

Министерство образования и науки Российской Федерации

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

Е.А. Иванова А.М. Кривцов Н.Ф. Морозов А.Д. Фирсова

**ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭКВИВАЛЕНТНЫХ
УПРУГИХ ХАРАКТЕРИСТИК
ДИСКРЕТНЫХ СИСТЕМ**

Учебное пособие

Санкт-Петербург
Издательство Политехнического университета
2004

Министерство образования и науки Российской Федерации

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

Е.А. Иванова А.М. Кривцов Н.Ф. Морозов А.Д. Фирсова

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭКВИВАЛЕНТНЫХ УПРУГИХ
ХАРАКТЕРИСТИК ДИСКРЕТНЫХ СИСТЕМ

Учебное пособие

Санкт-Петербург
Издательство Политехнического университета
2004

УДК 531.3(075.8)

Теоретическая механика. Определение эквивалентных упругих характеристик дискретных систем: Учеб. пособие / Е.А. Иванова, А.М. Кривцов, Н.Ф. Морозов, А.Д. Фирсова. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2004. 33 с.

Пособие соответствует авторскому курсу дисциплины “Теоретическая механика” направления бакалаврской подготовки “Прикладная механика”.

Рассмотрена простейшая модель твердого тела с микроструктурой — идеальный монокристалл. Описана методика, позволяющая вывести континуальные уравнения линейной теории упругости из дискретных уравнений движения атомов кристаллической решетки.

Предназначено для студентов, изучающих теоретическую механику, механику сплошной среды и физику твердого тела, а также аспирантов, научных работников и инженеров.

Табл. 2. Ил. 3. Библиогр.: 25 назв.

Печатается по решению редакционно-издательского совета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

*Тема учебного пособия разработана при поддержке гранта Е02-4.0-33 Минобр-
зования России по фундаментальным исследованиям в области естественных и
точных наук.*

© Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет, 2004

Введение

Простейшей моделью твердого тела с микроструктурой является идеальный монокристалл. Вследствие его регулярности многие соотношения, связывающие параметры микроструктуры с макроскопическими параметрами деформирования, удается получить аналитически. С одной стороны, подобные аналитические соотношения представляют самостоятельный интерес для теоретического анализа деформирования кристаллических твердых тел. С другой стороны, они необходимы для постановки задач компьютерного моделирования процессов деформирования и разрушения методами динамики частиц и молекулярной динамики, так как в основе этих методов лежит представление твердого тела с помощью различных упаковок частиц (или атомов). В пособии предлагается математическое описание линейного упругого деформирования тел с кристаллической структурой.

Рассматривается множество взаимодействующих частиц (материальных точек или твердых тел). В равновесии расположение частиц в пространстве характеризуется трансляционной симметрией, т. е. они образуют идеальную кристаллическую решетку. В данном пособии мы ограничимся рассмотрением линейного упругого деформирования. Кроме того, будем считать, что каждая частица взаимодействует лишь с ограниченным числом соседей, — это позволит при переходе к макроскопическому масштабному уровню получить локальную теорию. Для наглядности будем иногда называть частицы атомами, хотя они не обязательно являются таковыми.

Первая глава — вводная, в ней приводятся общие сведения о кристаллах, законах взаимодействия, дается ряд обозначений.

Вторая глава посвящена выводу уравнений линейной теории упругости из уравнений движения частиц кристаллической решетки. Кроме того, даются микроскопические представления для многих макроскопических величин, таких как тензор напряжений и тензор жесткости среды. Частицы рассматриваются как точечные массы, не учитывается их инерция вращения и моментное взаимодействие между ними. Выкладки проделаны для трехмерного пространства, однако практически без каких-либо изменений они могут быть перенесены на пространство произвольной размерности, в частности размерности 2.

В третьей главе полученные уравнения применяются для нахождения ряда макроскопических характеристик кристаллических решеток, в частности определяются модули упругости и волновые скорости.

Четвертая глава посвящена описанию кристаллической упаковки частиц, представляющих собой микроскопические твердые тела, — учитывается инерция вращения и моментное взаимодействие между частицами. Это позволяет описать неплотно упакованные структуры (например, ковалентные кристаллы), неустойчивые при чисто силовом взаимодействии. Кроме того, такой подход важен для описания гранулированных сред, где частицы представляют собой зерна материала и уже невозможно пренебречь их размерами.

