 \mathbf{v}_1 + m_2 \mathbf{v}_2) \dot{} &= \mathbf{F}_1^e + \mathbf{F}_2^e \\ (\mathbf{r}_1 \times m_1 \mathbf{v}_1 + \boldsymbol{\theta}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_1 + \mathbf{r}_2 \times m_2 \mathbf{v}_2 + \boldsymbol{\theta}_2 \cdot \boldsymbol{\omega}_2) \dot{} &= \mathbf{r}_1 \times \mathbf{F}_1^e + \mathbf{M}_1^e + \mathbf{r}_2 \times \mathbf{F}_2^e + \mathbf{M}_2^e \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь m_1 , m_2 , $\boldsymbol{\theta}_1$, $\boldsymbol{\theta}_2$ – массы и тензоры инерции частиц; \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 , $\boldsymbol{\omega}_1$, $\boldsymbol{\omega}_2$ – их линейные и угловые скорости. Следствием уравнений (1) является третий закон Ньютона для сил и аналог третьего закона Ньютона для моментов

$$\mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2 = 0, \quad \mathbf{r}_1 \times \mathbf{F}_1 + \mathbf{M}_1 + \mathbf{r}_2 \times \mathbf{F}_2 + \mathbf{M}_2 = 0 \quad (2)$$

Запишем уравнение баланса энергии для системы, состоящей из двух частиц:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2} [m_1 \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_1 + \boldsymbol{\omega}_1 \cdot \boldsymbol{\theta}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_1 + m_2 \mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{v}_2 + \boldsymbol{\omega}_2 \cdot \boldsymbol{\theta}_2 \cdot \boldsymbol{\omega}_2] + U \right) \dot{} &= \\ = \mathbf{F}_1^e \cdot \mathbf{v}_1 + \mathbf{M}_1^e \cdot \boldsymbol{\omega}_1 + \mathbf{F}_2^e \cdot \mathbf{v}_2 + \mathbf{M}_2^e \cdot \boldsymbol{\omega}_2 \end{aligned} \quad (3)$$

где U – внутренняя энергия системы (энергия взаимодействия частиц 1 и 2). Предполагая смещения из положения равновесия малыми величинами и принимая во вни-

мание уравнения (1), (2), уравнение баланса энергии (3) можно привести к виду

$$\begin{aligned} \dot{U} &= \mathbf{F} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{M} \cdot \dot{\boldsymbol{\kappa}}, \quad \mathbf{F} = \mathbf{F}_1 = -\mathbf{F}_2 \\ \mathbf{M} &= \mathbf{M}_1 + \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times \mathbf{F}_1 = -\mathbf{M}_2 + -\frac{1}{2}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \times \mathbf{F}_2 \\ \boldsymbol{\varepsilon} &= \mathbf{r} - \mathbf{r}_0 + \frac{1}{2}\mathbf{r}_0 \times (\boldsymbol{\varphi}_1 + \boldsymbol{\varphi}_2), \quad \boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{\varphi}_2 - \boldsymbol{\varphi}_1, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь \mathbf{M} имеем смысл момента, действующего на частицу 1 со стороны частицы 2, вычисленного относительно середины отрезка, соединяющего эти частицы. Векторы $\boldsymbol{\varepsilon}$ и $\boldsymbol{\kappa}$, на которых совершают работу вектор силы и вектор момента (см. формулы (4)), назовем векторами деформации. Далее будем рассматривать упругое деформирование системы. Будем предполагать, что внутренняя энергия, вектор силы и вектор момента зависят только от векторов деформации и не зависят от скоростей. Тогда

$$\mathbf{F} = \partial U / \partial \boldsymbol{\varepsilon}, \quad \mathbf{M} = \partial U / \partial \boldsymbol{\kappa} \quad (5)$$

Поскольку деформации считаются малыми, для внутренней энергии можно принять следующую аппроксимацию:

$$U = \mathbf{F}^0 \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{M}^0 \cdot \boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\kappa} \quad (6)$$

Коэффициенты \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} называются тензорами жесткости, а \mathbf{F}^0 , \mathbf{M}^0 – начальными усилиями. В линейной теории тензоры жесткости – постоянные величины, причем тензоры \mathbf{A} и \mathbf{C} – симметричные, а тензор \mathbf{B} – произвольный. Согласно формулам (5), (6), вектор силы и вектор момента имеют вид:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^0 + \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\kappa}, \quad \mathbf{M} = \mathbf{M}^0 + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\kappa} \quad (7)$$

Исходя из теории симметрии тензорных величин [7], можно показать, что если внутренняя структура частиц такова, что в отсчетной конфигурации система симметрична относительно двух взаимно перпендикулярных плоскостей, тензор \mathbf{B} обращается в ноль. В этом случае выражения для силы и момента упрощаются:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^0 + \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}, \quad \mathbf{M} = \mathbf{M}^0 + \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\kappa} \quad (8)$$

Для большинства простейших кристаллических решеток указанная симметрия имеет место. Ниже при описании кристаллической упаковки частиц в рамках линейной теории упругости тензор \mathbf{B} будет считаться равным нулю и взаимодействие между частицами будет определяться формулами (8).

Альтернативная форма представления соотношений упругости. Выше при получении соотношений упругости использовался момент взаимодействия \mathbf{M} , вычисленный относительно середины отрезка, соединяющего взаимодействующие частицы. При этом тензоры жесткости \mathbf{B} , \mathbf{C} также имели смысл тензоров, вычисленных относительно середины отрезка, соединяющего частицы. Такой подход удобен с точки зрения применения теории симметрии для определения структуры тензоров жесткости. Однако, при выводе уравнений движения дискретной среды, удобнее использовать моменты взаимодействия, вычисленные относительно частиц. Поэтому ниже будут получены соотношения упругости с использованием момента взаимо-

действия \mathbf{M}_1 , характеризующего воздействие частицы 2 на частицу 1 и вычисленного относительно частицы 1. Итак, перепишем уравнение (4) в форме

$$\dot{U} = \mathbf{F}_1 \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_1 + \mathbf{M}_1 \cdot \dot{\boldsymbol{\kappa}}_1 \quad (9)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_1 = \mathbf{r} - \mathbf{r}_0 + \mathbf{r}_0 \times \boldsymbol{\varphi}_2, \quad \boldsymbol{\kappa}_1 = \boldsymbol{\varphi}_2 - \boldsymbol{\varphi}_1, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$$

Векторы $\boldsymbol{\varepsilon}_1$ и $\boldsymbol{\kappa}_2$, на которых совершают работу вектор силы \mathbf{F}_1 и вектор момента \mathbf{M}_1 , также, как и векторы $\boldsymbol{\varepsilon}$, $\boldsymbol{\kappa}$ (см. формулы (4)), называются векторами деформации. Согласно (9), соотношения упругости принимают вид

$$\mathbf{F}_1 = \partial U / \partial \boldsymbol{\varepsilon}_1, \quad \mathbf{M}_1 = \partial U / \partial \boldsymbol{\kappa}_1 \quad (10)$$

Считая деформации малыми, представим внутреннюю энергию в виде:

$$U = \tilde{\mathbf{F}}^0 \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_1 + \tilde{\mathbf{M}}^0 \cdot \boldsymbol{\kappa}_1 + \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}_1 \cdot \tilde{\mathbf{A}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_1 + \boldsymbol{\varepsilon}_1 \cdot \tilde{\mathbf{B}} \cdot \boldsymbol{\kappa}_1 + \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa}_1 \cdot \tilde{\mathbf{C}} \cdot \boldsymbol{\kappa}_1 \quad (11)$$

Тогда, согласно формулам (10), (11), векторы силы и момента имеют вид

$$\mathbf{F}_1 = \tilde{\mathbf{F}}^0 + \tilde{\mathbf{A}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_1 + \tilde{\mathbf{B}} \cdot \boldsymbol{\kappa}_1, \quad \mathbf{M}_1 = \tilde{\mathbf{M}}^0 + \boldsymbol{\varepsilon}_1 \cdot \tilde{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{C}} \cdot \boldsymbol{\kappa}_1 \quad (12)$$

Тензоры жесткости $\tilde{\mathbf{A}}$, $\tilde{\mathbf{B}}$, $\tilde{\mathbf{C}}$ и начальные усилия $\tilde{\mathbf{F}}^0$, $\tilde{\mathbf{M}}^0$ отличаются от тензоров жесткости \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} и начальных усилий \mathbf{F}^0 , \mathbf{M}^0 . Можно показать, что эти величины связаны между собой соотношениями

$$\tilde{\mathbf{F}}^0 = \mathbf{F}^0, \quad \tilde{\mathbf{M}}^0 = \mathbf{M}^0 + \frac{1}{2} \mathbf{r}_0 \times \mathbf{F}^0 \quad (13)$$