С линейной теорией упругости можно ознакомиться в книге А. И. Лурье [19]. Для более подробного изучения механики деформируемого твердого тела можно порекомендовать работы П. А. Жилина, А. И. Лурье, В. А. Пальмова, К. Трусделла [6, 20, 22, 23].

Исследование сред с микроструктурой в значительной степени началось с анализа динамики кристаллических решеток. Основополагающими в этой области считаются работы М. Борна и др. [1]. В них, в частности, получены линейные соотношения упругости для идеального кристалла на основе развитого Борном метода длинных волн. Впоследствии механика кристаллических решеток исследовалась многими авторами [10, 11, 15, 17, 18, 21]. О применении кристаллических решеток в компьютерном моделировании методом частиц можно прочитать в [14].

1 Общие сведения

1.1 Кристаллическая решетка

Кристаллической решеткой называется множество точек (узлов) в трехмерном пространстве, для которого существует такая тройка некопланарных векторов, что смещение этого множества на любой из них есть тождественное преобразование. Очевидно, что подобное множество должно быть неограниченным в пространстве. Если указанная тройка векторов существует, то она может быть определена не единственным образом. В качестве основной тройки выбирается такая, чтобы параллелепипед, построенный на ее векторах, имел минимальный объем. Эти векторы называются основными, а параллелепипед — элементарной ячейкой. Основные векторы также установлены неоднозначно, однако всегда можно выделить какую-нибудь одну тройку из возможных. Введенное понятие решетки очевидным образом может быть распространено на пространство произвольной размерности, в том числе на одно- и двухмерные пространства.

Совокупность узлов, которая может быть получена из некоторого одного узла композициями перемещений на основные векторы, называется решеткой Браве данной кристаллической решетки, а решетка, совпадающая со своей решеткой Браве, — простой, не совпадающая — сложной. Последняя решетка состоит из нескольких вставленных друг в друга одинаковых решеток Браве. Иными словами, простой называется решетка, для которой перемещение на вектор, соединяющий любые два узла, есть

тождественное преобразование. Элементарная ячейка простой решетки содержит один узел, сложной — несколько. В пособии мы рассмотрим только простые кристаллические решетки.

Отметим, что только при недеформированном состоянии кристалла частицы находятся в узлах решетки, при деформации они получают некоторые смещения и с узлами уже не совпадают.

1.2 Длинноволновое приближение

Для получения макроскопических уравнений будет использоваться так называемое длинноволновое приближение [1]. Суть его состоит в том, что рассматриваются лишь функции, мало меняющиеся на расстояниях, сравнимых с длинами основных векторов. В динамике это можно сформулировать так: рассматриваются волны, длины которых много больше межатомных расстояний. Тепловое движение ни в коем случае не является длинноволновым, поэтому все рассуждения будут вестись для некоторых осредненных характеристик.

1.3 Потенциалы взаимодействия

Пусть частицы взаимодействуют посредством парного потенциала $\Pi(r)$, где r — расстояние между частицами. Тогда сила взаимодействия между частицами вычисляется согласно формуле $f(r) \stackrel{\text{def}}{=} -\Pi'(r)$. Обозначим символом a — равновесное расстояние между двумя частицами: $f(a) \equiv 0$, символом C — жесткость межатомной связи в положении равновесия, T_0 — период колебаний массы m под действием линейной силы с жесткостью C :

$$C \stackrel{\text{def}}{=} \Pi''(a) \equiv -f'(a), \quad T_0 \stackrel{\text{def}}{=} 2\pi \sqrt{m/C}. \quad (1)$$

Величины a и T_0 удобно использовать в качестве микроскопических масштабов расстояния и времени.

Минимальная скорость, которую надо сообщить частице массы m , находящейся в равновесии в потенциальном поле $\Pi(r)$, чтобы она могла уйти на бесконечность (скорость диссоциации), такова:

$$v_d = \sqrt{2D/m}, \quad (2)$$

где $D \stackrel{\text{def}}{=} \Pi(a)$ — энергия связи.