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A}, \quad \tilde{\mathbf{B}} = \mathbf{B} - \frac{1}{2} \mathbf{A} \times \mathbf{r}_0, \quad \tilde{\mathbf{C}} = \mathbf{C} - \frac{1}{4} \mathbf{B}^T \times \mathbf{r}_0 - \frac{1}{4} \mathbf{r}_0 \times \mathbf{A} \times \mathbf{r}_0$$

При введении понятий векторов деформации в системе двух взаимодействующих частиц использовался подход, аналогичный подходу, принятому в механике сплошной среды. Векторы деформации определялись как векторы, на которых совершают работу вектор силы и вектор момента. Однако следует подчеркнуть, что непосредственное использование соотношений континуальной механики применительно к дискретной системе не представляется возможным. Последнее связано с неоднозначностью понятий векторов усилий и деформаций в дискретной системе. Поясним это утверждение путем сравнения континуальной и дискретной модели. Поскольку система двух частиц представляет собой одномерную модель, сравнение следует проводить с теорией стержней. В теории стержней вектор силы \mathbf{F} и вектор момента \mathbf{M} в сечении стержня s определяются следующим образом. Мысленно разрежем стержень в сечении s . Векторы силы и момента моделируют воздействие на сечение s отброшенной части стержня. При этом вектор момента \mathbf{M} считается вычисленным относительно сечения s . В дискретной модели взаимодействующие точки не соприкасаются друг с другом, а находятся на расстоянии r_0 . Поэтому сечение s , относительно которого вычисляется вектор момента, однозначно ввести не удастся: этим сечением может быть любая точка в промежутке от 0 до r_0 . Значение вектора момента \mathbf{M} зависит от точки, относительно которой он вычисляется, и это в свою очередь влияет на значение вектора деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$ (см. формулы (4), (9)). Уравнение баланса энергии в линейной теории стержней [9] приводится к виду

$$\rho \dot{U} = \mathbf{F} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{M} \cdot \dot{\boldsymbol{\kappa}}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{u}' + \boldsymbol{\tau} \times \boldsymbol{\varphi}, \quad \boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{\varphi}' \quad (14)$$

Здесь ρU – плотность внутренней энергии, \mathbf{u} – вектор перемещения сечения s , $\boldsymbol{\varphi}$ – вектор поворота сечения s , $\boldsymbol{\tau}$ – единичный вектор касательной к оси недеформированного стержня в данной точке, $\boldsymbol{\varepsilon}$ – вектор деформации растяжения – сдвига, $\boldsymbol{\kappa}$ – вектор деформации изгиба – кручения. Заметим, что в теории стержней векторы деформации (14) представляют собой относительные деформации, а векторы деформации (4), (9), введенные выше для дискретной системы, являются абсолютными деформациями. Это противоречие устраняется путем деления выражений для $\boldsymbol{\varepsilon}$, $\boldsymbol{\kappa}$ в формулах (4), (9) на r_0 . Таким образом введенные выше векторы деформации дискретной модели (4), (9) имеют такую же структуру, как и векторы деформации в теории стержней (14). Однако попытка записать векторы деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$, $\boldsymbol{\kappa}$ для дискретной системы просто по аналогии с формулами (14) вызывает затруднения. Действительно, при переходе от континуальной модели к дискретной вектор \mathbf{u}' заменяется на разность $\mathbf{r} - \mathbf{r}_0$, вектор $\boldsymbol{\varphi}'$ заменяется на разность $\boldsymbol{\varphi}_2 - \boldsymbol{\varphi}_1$, орт касательной $\boldsymbol{\tau}$ – на \mathbf{r}_0 , но аналог вектора поворота сечения стержня $\boldsymbol{\varphi}$ в дискретной системе однозначно определить не удастся. Значение вектора $\boldsymbol{\varphi}$ в дискретной модели зависит от того, относительно какой точки вычислен момент взаимодействия частиц. Если момент вычислен относительно середины отрезка, соединяющего частицы, то аналогом вектора $\boldsymbol{\varphi}$ в дискретной модели является полусумма векторов поворота обеих частиц (см. формулы (4)). Если момент вычислен относительно частицы 1, то аналогом вектора $\boldsymbol{\varphi}$ в дискретной модели будет вектор поворота частицы 2 (см. формулы (9)). Следует отметить, что все перечисленные трудности возникают только в случае моментной теории. При чисто силовом взаимодействии аналогия между величинами, описывающими континуальную и дискретную модели, очевидна.

Рассматривается идеальная простая кристаллическая решетка. Решетку формируют частицы общего вида, взаимодействующие посредством сил и моментов (см. формулы (8)). Предполагается, что каждая частица взаимодействует с ограниченным числом соседей. Рассмотрим некоторую частицу, которую для удобства будем называть исходной. Пронумеруем все частицы, взаимодействующие с исходной. Исходной частице присвоим номер $\alpha = 0$, остальным: $\alpha \pm 1, \pm 2, \dots \pm N$. Нумерация производится таким образом, чтобы частицы, расположенные симметрично относительно исходной, имели индексы, противоположные по знаку. Обозначим \mathbf{a}_α – радиус-вектор, определяющий положение частицы с номером α относительно исходной частицы в отсчетной конфигурации. Очевидно, что $\mathbf{a}_{-\alpha} = -\mathbf{a}_\alpha$. Положение и ориентация частицы с номером α задаются вектором положения \mathbf{R}_α и вектором поворота $\boldsymbol{\varphi}_\alpha$. В отсчетном положении $\mathbf{R}_\alpha = \mathbf{r}_\alpha$, $\boldsymbol{\varphi}_\alpha = 0$. Обозначим $\mathbf{u}_\alpha = \mathbf{R}_\alpha - \mathbf{r}_\alpha$ – вектор перемещения частицы с номером α . При обозначении вектора положения, вектора перемещения и вектора поворота исходной частицы индекс 0 опускается. Предполагая перемещения и повороты малыми величинами, запишем уравнения динамики Эйлера для исходной частицы

$$m\ddot{\mathbf{u}} = \sum_{\alpha} \mathbf{F}_\alpha + \mathbf{f}_*, \quad \boldsymbol{\theta} \cdot \ddot{\boldsymbol{\varphi}} = \sum_{\alpha} \mathbf{M}_\alpha + \mathbf{m}_* \quad (15)$$

Здесь m и $\boldsymbol{\theta}$ – масса и тензор инерции исходной частицы; \mathbf{F}_α , \mathbf{M}_α – вектор силы и вектор момента, действующие на исходную частицу со стороны частицы с индексом α ; векторы \mathbf{f}_* и \mathbf{m}_* – внешние воздействия. Моменты \mathbf{M}_α и \mathbf{m}_* вычислены относительно исходной частицы.

Рассмотрим две взаимодействующие частицы; исходную частицу, положение которой определяется вектором \mathbf{r} , и частицу с индексом $(-\alpha)$, положение которой определяется вектором $\mathbf{r}_{-\alpha} = \mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha$. На исходную частицу со стороны частицы с индексом $(-\alpha)$ действуют сила $\mathbf{F}_{-\alpha}(\mathbf{r})$ и момент $\mathbf{M}_{-\alpha}(\mathbf{r})$ (момент вычислен относительно ис-

ходной частицы). По отношению к частице с индексом $(-\alpha)$ исходная частица является частицей с индексом (α) . Следовательно, на частицу с индексом $(-\alpha)$ со стороны исходной частицы действуют сила $\mathbf{F}_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha)$ и момент $\mathbf{M}_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha)$ (момент вычислен относительно частицы с индексом $(-\alpha)$). Согласно третьему закону Ньютона для сил и его аналогу для моментов (2), имеют место следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{-\alpha}(\mathbf{r}) + \mathbf{F}_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha) &= 0 \\ \mathbf{M}_{-\alpha}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}\mathbf{a}_\alpha \times \mathbf{F}_{-\alpha}(\mathbf{r}) + \mathbf{M}_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha) - \frac{1}{2}\mathbf{a}_\alpha \times \mathbf{F}_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha) &= 0 \end{aligned} \quad (16)$$

Будем считать, что \mathbf{F}_α , \mathbf{M}_α определены не только на дискретном множестве значений $\mathbf{r} \pm \mathbf{a}_\alpha$, но и на непрерывном \mathbf{r} , где \mathbf{r} определяет положение произвольной точки пространства. Как именно доопределяются функции $\mathbf{F}_\alpha(\mathbf{r})$, $\mathbf{M}_\alpha(\mathbf{r})$ – не имеет значения. Однако важно, чтобы эти функции были дифференцируемы и мало изменялись на промежутках порядка межатомных взаимодействий. Предполагая справедливость длинноволнового приближения (см. [4]), имеем

$$\mathbf{F}_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha) \approx \mathbf{F}_\alpha(\mathbf{r}) - \mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla \mathbf{F}_\alpha, \quad \mathbf{M}_\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{a}_\alpha) \approx \mathbf{M}_\alpha(\mathbf{r}) - \mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla \mathbf{M}_\alpha \quad (17)$$

Следствием формул (16), (17) являются соотношения

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{-\alpha}(\mathbf{r}) &\approx -\mathbf{F}_\alpha(\mathbf{r}) + \nabla \cdot \mathbf{a}_\alpha \mathbf{F}_\alpha \\ \mathbf{M}_{-\alpha}(\mathbf{r}) &\approx -\mathbf{M}_\alpha(\mathbf{r}) + \mathbf{a}_\alpha \times \mathbf{F}_\alpha(\mathbf{r}) + \nabla \cdot \mathbf{a}_\alpha (\mathbf{M}_\alpha - \mathbf{a}_\alpha \times \mathbf{F}_\alpha) \end{aligned} \quad (18)$$

Используя формулы (18), проведем следующие преобразования:

$$\begin{aligned} \sum_\alpha \mathbf{F}_\alpha &= \sum_\alpha \mathbf{F}_{-\alpha} = \frac{1}{2} \sum_\alpha (\mathbf{F}_\alpha + \mathbf{F}_{-\alpha}) = \nabla \cdot \frac{1}{2} \sum_\alpha \mathbf{a}_\alpha \mathbf{F}_\alpha \\ \sum_\alpha \mathbf{M}_\alpha &= \sum_\alpha \mathbf{M}_{-\alpha} = \frac{1}{2} \sum_\alpha (\mathbf{M}_\alpha + \mathbf{M}_{-\alpha}) = \left(\frac{1}{2} \sum_\alpha \mathbf{a}_\alpha \mathbf{F}_\alpha \right)_\times + \nabla \cdot \frac{1}{2} \sum_\alpha \mathbf{a}_\alpha (\mathbf{M}_\alpha - \mathbf{a}_\alpha \times \mathbf{F}_\alpha) \end{aligned} \quad (19)$$

Заметим, что разность $\mathbf{M}_\alpha - \mathbf{a}_\alpha \times \mathbf{F}_\alpha$ имеет смысл момента, действующего на исходную частицу со стороны частицы с индексом (α) , вычисленного относительно частицы с индексом (α) . Введем обозначения

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{1}{2V_*} \sum_\alpha \mathbf{a}_\alpha \mathbf{F}_\alpha, \quad \boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2V_*} \sum_\alpha \mathbf{a}_\alpha (\mathbf{M}_\alpha - \mathbf{a}_\alpha \times \mathbf{F}_\alpha) \quad (20)$$

Здесь V_* – объем элементарной ячейки. Тензор $\boldsymbol{\tau}$ будем называть тензором напряжений, а тензор $\boldsymbol{\mu}$ – тензором моментных напряжений. Введем также обозначения

$$\rho = \frac{1}{V_*} m, \quad \rho \boldsymbol{\vartheta} = \frac{1}{V_*} \boldsymbol{\theta}, \quad \mathbf{f} = \frac{1}{V_*} \mathbf{f}_*, \quad \mathbf{m} = \frac{1}{V_*} \mathbf{m}_* \quad (21)$$

Здесь ρ – массовая плотность, $\boldsymbol{\vartheta}$ – тензор инерции среды, приходящийся на единицу массы (или массовая плотность тензора инерции), \mathbf{f} – объемная плотность внешних сил, \mathbf{m} – объемная плотность внешних моментов. Используя соотношения (19) и обозначения (20), (21), перепишем уравнения движения рассматриваемой частицы (15) в виде

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f} = \rho \ddot{\mathbf{u}}, \quad \nabla \cdot \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\tau}_\times + \mathbf{m} = \rho \boldsymbol{\vartheta} \cdot \ddot{\boldsymbol{\phi}} \quad (22)$$

Отметим, что уравнения (22) по своей структуре совпадают с уравнениями динамики макроскопической моментной теории упругости.

Согласно формулам (20), тензор моментных напряжений выражается через векторы моментов \mathbf{M}_α , вычисленные относительно исходной частицы. Поэтому ниже используются соотношения упругости в форме (12):

$$\mathbf{F}_\alpha = \tilde{\mathbf{F}}_\alpha^0 + \tilde{\mathbf{A}}_\alpha \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_\alpha + \tilde{\mathbf{B}}_\alpha \cdot \boldsymbol{\kappa}_\alpha, \quad \mathbf{M}_\alpha = \tilde{\mathbf{M}}_\alpha^0 + \boldsymbol{\varepsilon}_\alpha \cdot \tilde{\mathbf{B}}_\alpha + \tilde{\mathbf{C}}_\alpha \cdot \boldsymbol{\kappa}_\alpha \quad (23)$$

где векторы деформации $\boldsymbol{\varepsilon}_\alpha$, $\boldsymbol{\kappa}_\alpha$ определяются формулами (9) и имеют вид

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\alpha = \mathbf{u}_\alpha - \mathbf{u} + \mathbf{a}_\alpha \times \boldsymbol{\varphi}_\alpha, \quad \boldsymbol{\kappa}_\alpha = \boldsymbol{\varphi}_\alpha - \boldsymbol{\varphi} \quad (24)$$

Используя длинноволновое приближение (см. [4]), запишем

$$\mathbf{u}_\alpha = \mathbf{u}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\alpha) \approx \mathbf{u}(\mathbf{r}) + \mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla \mathbf{u}, \quad \boldsymbol{\varphi}_\alpha = \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r} + \mathbf{a}_\alpha) \approx \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r}) + \mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla \boldsymbol{\varphi} \quad (25)$$

Тогда выражения для векторов деформации (24) примут вид

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\alpha = \mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla \mathbf{u} + \mathbf{a}_\alpha \times (\boldsymbol{\varphi} + \mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla \boldsymbol{\varphi}), \quad \boldsymbol{\kappa}_\alpha = \mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla \boldsymbol{\varphi} \quad (26)$$

Далее будем считать $\mathbf{B}_\alpha = 0$, тогда $\tilde{\mathbf{B}}_\alpha = -1/2 \mathbf{A}_\alpha \times \mathbf{a}_\alpha$. Подставив выражения (26) в соотношения упругости (23) и воспользовавшись соотношениями между тензорами жесткости (13), после несложных преобразований получим

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_\alpha &= \mathbf{F}_\alpha^0 + \mathbf{A}_\alpha \mathbf{a}_\alpha \cdot \cdot (\nabla \mathbf{u} + \mathbf{E} \times \boldsymbol{\varphi}) + \frac{1}{2} (\mathbf{A}_\alpha \times \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha) \cdot \cdot \nabla \boldsymbol{\varphi} \\ \mathbf{M}_\alpha &= \mathbf{M}_\alpha^0 + \frac{1}{2} \mathbf{a}_\alpha \times \mathbf{F}_\alpha^0 + \frac{1}{2} \mathbf{a}_\alpha \times \mathbf{A}_\alpha \mathbf{a}_\alpha \cdot \cdot (\nabla \mathbf{u} + \mathbf{E} \times \boldsymbol{\varphi}) + \left(\frac{1}{2} \mathbf{a}_\alpha \times \mathbf{A}_\alpha \times \mathbf{a}_\alpha + \tilde{\mathbf{C}}_\alpha \right) \mathbf{a}_\alpha \cdot \cdot \nabla \boldsymbol{\varphi} \end{aligned} \quad (27)$$

где \mathbf{E} – единичный тензор. Введем обозначения

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla \mathbf{u} + \mathbf{E} \times \boldsymbol{\varphi}, \quad \boldsymbol{\kappa} = \nabla \boldsymbol{\varphi} \quad (28)$$

Тензоры $\boldsymbol{\varepsilon}$ и $\boldsymbol{\kappa}$ будем называть тензорами деформации. Заметим, что тензоры (28) совпадают с тензорами деформации макроскопической моментной теории упругости. Подставив выражения (27), (28) в формулы для тензора напряжений и тензора моментных напряжений (20), получим

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_0 + {}^4\mathbf{A} \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + {}^4\mathbf{B}_1 \cdot \cdot \boldsymbol{\kappa}, \quad \boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_0 + {}^4\mathbf{B}_2 \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot \boldsymbol{\kappa} \quad (29)$$