Скорость распространения длинных волн в бесконечной цепочке определяется формулой

$$v_0 = \sqrt{a^2 C/m}. \quad (3)$$

В случае если упаковка частиц представляет собой идеальную двухмерную треугольную кристаллическую решетку, то скорость v_l распространения длинных продольных волн

$$v_l = \sqrt{\frac{9}{8}} v_0 \approx 1.06 v_0. \quad (4)$$

Рассмотрим несколько наиболее часто встречающихся в литературе потенциалов.

1.3.1 Потенциал Леннарда–Джонса

Простейшим потенциалом, описывающим межатомное взаимодействие, является потенциал Леннарда–Джонса

$$П(r) = D \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right], \quad (5)$$

где D и a — введенные ранее энергия связи и равновесное межатомное расстояние.

Соответствующая сила взаимодействия $f(r) = -П'(r)$ имеет вид

$$f(r) = \frac{12D}{a} \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{13} - \left(\frac{a}{r} \right)^7 \right]. \quad (6)$$

Жесткость связи C и энергия связи D для потенциала Леннарда–Джонса связаны соотношением

$$C = 72D/a^2, \quad (7)$$

а следовательно, скорость распространения длинных волн и скорость диссоциации — простым соотношением $v_0 = 6v_d$. Потенциал Леннарда–Джонса является простейшим потенциалом, позволяющим учесть наиболее общие свойства межатомного взаимодействия — отталкивание при сближении частиц, притяжение при их удалении и практическое отсутствие взаимодействия на больших расстояниях. Потенциал Леннарда–Джонса двухпараметрический, поэтому он имеет очень ограниченные возможности для вариации макроскопических параметров моделируемого им материала. Фактически он позволяет удовлетворить значению только одного макроскопического параметра — это, например, модуль упругости или предел прочности в статике, скорость распространения продольных волн или откольная скорость в динамике. Отношение между указанными параметрами остается неизменным. С другой стороны, данный потенциал весьма точно описывает свойства ряда веществ (прежде всего, кристаллических инертных газов), а также силы взаимодействия Ван дер Ваальса, играющие важную роль в твердых телах. К несомненному достоинству потенциала Леннарда–Джонса относится также его вычислительная простота, не требующая вычисления иррациональных и трансцендентных функций. Потенциал Леннарда–Джонса широко применяется в качестве классического модельного потенциала, особенно в работах, в которых основной задачей является исследование общих физических закономерностей, а не получение точных количественных результатов.

1.3.2 Потенциал Морзе

Потенциал взаимодействия Морзе имеет вид

$$P(r) = D \left[e^{-2\alpha(r-a)} - 2e^{-\alpha(r-a)} \right]. \quad (8)$$

Жесткость связи C для потенциала Морзе вычисляется по формуле

$$C = 2\alpha^2 D. \quad (9)$$

Потенциал Морзе является трехпараметрическим, что позволяет удовлетворять значению двух независимых макроскопических параметров, таких как, например, модуль упругости и предел прочности в статике, скорость распространения продольных волн и откольная скорость в динамике. Дополнительный параметр α дает возможность варьировать ширину потенциальной ямы, что приводит к тому, что соответствующий материал становится более или менее хрупким. Простота и наглядность вычисления параметров потенциала делает его весьма удобным для использования. Данный потенциал широко применяется в литературе. Еще одним его достоинством по сравнению с потенциалом Леннарда–Джонса является более быстрое (экспоненциальное) затухание на расстоянии, что удобно, если желательно учитывать взаимодействие только ближайших частиц. Недостатком потенциала Морзе по сравнению с потенциалом Леннарда–Джонса является необходимость вычисления экспоненты и квадратного корня (для $r = \sqrt{r \cdot \bar{r}}$), что может приводить к замедлению расчетов.

При значении параметров $\alpha a = 6$ потенциал Морзе оказывается наиболее близок к потенциалу Леннарда–Джонса. Выражается это в том, что при $\alpha a = 6$ для этих потенциалов можно добиться равенства трех важнейших размерных параметров: равновесного расстояния a , жесткости связи C и энергии связи D .

1.3.3 Потенциал Ми

Потенциал Ми выглядит так:

$$P(r) = \frac{D}{n-m} \left[m \left(\frac{a}{r} \right)^n - n \left(\frac{a}{r} \right)^m \right]. \quad (10)$$

Жесткость связи

$$C = mnD/a^2. \quad (11)$$

Потенциал Ми является четырехпараметрическим, что дает значительно большую, чем для потенциала Леннарда–Джонса, свободу в подборе параметров. Однако относительная сложность зависимости свойств потенциала от параметров m , n может затруднить его использование на практике.

1.4 Обозначения векторных и тензорных величин

Векторные величины будем обозначать однократным подчеркиванием: \underline{a} , \underline{b} , \underline{c} ; тензорные — двукратным подчеркиванием: $\underline{\underline{A}}$, $\underline{\underline{B}}$, $\underline{\underline{C}}$. Используются следующие обозначения для произведений векторных и тензорных величин. Произведения векторов: скалярное $\underline{a} \cdot \underline{b}$, векторное $\underline{a} \times \underline{b}$, тензорное (диадное) $\underline{a} \underline{b}$. Скалярное произведение тензоров — $\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{B}}$, двойное скалярное — $\underline{\underline{A}} \cdot \cdot \underline{\underline{B}}$. Для диад двойное скалярное произведение вводится формулой $\underline{a} \underline{b} \cdot \cdot \underline{c} \underline{d} \stackrel{\text{def}}{=} (\underline{b} \cdot \underline{c})(\underline{a} \cdot \underline{d})$. Единичный тензор обозначается $\underline{\underline{E}}$. Операция транспонирования, примененная к тензору $\underline{\underline{A}}$, — $\underline{\underline{A}}^T$, в частности, $(\underline{a} \underline{b})^T = \underline{b} \underline{a}$. Если $\underline{\underline{A}}^T = \underline{\underline{A}}$, то тензор $\underline{\underline{A}}$ называется симметричным, а если $\underline{\underline{A}}^T = -\underline{\underline{A}}$, то антисимметричным. Симметричная часть тензора обозначается $\underline{\underline{A}}^S \stackrel{\text{def}}{=} (\underline{\underline{A}} + \underline{\underline{A}}^T)/2$. Тензор, обратный $\underline{\underline{A}}$, — $\underline{\underline{A}}^{-1}$. Пусть тензор представлен в виде суммы трех диад: $\underline{\underline{A}} = \sum_{k=1}^3 \underline{a}_k \underline{b}_k$ (это возможно для любого тензора). Тогда следом тензора $\underline{\underline{A}}$ называется скаляр $\text{tr} \underline{\underline{A}} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=1}^3 \underline{a}_k \cdot \underline{b}_k$, а сопутствующим вектором — вектор $\underline{\underline{A}}_{\times} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=1}^3 \underline{a}_k \times \underline{b}_k$. Ранг тензора обозначается верхним индексом, расположенным слева от тензора, например: ${}^3 \underline{\underline{C}}$ — тензор третьего ранга. Для тензоров второго ранга этот индекс, как правило, опускается.

Более подробно с прямым тензорным исчислением можно ознакомиться в [3, 4, 12, 16]. В сжатой форме, но достаточно полно, основы прямого тензорного исчисления изложены в книгах Лурье [19, 20]. Методика использования прямого тензорного исчисления при решении задач механики деформируемого твердого тела отражена в монографии Пальмова [22]. Особенности тензорного аппарата, необходимые при описании механики сплошной среды и динамики твердого тела, излагаются в работах Жилина [4, 7, 8].

2 Описание кристаллической упаковки частиц с учетом силовых взаимодействий

2.1 Уравнения динамики частиц кристаллической решетки

Рассматривается идеальная простая кристаллическая решетка, которую формируют частицы общего вида, взаимодействующие посредством парных центральных сил. Предполагается, что каждая частица взаимодействует с ограниченным числом соседей. Рассмотрим некоторую частицу, которую для удобства будем называть исходной. Пронумеруем все частицы, взаимодействующие с исходной. Последней присвоим номер $\alpha = 0$, остальным $\alpha \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N$. Нумерация производится таким образом, чтобы частицы, расположенные симметрично относительно ис-