где тензоры начальных напряжений $\boldsymbol{\tau}_0$, $\boldsymbol{\mu}_0$ и тензоры жесткости ${}^4\mathbf{A}$, ${}^4\mathbf{B}_1$, ${}^4\mathbf{B}_2$, ${}^4\mathbf{C}$ вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}_0 &= \frac{1}{2V_*} \sum_\alpha \mathbf{a}_\alpha \mathbf{F}_\alpha^0, \quad \boldsymbol{\mu}_0 = \frac{1}{2V_*} \sum_\alpha \mathbf{a}_\alpha \left(\mathbf{M}_\alpha^0 - \frac{1}{2} \mathbf{a}_\alpha \times \mathbf{F}_\alpha^0 \right) \\ {}^4\mathbf{A} &= \frac{1}{2V_*} \sum_\alpha \mathbf{a}_\alpha \mathbf{A}_\alpha \mathbf{a}_\alpha, \quad {}^4\mathbf{B}_1 = \frac{1}{4V_*} \sum_\alpha \mathbf{a}_\alpha \mathbf{A}_\alpha \times \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha \\ {}^4\mathbf{B}_2 &= -\frac{1}{4V_*} \sum_\alpha \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha \times \mathbf{A}_\alpha \mathbf{a}_\alpha, \quad {}^4\mathbf{C} = \frac{1}{2V_*} \sum_\alpha \mathbf{a}_\alpha \tilde{\mathbf{C}}_\alpha \mathbf{a}_\alpha \end{aligned} \quad (30)$$

Таким образом, уравнения (22), (28), (29) представляют собой замкнутую систему уравнений, описывающих движение атомов простой кристаллической решетки. Входящие в эти уравнения тензоры жесткости и тензоры начальных напряжений выражаются через величины, характеризующие жесткость межатомных взаимодействий и структуру кристаллической решетки, по формулам (30).

Запишем уравнение баланса энергии двух взаимодействующих частиц – исходной частицы и частицы с номером α , в форме (9):

$$\dot{W}_\alpha = \mathbf{F}_\alpha \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_\alpha + \mathbf{M}_\alpha \cdot \dot{\boldsymbol{\kappa}}_\alpha \quad (31)$$

Просуммировав уравнения (31) по индексу α , получим уравнение баланса энергии для всей системы

$$\dot{W} = \sum_\alpha \dot{W}_\alpha = \sum_\alpha [\mathbf{F}_\alpha \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_\alpha + \mathbf{M}_\alpha \cdot \dot{\boldsymbol{\kappa}}_\alpha] \quad (32)$$

Используя выражения (26), (28) для векторов и тензоров деформации, нетрудно показать, что уравнение (32) приводится к виду

$$\dot{W} = \left(\sum_\alpha \mathbf{F}_\alpha \mathbf{a}_\alpha \right) \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}} + \left[\sum_\alpha (\mathbf{M}_\alpha - \mathbf{a}_\alpha \times \mathbf{F}_\alpha) \mathbf{a}_\alpha \right] \cdot \dot{\boldsymbol{\kappa}} \quad (33)$$

Введем в рассмотрение массовую плотность внутренней энергии ρU :

$$\rho U = \frac{1}{2V_*} W \quad (34)$$

Тогда, с использованием выражений (20) для тензора напряжений $\boldsymbol{\tau}$ и тензора моментных напряжений $\boldsymbol{\mu}$, уравнение (33) может быть записано в форме

$$(\rho U) \dot{} = \boldsymbol{\tau}^T \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}} + \boldsymbol{\mu}^T \cdot \dot{\boldsymbol{\kappa}} \quad (35)$$

Таким образом, доказано, что введенные выше величины $\boldsymbol{\epsilon}$ и $\boldsymbol{\kappa}$ – это именно те тензоры деформаций, на которых совершают работу тензор напряжений $\boldsymbol{\tau}$ и тензор моментных напряжений $\boldsymbol{\mu}$. Отметим, что тензоры деформации (28) в точности совпадают с тензорами деформации макроскопической моментной теории упругости. Тогда, согласно уравнению баланса энергии (35), тензор напряжений $\boldsymbol{\tau}$ и тензор моментных напряжений $\boldsymbol{\mu}$, определяемые формулами (20), должны в точности совпадать с соответствующими величинами макроскопической моментной теории упругости. Поскольку рассматривается упругое деформирование системы, согласно уравнению баланса энергии (35), соотношения упругости имеют вид

$$\boldsymbol{\tau}^T = \partial \rho U / \partial \boldsymbol{\epsilon}, \quad \boldsymbol{\mu}^T = \partial \rho U / \partial \boldsymbol{\kappa} \quad (36)$$

Представим плотность внутренней энергии в виде

$$\rho U = \boldsymbol{\tau}_0^T \cdot \boldsymbol{\epsilon} + \boldsymbol{\mu}_0^T \cdot \boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \cdot \cdot \cdot {}^4\mathbf{A}_* \cdot \cdot \cdot \boldsymbol{\epsilon} + \boldsymbol{\epsilon} \cdot \cdot \cdot \cdot {}^4\mathbf{B}_* \cdot \cdot \boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa} \cdot \cdot \cdot \cdot {}^4\mathbf{C}_* \cdot \cdot \boldsymbol{\kappa} \quad (37)$$

где ${}^4\mathbf{A}_*$, ${}^4\mathbf{B}_*$, ${}^4\mathbf{C}_*$ – некоторые коэффициенты, имеющие смысл тензоров жесткости. Подставив (37) в соотношения упругости (36), получим

$$\boldsymbol{\tau}^T = \boldsymbol{\tau}_0^T + {}^4\mathbf{A}_* \cdot \cdot \boldsymbol{\epsilon} + {}^4\mathbf{B}_* \cdot \cdot \boldsymbol{\kappa}, \quad \boldsymbol{\mu}^T = \boldsymbol{\mu}_0^T + \boldsymbol{\epsilon} \cdot \cdot \cdot {}^4\mathbf{B}_* + {}^4\mathbf{C}_* \cdot \cdot \boldsymbol{\kappa} \quad (38)$$

Сравнивая выражения (38) с полученными выше выражениями (29) нетрудно установить связь между тензорами жесткости ${}^4\mathbf{A}_*$, ${}^4\mathbf{B}_*$, ${}^4\mathbf{C}_*$ и ${}^4\mathbf{A}$, ${}^4\mathbf{B}_1$, ${}^4\mathbf{B}_2$, ${}^4\mathbf{C}$. Воспользовавшись теоремой о спектральном разложении симметричного тензора, представим тензоры второго ранга \mathbf{A}_α , \mathbf{C}_α , характеризующие жесткость межатомных связей, в виде разложения по собственным векторам

$$\mathbf{A}_\alpha = \sum_{n=1}^3 A_{\alpha n} \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n, \quad \tilde{\mathbf{C}}_\alpha = \sum_{n=1}^3 \tilde{C}_{\alpha n} \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n \quad (39)$$

Тогда тензоры жесткости кристаллической решетки (30), являющиеся коэффициентами в выражениях для $\boldsymbol{\tau}$ и $\boldsymbol{\mu}$ (см. формулы (29)), примут вид

$$\begin{aligned} {}^4\mathbf{A} &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \sum_{n=1}^3 A_{\alpha n} \mathbf{a}_\alpha \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n \mathbf{a}_\alpha, & {}^4\mathbf{B}_1 &= \frac{1}{4V_*} \sum_{\alpha} \sum_{n=1}^3 A_{\alpha n} \mathbf{a}_\alpha \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n \times \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha \\ {}^4\mathbf{B}_2 &= \frac{1}{4V_*} \sum_{\alpha} \sum_{n=1}^3 A_{\alpha n} \mathbf{a}_\alpha \mathbf{e}_n \times \mathbf{a}_\alpha \mathbf{e}_n \mathbf{a}_\alpha, & {}^4\mathbf{C} &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \sum_{n=1}^3 \tilde{C}_{\alpha n} \mathbf{a}_\alpha \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n \mathbf{a}_\alpha \end{aligned} \quad (40)$$

Тензоры жесткости кристаллической решетки ${}^4\mathbf{A}_*$, ${}^4\mathbf{B}_*$, ${}^4\mathbf{C}_*$, являющиеся коэффициентами в выражениях для $\boldsymbol{\tau}^T$ и $\boldsymbol{\mu}^T$ (см. формулы (38)), будут выглядеть так

$$\begin{aligned} {}^4\mathbf{A}_* &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \sum_{n=1}^3 A_{\alpha n} \mathbf{e}_n \mathbf{a}_\alpha \mathbf{e}_n \mathbf{a}_\alpha, & {}^4\mathbf{C}_* &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \sum_{n=1}^3 \tilde{C}_{\alpha n} \mathbf{e}_n \mathbf{a}_\alpha \mathbf{e}_n \mathbf{a}_\alpha \\ {}^4\mathbf{B}_* &= \frac{1}{4V_*} \sum_{\alpha} \sum_{n=1}^3 A_{\alpha n} \mathbf{e}_n \mathbf{a}_\alpha \mathbf{e}_n \times \mathbf{a}_\alpha \mathbf{a}_\alpha \end{aligned} \quad (41)$$

Таким образом, тензоры (41) получаются из тензоров (40) путем перестановки векторов в тетрадах.