ходной, имели индексы, противоположные по знаку. Обозначим \underline{a}_α радиус-вектор, определяющий положение частицы с номером α относительно исходной частицы в отсчетной конфигурации. В качестве отсчетной конфигурации используется недеформированное состояние кристалла. Очевидно, что $\underline{a}_{-\alpha} = -\underline{a}_\alpha$. Положение частицы с номером α задается вектором положения \underline{r}_α . Обозначим \underline{u}_α вектор перемещения частицы с номером α . Запишем уравнения динамики для исходной частицы

$$m\ddot{\underline{u}} = \sum_{\alpha} \underline{F}_\alpha + \underline{f}_*. \quad (12)$$

Здесь m — масса исходной частицы, \underline{F}_α — вектор силы, действующий на исходную частицу со стороны частицы с индексом α , вектор \underline{f}_* — внешняя сила, действующая на исходную частицу.

Рассмотрим две взаимодействующие частицы: исходную частицу, положение которой определяется вектором \underline{r} , и частицу с индексом “ $-\alpha$ ”, положение которой определяется вектором $\underline{r}_{-\alpha} = \underline{r} - \underline{a}_\alpha$. На исходную частицу со стороны частицы с индексом “ $-\alpha$ ” действует сила $\underline{F}_{-\alpha}(\underline{r})$. По отношению к частице с индексом “ $-\alpha$ ” исходная частица является частицей с индексом “ α ”. Следовательно, на частицу с индексом “ $-\alpha$ ” со стороны исходной частицы действует сила $\underline{F}_\alpha(\underline{r} - \underline{a}_\alpha)$. Согласно третьему закону Ньютона выполняется соотношение

$$\underline{F}_{-\alpha}(\underline{r}) + \underline{F}_\alpha(\underline{r} - \underline{a}_\alpha) = 0. \quad (13)$$

Будем считать, что силы \underline{F}_α определены не только на дискретном множестве значений $\underline{r} \pm \underline{a}_\alpha$, но и на непрерывном \underline{r} , где \underline{r} характеризует положение произвольной точки пространства. Как именно доопределяются функции $\underline{F}_\alpha(\underline{r})$, не имеет значения, однако важно, чтобы эти функции были дифференцируемы и мало изменялись на промежутках порядка межатомных взаимодействий. Предполагая справедливость длинноволнового приближения (см. [1]), имеем

$$\underline{F}_\alpha(\underline{r} - \underline{a}_\alpha) \approx \underline{F}_\alpha(\underline{r}) - \underline{a}_\alpha \cdot \nabla \underline{F}_\alpha. \quad (14)$$

Здесь использовано разложение функции $\underline{F}_\alpha(\underline{r} - \underline{a}_\alpha)$ в ряд, из которого затем оставлены только первые два слагаемых. Символ ∇ обозначает векторный дифференциальный оператор Гамильтона (дифференцирование по вектору \underline{r}). Результатом подстановки выражения (14) в (13) является соотношение

$$\underline{F}_{-\alpha}(\underline{r}) \approx -\underline{F}_\alpha(\underline{r}) + \nabla \cdot \underline{a}_\alpha \underline{F}_\alpha. \quad (15)$$

Используя формулу (15), проведем следующие преобразования:

$$\sum_{\alpha} \underline{F}_\alpha = \sum_{\alpha} \underline{F}_{-\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (\underline{F}_\alpha + \underline{F}_{-\alpha}) = \nabla \cdot \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \underline{a}_\alpha \underline{F}_\alpha. \quad (16)$$

Введем обозначение

$$\underline{\tau} = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} \underline{F}_{\alpha}. \quad (17)$$

Здесь V_* — объем элементарной ячейки. Тензор $\underline{\tau}$ будем называть тензором напряжений. Введем также обозначения

$$\rho = \frac{1}{V_*} m; \quad \underline{f} = \frac{1}{V_*} \underline{f}_*. \quad (18)$$

Здесь ρ — массовая плотность, \underline{f} — объемная плотность внешних сил. Используя соотношение (16) и обозначения (17), (18), перепишем уравнения движения рассматриваемой частицы (12) в виде

$$\rho \ddot{\underline{u}} = \nabla \cdot \underline{\tau} + \underline{f}. \quad (19)$$

Отметим, что уравнение (19) по своей структуре совпадает с уравнением динамики среды в макроскопической теории упругости. Поскольку рассматривается центральное взаимодействие частиц, то сила \underline{F}_{α} коллинеарна вектору \underline{a}_{α} , соединяющему частицы¹, а следовательно, сила может быть записана в виде

$$\underline{F}_{\alpha} = -\Phi_{\alpha} \underline{a}_{\alpha}, \quad (20)$$

где Φ_{α} — некоторый скалярный коэффициент.