В качестве примера, рассмотрим частицу, представляющую собой произвольную совокупность материальных точек, жестко связанных друг с другом. Взаимодействие между материальными точками, принадлежащими разным частицам, описывается потенциалом $\Pi(r)$. Рассмотрим взаимодействие двух одинаковых частиц. Обозначим \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 – радиус-векторы центров масс частиц; $\boldsymbol{\xi}_k$ – абсолютные радиус-векторы точек, принадлежащих частицами. Условимся, что для первой частицы индекс изменяется от 1 до N , а для второй от $N+1$ до $2N$. Тогда сила, действующая на частицу 1 со стороны частицы 2, может быть представлена в виде

$$\mathbf{F} = \sum_{k=1}^N \sum_{n=N+1}^{2N} \mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_{kn}), \quad \boldsymbol{\xi}_{kn} \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{\xi}_k - \boldsymbol{\xi}_n, \quad \mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}) \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{d}{d\xi} \Pi(\xi), \quad \xi = |\boldsymbol{\xi}| \quad (42)$$

Момент, действующий на частицу 1 со стороны частицы 2, вычисленный относительно середины отрезка, соединяющего эти частицы, выглядит так:

$$\mathbf{M} = \sum_{k=1}^N \sum_{n=N+1}^{2N} (\boldsymbol{\xi}_k - \mathbf{r}_c) \times \mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_{kn}), \quad \mathbf{r}_c \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1^0 + \mathbf{r}_2^0) \quad (43)$$

где \mathbf{r}_1^0 , \mathbf{r}_2^0 – значения \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 в положении равновесия. Воспользуемся следующим представлением для силы взаимодействия между материальными точками, форми-

рующими частицы

$$\mathbf{f}(\xi) = \Phi(\xi^2)\xi, \quad \Phi(\xi^2) \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{\xi}\Pi'(\xi) \quad (44)$$

тогда формулы (42), (43) примут вид

$$\mathbf{F} = \sum_{k,n} \Phi(\xi_{kn}^2)\xi_{kn}, \quad \mathbf{M} = \sum_{k,n} (\xi_k - \mathbf{r}_c) \times \Phi(\xi_{kn}^2)\xi_{kn} \quad (45)$$

Здесь и далее для удобства пущены пределы суммирования, подразумевая, что по k всегда ведется суммирование от 1 до N , а по n суммирование осуществляется от $N+1$ до $2N$.

Рассмотрим малые движения системы из двух частиц вблизи их положения равновесия. В линейном приближении сила и момент взаимодействия (45) могут быть записаны в виде

$$\mathbf{F} = \sum_{k,n} \Psi(\xi_{kn}^0) \cdot (\xi_{kn} - \xi_{kn}^0), \quad \Psi(\xi) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d}{d\xi} \mathbf{f}(\xi) = 2\Phi'(\xi^2)\xi\xi + \Phi(\xi^2)\mathbf{E} \quad (46)$$

$$\mathbf{M} = \sum_{k,n} [(\xi_k^0 - \mathbf{r}_c) \times \Psi(\xi_{kn}^0) \cdot (\xi_{kn} - \xi_{kn}^0) - \xi_{kn}^0 \times \Psi(\xi_{kn}^0) \cdot (\xi_k - \xi_k^0)]$$

где ξ_k^0, ξ_{kn}^0 – значения ξ_k, ξ_{kn} в положении равновесия. Отклонения векторов ξ_k, ξ_{kn} от их равновесных положений имеют вид

$$\xi_k - \xi_k^0 = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1^0 + \varphi_1 \times \rho_k \quad (47)$$

$$\xi_{kn} - \xi_{kn}^0 = -\mathbf{r} + \mathbf{r}_0 + \varphi_1 \times \rho_k - \varphi_2 \times \rho_n$$

где $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ – вектор, соединяющий центры масс частиц; \mathbf{r}_0 – значение \mathbf{r} в положении равновесия; φ_1 и φ_2 – векторы малых поворотов частиц; $\rho_k = \xi_k^0 - \mathbf{r}_1^0, \rho_n = \xi_n^0 - \mathbf{r}_2^0$ – относительные радиус-векторы взаимодействующих точек, вычисленные в положении равновесия. Подстановка (47) в (46) с учетом условий равновесия

$$\sum_{k,n} \mathbf{f}(\xi_{kn}^0) \equiv 0, \quad \sum_{k,n} (\xi_k^0 - \mathbf{r}_c) \times \mathbf{f}(\xi_{kn}^0) \equiv 0 \quad (48)$$

позволяет записать выражения для силы и момента взаимодействия в форме [7], полученной ранее для взаимодействия общего вида

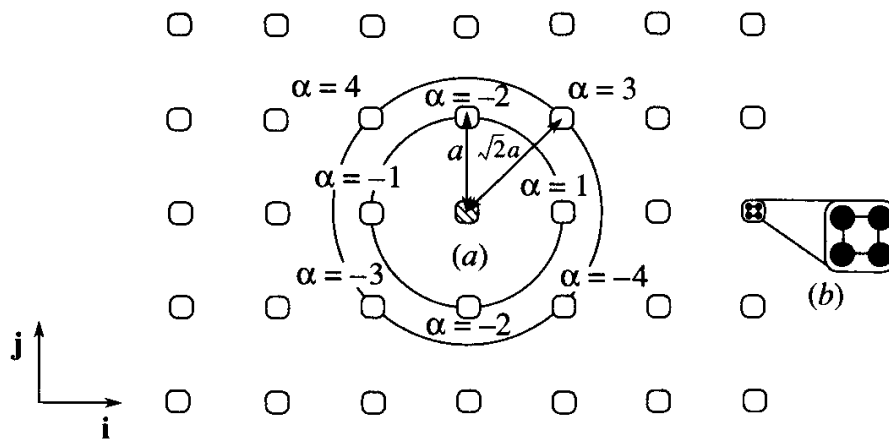
$$\mathbf{F} = \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{k}, \quad \mathbf{M} = \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{C} \cdot \mathbf{k} \quad (49)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_0 + \frac{1}{2}\mathbf{r}_0 \times (\varphi_1 + \varphi_2), \quad \mathbf{k} = \varphi_2 - \varphi_1 \quad (50)$$

$$\mathbf{A} = -\sum_{k,n} \Psi(\xi_{kn}^0), \quad \mathbf{B} = \frac{1}{2}\sum_{k,n} \Psi(\xi_{kn}^0) \times (\rho_k + \rho_n) \quad (51)$$

$$\mathbf{C} = \frac{1}{2}\sum_{k,n} \left[\frac{1}{2}\mathbf{r}_0 \times \Psi(\xi_{kn}^0) \times \mathbf{r}_0 + \rho_k \times \Psi(\xi_{kn}^0) \times \rho_n + \rho_n \times \Psi(\xi_{kn}^0) \times \rho_k \right]$$

Рассмотрим в качестве примера квадратную кристаллическую решетку (фиг. 2,а), атомы которой моделируются материальными точками. Если считать, что атомы в



Фиг. 2

узлах решетки взаимодействует только с ближайшими атомами, находящимися на расстоянии $|a_\alpha| = a$, то положение равновесия оказывается безразличным. При учете влияния атомов, расположенных в узлах решетки на расстоянии $\sqrt{2}a$, равновесная конфигурация становится неустойчивой. Обсудим причины этого явления. Условием устойчивости конфигурации решетки является положительная определенность плотности внутренней энергии (37). Линейные слагаемые, входящие в это выражение, не имеют значения, поскольку (37) может быть приведено к квадратичной форме:

$$\rho U = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot \cdot {}^4\mathbf{A}_* \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot \cdot {}^4\mathbf{B}_* \cdot \cdot \mathbf{k} + \frac{1}{2} \mathbf{k} \cdot \cdot \cdot {}^4\mathbf{C}_* \cdot \cdot \mathbf{k} \quad (52)$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}$ и \mathbf{k} отличаются от соответствующих величин в (37) на некоторые константы. Следовательно, условия устойчивости решетки определяются тензорами жесткости ${}^4\mathbf{A}_*$, ${}^4\mathbf{B}_*$, ${}^4\mathbf{C}_*$. Считая атомы материальными точками, получаем

$$\mathbf{A}_\alpha = A \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\alpha, \quad \mathbf{B}_\alpha = 0, \quad \tilde{\mathbf{C}}_\alpha = 0, \quad \mathbf{e}_\alpha = \mathbf{a}_\alpha / a_\alpha \quad (53)$$