Тогда тензор напряжений (16) принимает вид

$$\underline{\tau} = -\frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \Phi_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha}. \quad (21)$$

Согласно выражению (21) тензор напряжений симметричен, как и должно выполняться в линейной теории упругости.

2.2 Соотношения упругости

Допустим, взаимодействие частиц определяется некоторым парным потенциалом взаимодействия $\Pi(A)$, где A — расстояние между взаимодействующими частицами. Тогда

$$\Phi_{\alpha} = \Phi(A_{\alpha}^2), \quad \Phi(A^2) = -\frac{1}{A} \Pi'(A). \quad (22)$$

¹Строго говоря, сила \underline{F}_{α} коллинеарна вектору, соединяющему частицы не в отсчетной, а в актуальной конфигурации. Однако можно показать, что если отсчетная конфигурация является ненапряженной, то в линейном приближении этим различием можно пренебречь [13].

Здесь A_α — расстояние между частицами в актуальной конфигурации, для удобства дальнейших выкладок величина Φ_α представлена как функция квадрата расстояния между частицами. Введем вектор \underline{A}_α , являющийся аналогом вектора \underline{a}_α в актуальной конфигурации. Тогда

$$\underline{A}_\alpha = \underline{a}_\alpha + \underline{u}(\underline{r} + \underline{a}_\alpha) - \underline{u}(\underline{r}) \approx \underline{a}_\alpha + \underline{a}_\alpha \cdot \nabla \underline{u}. \quad (23)$$

Здесь использовано длинноволновое приближение. Квадрат выражения (23) в линейном приближении по деформации может быть записан в виде

$$A_\alpha^2 = a_\alpha^2 + 2\underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}, \quad \underline{\underline{\varepsilon}} = (\nabla \underline{u})^S. \quad (24)$$

Здесь $\underline{\underline{\varepsilon}}$ — тензор малой деформации сплошной среды. Подстановка (24) в (22) дает

$$\Phi_\alpha = \Phi(a_\alpha^2) + 2\Phi'(a_\alpha^2)\underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}. \quad (25)$$

Здесь, как и ранее, используется линейное приближение по деформации; штрихом обозначена производная по аргументу функции (т. е. в данном случае по a_α^2). Подстановка формулы (25) в (21) приводит к следующему выражению для тензора напряжений:

$$\underline{\underline{\tau}} = \underline{\underline{\tau}}_0 + \underline{\underline{4A}} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}, \quad \underline{\underline{\tau}}_0 = -\frac{1}{2V_*} \sum_\alpha \Phi(a_\alpha^2) \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha, \quad \underline{\underline{4A}} = -\frac{1}{V_*} \sum_\alpha \Phi'(a_\alpha^2) \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha, \quad (26)$$

где $\underline{\underline{\tau}}_0$ — тензор начальных напряжений; $\underline{\underline{4A}}$ — тензор жесткости сплошной среды.

Поскольку изначально предполагалось, что отсчетная конфигурация является ненапряженной, то тензор начальных напряжений должен тождественно обращаться в ноль. Это приводит к следующему уравнению:

$$\sum_\alpha \frac{1}{a_\alpha} \Pi'(a_\alpha) \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha = 0, \quad (27)$$

служащему для определения равновесного состояния кристаллической решетки. Формула (26) для тензора жесткости окончательно может быть записана в виде

$$\underline{\underline{4A}} = \frac{1}{2V_*} \sum_\alpha \left(\frac{1}{a_\alpha^2} \Pi''(a_\alpha) - \frac{1}{a_\alpha^3} \Pi'(a_\alpha) \right) \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha. \quad (28)$$