где коэффициент A определяется потенциалом межатомного взаимодействия и зависит от расстояния между атомами. Вычисление тензоров жесткости (41) для рассматриваемой кристаллической решетки дает следующие результаты:

$${}^4\mathbf{A}_* = \frac{a^2}{V_*} [(A_1 + A_2)(\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2) + A_2(\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_3)] \quad (54)$$

$${}^4\mathbf{B}_* = 0, \quad {}^4\mathbf{C}_* = 0, \quad \mathbf{e}_1 = \mathbf{i}\mathbf{i}, \quad \mathbf{e}_2 = \mathbf{j}\mathbf{j}, \quad \mathbf{e}_3 = \mathbf{i}\mathbf{j} + \mathbf{j}\mathbf{i}$$

где A_1, A_2 – значения коэффициентов A (см. формулы (53)), характеризующие жесткости связи с частицами, находящимися на расстоянии a и $\sqrt{2}a$ соответственно. Орты \mathbf{i}, \mathbf{j} направлены вдоль ребер квадратной решетки.

Используя (54), запишем плотность внутренней энергии (52) в виде

$$\rho U = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot \cdot {}^4\mathbf{A}_* \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} = \frac{a^2}{2V_*} [(A_1 + A_2)(\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2) + 2A_2 \varepsilon_x \varepsilon_y + A_2(\varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yx})^2] \quad (55)$$

Условие равновесия кристаллической решетки, состоящей из материальных точек, имеет вид $\boldsymbol{\tau} = 0$. С учетом симметрии решетки это тензорное уравнение сводится к

одному скалярному уравнению $\text{tr} \tau = 0$, которое, согласно формулам (20), может быть записано в форме

$$\sum_{\alpha=-4}^4 \mathbf{a}_{\alpha} \cdot \mathbf{F}_{\alpha} = 0 \quad (56)$$

Если взаимодействие между материальными точками описывается потенциалом $\Pi(r)$, то уравнение равновесия (56) может быть приведено к виду

$$\Pi'(a) + \sqrt{2}\Pi'(\sqrt{2}a) = 0 \quad (57)$$

Рассмотрим в качестве примера потенциал взаимодействия Ми

$$\Pi(r) = \frac{D}{n-m} \left[m \left(\frac{r_0}{r} \right)^n - n \left(\frac{r_0}{r} \right)^m \right], \quad n > m \geq 2 \quad (58)$$

где r_0 – расстояние между точками в положении равновесия, а D – глубина потенциальной ямы. Воспользовавшись уравнением (57), определим равновесное расстояние между атомами кристаллической решетки

$$a = \frac{r_0}{\sqrt{2}^{n-m}} \sqrt{\frac{1 + \sqrt{2}^n}{1 + \sqrt{2}^m}} \quad (59)$$

Коэффициенты упругости $A_1 = \Pi''(a)$ и $A_2 = \Pi''(\sqrt{2}a)$, согласно формулам (58), (59), имеют вид

$$A_1 = \frac{2Dnm}{r_0^2(n-m)^{n-m}} \sqrt{\frac{(1 + \sqrt{2}^m)^{m+2}}{(1 + \sqrt{2}^n)^{n+2}}} [(n+1)\sqrt{2}^n - (m+1)\sqrt{2}^m + (n-m)\sqrt{2}^{m+n}] \quad (60)$$

$$A_2 = \frac{Dnm(n+1)(m+1)}{r_0^2(n-m)^{n-m}} \sqrt{\frac{(1 + \sqrt{2}^m)^{m+2}}{(1 + \sqrt{2}^n)^{n+2}}} \left[\frac{1 + \sqrt{2}^m}{m+1} - \frac{1 + \sqrt{2}^n}{n+1} \right]$$

Несложный анализ выражений (60) показывает, что коэффициент A_1 положителен при любых $m > 0$, а коэффициент A_2 при $m \geq 2$ отрицателен. При отрицательных значениях коэффициента A_2 квадратичная форма (55) не является положительно определенной, т.е. конфигурация решетки неустойчива. При пренебрежении влиянием дальнейших атомов коэффициент A_2 следует положить равным нулю, в результате чего равновесное положение решетки станет безразличным, так как в этом случае значение энергии может оставаться равным нулю при произвольных деформациях ϵ_{xy} и ϵ_{yx} .

Ниже будет показано, что использование частицы общего вида в качестве модели атома позволяет сделать квадратную кристаллическую решетку устойчивой. Действительно, при учете моментных взаимодействий, кроме продольной жесткости, характеризующей реакцию на изменение межатомного расстояния, появляется поперечная (сдвиговая) жесткость межатомного взаимодействия, характеризующая реакцию на перемещение атомов в направлении, перпендикулярном соединяющей их линии. В результате, когда частицы достигают определенного размера, поперечная жесткость связи с ближайшими атомами (положительная величина) может скомпенсировать отрицательную продольную жесткость связи с более удаленными атомами и плотность энергии станет положительно определенной функцией.

Рассмотрим квадратную кристаллическую решетку, атомы которой моделируются частицами общего вида. Исходя из теории симметрии тензорных величин [7], можно

показать следующее: если частицы удовлетворяют симметрии квадратной решетки, то тензоры жесткости, характеризующие взаимодействие этих частиц, имеют вид

$$\mathbf{A} = A\mathbf{e}_\alpha\mathbf{e}_\alpha + \tilde{A}\tilde{\mathbf{e}}_\alpha\tilde{\mathbf{e}}_\alpha, \quad \mathbf{B}_\alpha = 0, \quad \tilde{\mathbf{C}}_\alpha = \tilde{C}\mathbf{k}\mathbf{k}, \quad \mathbf{e}_\alpha = \mathbf{a}_\alpha/|\mathbf{a}_\alpha|, \quad \tilde{\mathbf{e}}_\alpha = \mathbf{k} \times \mathbf{e}_\alpha \quad (61)$$

где \mathbf{k} – орт нормали к плоскости решетки. Связь тензоров жесткости кристаллической решетки ${}^4\mathbf{A}_*$, ${}^4\mathbf{B}_*$, ${}^4\mathbf{C}_*$ с тензорами жесткости межатомных связей (61) дается формулами (39), (41). Воспользовавшись этими формулами, получим:

$${}^4\mathbf{A}_* = \frac{a^2}{V_*} [(A_1 + A_2 + \tilde{A}_2)(\mathbf{iiii} + \mathbf{jjjj}) + (\tilde{A}_1 + A_2 + \tilde{A}_2)(\mathbf{jiji} + \mathbf{ijij}) + (A_2 - \tilde{A}_2)(\mathbf{ijjj} + \mathbf{jjii} + \mathbf{ijji} + \mathbf{jiij})] \quad (62)$$

$${}^4\mathbf{B}_* = 0, \quad {}^4\mathbf{C}_* = \frac{a^2}{V_*} (\tilde{C}_1 + 2\tilde{C}_2)(\mathbf{kiki} + \mathbf{kjkj})$$

Здесь индексы 1 и 2 присвоены коэффициентами A , \tilde{A} и \tilde{C} (см. формулы (61)), характеризующим жесткости связи с атомами первой координационной сферы ($\alpha = \pm 1, \pm 2$), находящимися на расстоянии a , и атомами второй координационной сферы ($\alpha = \pm 3, \pm 4$), находящимися на расстоянии $\sqrt{2}a$ соответственно. Коэффициенты A описывают продольную жесткость связи (реализующуюся при изменении расстояния между частицами), \tilde{A} – поперечную жесткость связи (сдвиговую жесткость), \tilde{C} – моментную жесткость на поворот частиц друг относительно друга. Подставив (62) в выражение для плотности внутренней энергии (37) (без линейных слагаемых), получим

$$\rho U = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \cdot {}^4\mathbf{A}_* \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa} \cdot \cdot {}^4\mathbf{C}_* \cdot \cdot \boldsymbol{\kappa} = \frac{a^2}{2V_*} [(A_1 + A_2 + \tilde{A}_2)(\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2) + 2(A_2 - \tilde{A}_2)\varepsilon_x\varepsilon_y + (\tilde{A}_1 + A_2 + \tilde{A}_2)(\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{yx}^2) + 2(A_2 - \tilde{A}_2)\varepsilon_{xy}\varepsilon_{yx} + (\tilde{C}_1 + 2\tilde{C}_2)(\kappa_{xz}^2 + \kappa_{yz}^2)] \quad (63)$$

Квадратичная форма (63) будет положительно определенной при выполнении следующих неравенств:

$$\begin{aligned} A_1 + A_2 + \tilde{A}_2 &> |A_2 - \tilde{A}_2| \\ \tilde{A}_1 + A_2 + \tilde{A}_2 &> |A_2 - \tilde{A}_2| \\ \tilde{C}_1 + 2\tilde{C}_2 &> 0 \end{aligned} \quad (64)$$

Конкретные значения коэффициентов жесткости связи атомов решетки A_γ , \tilde{A}_γ , \tilde{C}_γ зависят от потенциала взаимодействия. Если потенциал достаточно быстро убывает с расстоянием и имеет структуру, сходную со структурой потенциала Ми (58), то не сложно показать, что коэффициенты жесткости обладают следующими свойствами: продольная и моментная жесткости связи с атомами первой координационной сферы положительны, соответствующая поперечная жесткость может быть как положительной, так и отрицательной, все жесткости связи с атомами второй координационной сферы отрицательны

$$\begin{aligned} A_1 &> 0, \quad \tilde{A}_1 \geq 0, \quad \tilde{C}_1 > 0 \\ A_2 &< 0, \quad \tilde{A}_2 < 0, \quad \tilde{C}_2 < 0 \end{aligned} \quad (65)$$

поперечные жесткости существенно меньше соответствующих продольных

$$|\tilde{A}_1| \ll A_1, \quad |\tilde{A}_2| \ll |A_2| \quad (66)$$

при этом жесткости связи с дальнейшими атомами существенно меньше соответствующих жесткостей связи с ближайшими атомами

$$|A_2| \ll |A_1|, \quad |\tilde{A}_2| \ll |\tilde{A}_1|, \quad |\tilde{C}_2| \ll |\tilde{C}_1| \quad (67)$$

При выполнении условий (65), (66), (67) первое и третье неравенства из (64) выполняются автоматически, а второе неравенство принимает вид

$$\tilde{A}_1 > 2|A_2| \quad (68)$$

Условие (68) имеет простой физический смысл: поперечная жесткость связи с атомами первой координационной сферы должна превосходить удвоенную абсолютную величину продольной жесткости связи с атомами второй координационной сферы.

В качестве простейшей модели частиц, позволяющей учесть симметрию решетки, выберем частицы, состоящие из четырех жестко связанных друг с другом материальных точек, расположенных в вершинах квадрата (фиг. 2, *b*). Обозначим длину стороны квадрата h . Выберем некоторую исходную частицу, присвоим ей номер $\alpha = 0$ и рассмотрим взаимодействие данной частицы с соседними: $\alpha = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4$ (см. фиг. 2, *a*). Частицы $\alpha = \pm 1$ и $\alpha = \pm 2$ и исходная частица обращены друг к другу сторонами и находятся на расстоянии a , частицы $\alpha = \pm 3$ и $\alpha = \pm 4$ и исходная частица обращены друг к другу углами и находятся на расстоянии $\sqrt{2}a$. Условия равновесия кристаллической решетки имеют вид: $\tau = 0, \mu = 0$. Эти условия равносильны одному скалярному уравнению $\text{tr} \tau = 0$, поскольку вследствие симметрии решетки остальные уравнения выполняются тождественно. Уравнение $\text{tr} \tau = 0$, согласно формулам (20), может быть записано в форме (56). Будем считать, что взаимодействие между материальными точками, принадлежащими разным частицам, описывается потенциалом $\Pi(r)$. Тогда уравнение равновесия (56) примет вид

$$\sum_{\gamma=1}^2 (\sqrt{2})^{\gamma-1} \left[\sum_{i=1}^3 v_{i,\gamma} \Pi'(r_{i,\gamma}) + v_{4,\gamma} \Pi'(r_{i,\gamma}) \frac{\xi_{1,\gamma}}{\xi_{4,\gamma}} + \sum_{i=5}^6 v_{i,\gamma} \Pi'(r_{i,\gamma}) \frac{\frac{1}{\gamma} \xi_{i-3,\gamma} + \frac{\gamma-1}{2} \xi_{1,\gamma}}{\xi_{i,\gamma}} \right] = 0$$

$$r_{i,\gamma} = a \xi_{i,\gamma}, \quad v_{1,\gamma} = 2, \quad v_{2,\gamma} = v_{3,\gamma} = \gamma^{-1}, \quad v_{4,\gamma} = 2\gamma^{-1}, \quad v_{5,\gamma} = v_{6,\gamma} = \gamma \quad (69)$$

$$\xi_{1,\gamma} = \sqrt{\gamma}, \quad \xi_{2,\gamma} = \sqrt{\gamma}(1 + \zeta), \quad \xi_{3,\gamma} = \sqrt{\gamma}(1 - \zeta), \quad \xi_{4,\gamma} = \sqrt{\gamma} \sqrt{1 + \zeta^2}$$

$$\xi_{5,\gamma} = \sqrt{\gamma} \sqrt{\left(1 + \frac{\zeta}{\gamma}\right)^2 + \left(\frac{\zeta}{\gamma}\right)^2}, \quad \xi_{6,\gamma} = \sqrt{\gamma} \sqrt{\left(1 - \frac{\zeta}{\gamma}\right)^2 + \left(\frac{\zeta}{\gamma}\right)^2}, \quad \zeta = \frac{h}{a}$$

где $\gamma = 1$ для частиц, расположенных друг к другу сторонами, и $\gamma = 2$ для частиц, расположенных друг к другу углами. Воспользовавшись формулами (51), нетрудно показать, что тензоры жесткости $A_\alpha, B_\alpha, \tilde{C}_\alpha$, характеризующие взаимодействие частиц, имеют вид (61), где коэффициенты упругости $A_\gamma, \tilde{A}_\gamma, \tilde{C}_\gamma$ выражаются через потенциал $\Pi(r)$ по формулам

$$A_\gamma = 2 \sum_{i=1}^6 v_{i,\gamma} c_{i,\gamma} - \tilde{A}_\gamma, \quad \tilde{A}_\gamma = 2\zeta^2 \sum_{i=4}^6 v_{i,1} c_{i,\gamma} \xi_{i,\gamma}^{-2}$$

$$C_\gamma = a^2 \zeta^2 \left[c_{1,\gamma} + \left(1 - \frac{\gamma}{2}\right) \sum_{i=2}^3 c_{i,\gamma} + (2 - \gamma) c_{4,\gamma} \zeta^2 \xi_{4,\gamma}^{-2} + \frac{\gamma - 1}{2} \sum_{i=5}^6 c_{i,\gamma} \xi_{i-3,\gamma}^2 \xi_{i,\gamma}^{-2} \right] \quad (70)$$

$$\tilde{C}_\gamma = C_\gamma + \frac{1}{4} \gamma a^2 \tilde{A}_\gamma, \quad c_{i,\gamma} = \Pi''(r_{i,\gamma}) - \frac{1}{r_{i,\gamma}} \Pi'(r_{i,\gamma}), \quad r_{i,\gamma} = a \xi_{i,\gamma}$$

Далее будем считать, что взаимодействие точек описывается потенциалом Ми (58). В этом случае уравнение (69) допускает точное решение, позволяющее выразить равновесное расстояние a через безразмерный параметр $\zeta = h/a$:

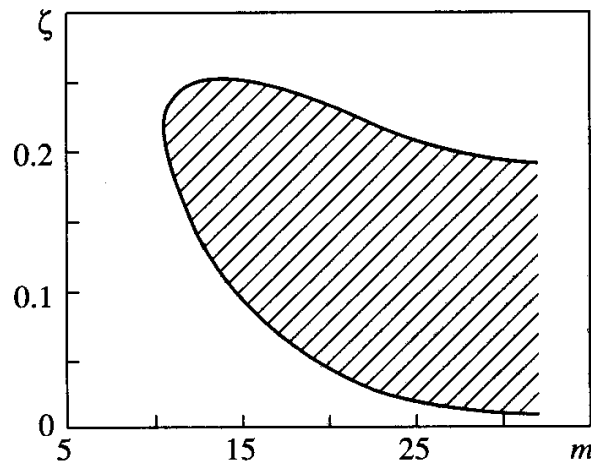
$$\left(\frac{a}{r_0}\right)^{n-m} = \frac{\sum_{\gamma=1}^2 (\sqrt{2})^{\gamma-1} \left[\sum_{i=1}^3 v_{i,\gamma} \xi_{i,\gamma}^{-(n+1)} + v_{4,\gamma} \xi_{1,\gamma} \xi_{4,\gamma}^{-(n+2)} + \sum_{i=5}^6 v_{i,\gamma} \left(\frac{1}{\gamma} \xi_{i-3,\gamma} + \frac{\gamma-1}{2} \xi_{1,\gamma} \right) \xi_{i,\gamma}^{-(n+1)} \right]}{\sum_{\gamma=1}^2 (\sqrt{2})^{\gamma-1} \left[\sum_{i=1}^3 v_{i,\gamma} \xi_{i,\gamma}^{-(m+1)} + v_{4,\gamma} \xi_{1,\gamma} \xi_{4,\gamma}^{-(m+2)} + \sum_{i=5}^6 v_{i,\gamma} \left(\frac{1}{\gamma} \xi_{i-3,\gamma} + \frac{\gamma-1}{2} \xi_{1,\gamma} \right) \xi_{i,\gamma}^{-(m+1)} \right]} \quad (71)$$

Коэффициенты упругой связи $c_{i,\gamma}$ между материальными точками, принадлежащими разным частицам (см. формулы (70)), выражаются через параметры потенциала Ми по формулам

$$c_{i,\gamma} = \frac{Dnm}{r_0^2(n-m)} \left(\frac{r_0}{a}\right)^{n+2} \left[\frac{n+2}{\xi_{i,\gamma}^{n+2}} - \left(\frac{a}{r_0}\right)^{n-m} \frac{m+2}{\xi_{i,\gamma}^{m+2}} \right] \quad (72)$$

Подставив выражения (69), (71), (72) в формулы для коэффициентов упругости A_γ , \tilde{A}_γ , \tilde{C}_γ (70), можно убедиться в том, что условия устойчивости (64) зависят от трех параметров: m , n и ζ . Первые два параметра определяют скорость убывания потенциала Ми. Параметр $\zeta = h/a$ представляет собой отношение размера частицы к межатомному расстоянию.

Результаты численного анализа условий устойчивости кристаллической решетки (64) приведены на фиг. 3, где показана область устойчивости (заштрихована) на плоскости параметров ζ , m . Между параметрами потенциала Ми использовалось соотношение $n = 2m$. Как видно при небольших значениях m , когда потенциал взаимодействия убывает недостаточно быстро и дестабилизирующая роль дальнейших соседей велика, решетка неустойчива при любых размерах частиц. При увеличении m появляется область устойчивости. Как отмечалось выше, для достижения устойчивости поперечная жесткость связи с соседними атомами \tilde{A}_1 должна превосходить удвоенную абсолютную величину продольной жесткости связи с более удаленными атомами A_2 (см. формулу (68)). При этом, если считать ζ малой величиной, то продольная жесткость будет порядка единицы, а поперечная жесткость будет иметь асимптотический порядок ζ^2 (см. формулы (70)). Таким образом, нижняя граница области устойчивости обусловлена тем, что для достижения устойчивости размер частиц должен превысить некоторую величину $\zeta_*(m, n)$. Поскольку $|A_2|$ убывает с ростом m и n , величина $\zeta_*(m, n)$ также будет убывать при увеличении этих параметров. Наличие верхней границы области устойчивости связано с тем, что поперечная жесткость связи с бли-



Фиг. 3

жайшими атомами \tilde{A}_1 , начиная с некоторого значения ζ , становится убывающей функцией, а при достаточно больших ζ оказывается отрицательной.

Перечислим наиболее важные результаты, полученные в данной работе.

1. Введены понятия векторов деформации для системы двух взаимодействующих частиц общего вида. Показано, что в дискретной системе векторы деформации, определяемые как векторы, на которых совершают работу сила и момент взаимодействия частиц, не могут быть введены однозначно. Последнее связано с тем, что момент взаимодействия частиц зависит от точки, относительно которой он вычисляется, а выбор этой точки в дискретной системе неоднозначен. Проведена аналогия с континуальной теорией.

2. Показано, что динамика кристаллической упаковки частиц с вращательными степенями свободы в длинноволновом приближении описывается уравнениями макроскопической моментной теории упругости. Получены конкретные выражения для тензоров жесткости кристаллической решетки, зависящие от геометрии решетки и тензоров жесткости второго ранга, характеризующих жесткости межатомных связей.

3. В качестве примера частиц общего вида рассмотрены частицы, представляющие собой совокупности жестко связанных между собой материальных точек. Взаимодействие между материальными точками, принадлежащими разным частицам, описывается произвольным парным потенциалом. Получены выражения для тензоров жесткости второго ранга, характеризующих жесткость связи двух одинаковых частиц.

4. Показано, что использование частицы общего вида в качестве модели атома позволяет стабилизировать квадратную кристаллическую решетку. Предложена простейшая модель частицы, позволяющая учесть симметрию квадратной решетки. Модель состоит из четырех жестко связанных друг с другом материальных точек, расположенных в вершинах квадрата. Для данной модели найдены области устойчивости решетки, зависящие от отношения размера частицы к равновесному межатомному расстоянию и параметров потенциала взаимодействия.

Модели частиц, находящихся в узлах квадратной решетки, могут быть весьма разнообразны. Единственным необходимым требованием является соответствие симметрии частицы и решетки. Критерием выбора той или иной модели может быть, с одной стороны, ее простота, а с другой стороны то, насколько она отражает строение атома. В данной работе предпочтение отдано простоте модели. При попытке учесть структуру атома, можно было бы модернизировать исходную модель следующим образом: в центре квадрата поместить материальную точку, моделирующую ядро, а материальные точки, находящиеся в углах квадрата, рассматривать как элек-

троны. При такой интерпретации, логичным является предположение, что потенциалы взаимодействия ядро – ядро, ядро – электрон и электрон – электрон должны быть различными. В результате получается модель, содержащая большое число параметров. Подобная модель уже не обладает достоинством простоты, и вместе с тем, трудно оценить ее адекватность, поскольку, варьируя большим числом параметров, всегда можно добиться достаточно хорошего совпадения с экспериментальными данными. Альтернативный подход заключается в использовании в качестве модели атома частицы общего вида без конкретизации ее структуры как совокупности материальных точек. Преимуществом такого подхода является то, что не возникает необходимости делать попытку учесть строение атома. Параметры, характеризующие взаимодействие частиц общего вида, будут полностью определяться структурой тех решеток, которые они могут формировать. Реализация данного подхода потребует создания потенциалов взаимодействия, зависящих не только от взаимного расположения частиц, но и от их взаимной ориентации. В линейной постановке задачи потенциал взаимодействия частиц общего вида имеет вид (6). Нелинейная постановка задачи требует отдельного исследования и выходит за рамки данной работы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 02-01-00514).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tersoff J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems // Phys. Rev. B. 1988. V. 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. V. 42. P. 9458–9471.
3. Аэро Э.Л., Кувшинский Е.В. Основные уравнения теории упругости сред с вращательным взаимодействием частиц // ФТТ. 1960. Т. 2. № 9. С. 1399–1409.
4. Борн М., Хуан Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. М.: Наука, 1958. 488 с.
5. Кривцов А.М. К теории сред с микроструктурой // Тр. СПбГТУ. 1992. № 443. С. 9–17.
6. Krivtsov A.M. Constitutive Equations of the Nonlinear Crystal Lattice // ZAMM Z. angew. Math. Mech. 1999. V. 79. № S2. P. 419–420.
7. Жилин П.А. Основные уравнения неклассической теории оболочек // Тр. Ленингр. политехн. ин-та. 1982. № 386. С. 29–46.
8. Альтенбах Х., Жилин П.А. Общая теория упругих простых оболочек // Успехи механики Advances in mechanics. Warszawa. 1988. № 4. С. 107–148.
9. Жилин П.А., Сергеев А.Д., Товстик Т.П. Нелинейная теория стержней: статика, динамика, устойчивость // Тр. XXIV Всес. шк. “Анализ и синтез нелинейных механических колебательных систем”. СПб., 1997. С. 313–337.
10. Grekova E., Zhilin P. Basic equations of Kelvin’s medium and analogy with ferromagnetics // J. elastic. 2001. V. 64. P. 29–70.
11. Новацкий В. Теория упругости. М.: Мир, 1975. 872 с.

С.-Петербург

Поступила в редакцию
24.04.2003