В простейшем случае, когда рассматривается взаимодействие только с ближайшими соседями по кристаллической решетке, имеем $\underline{a}_\alpha \equiv \underline{a}$, следовательно, $\Pi'(a_\alpha) \equiv 0$ и соотношение (27) выполняется тождественно, а (28) принимает вид

$$\underline{\underline{4A}} = \frac{Ca^2}{2V_*} \sum_\alpha n_\alpha n_\alpha n_\alpha n_\alpha, \quad (29)$$

где $C = \Pi''(a)$ — жесткость межатомной связи; $\underline{n}_\alpha = \underline{a}_\alpha/a_\alpha$ — орт направления \underline{a}_α .

Таким образом, мы получили макроскопические соотношения упругости

$$\underline{\underline{\tau}} = {}^4\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}, \quad (30)$$

где тензор жесткости ${}^4\underline{\underline{A}}$ определяется структурой кристаллической решетки и потенциалом взаимодействия между частицами согласно формуле (28) или (29). Подстановка его в уравнение динамики (19) с учетом геометрического соотношения $\underline{\underline{\varepsilon}} = (\nabla \underline{u})^S$ дает замкнутое дифференциальное уравнение для определения перемещений сплошной среды

$$\rho \ddot{\underline{u}} = \nabla \cdot ({}^4\underline{\underline{A}} \cdot \nabla \underline{u}) + \underline{f}. \quad (31)$$

2.3 Внутренняя энергия кристалла

Запишем внутреннюю энергию кристалла, приходящуюся на одну частицу кристаллической решетки:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \Pi(A_\alpha). \quad (32)$$

Множитель $1/2$ введен для того, чтобы при суммировании по всем частицам кристаллической решетки получалась полная энергия кристалла (при таком суммировании каждая связь будет учтена два раза). Введем также

$$U = W/m; \quad \rho U = W/V_*, \quad (33)$$

где U и ρU — внутренние энергии, приходящиеся на единицу массы и единицу объема, соответственно.

В макроскопической теории упругости из уравнения баланса внутренней энергии

$$\rho \dot{U} = \underline{\underline{\tau}} \cdot \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \quad (34)$$

следует соотношение Коши–Грина

$$\underline{\underline{\tau}} = \frac{\partial \rho U}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}}, \quad (35)$$

где $\underline{\underline{\tau}}$ — макроскопический тензор напряжений.

Проверим выполнение этого соотношения для введенного ранее тензора $\underline{\underline{\tau}}$. Согласно (24) в линейном приближении расстояния A_α являются функциями тензора деформации $\underline{\underline{\varepsilon}}$, а следовательно, и введенные энергии также функции этого тензора. Тогда должно выполняться тождество

$$\rho \dot{U} = \frac{\partial \rho U}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}} \cdot \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}. \quad (36)$$

С другой стороны, из (32)–(33) получаем

$$\rho\dot{U} = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \Pi'(A_{\alpha}) \dot{A}_{\alpha} = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \Pi'(A_{\alpha}) \frac{\partial A_{\alpha}}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}} \cdot \cdot \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}}. \quad (37)$$

Согласно (24) частная производная от расстояния A_{α} в линейном приближении вычисляется так

$$\frac{\partial A_{\alpha}}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}} = \frac{1}{a_{\alpha}} \underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha}. \quad (38)$$

Подставляя (38) в (37) и сравнивая с (35), получаем

$$\frac{\partial \rho U}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}} = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \frac{1}{a_{\alpha}} \Pi'(A_{\alpha}) \underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} = \underline{\underline{\tau}}. \quad (39)$$

Сравнение с формулами (21), (22) показывает, что полученный в результате вычисления частной производной тензор $\underline{\underline{\tau}}$ в точности совпадает с введенным ранее из микроскопических соображений тензором напряжений. Это подтверждает правильность вышеприведенного определения.

В линейной теории энергия деформирования кристалла может быть представлена в виде квадратичной формы тензора деформации:

$$\rho(U - U_0) = \frac{1}{2} \underline{\underline{\varepsilon}} \cdot \cdot \underline{\underline{A}} \cdot \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}, \quad (40)$$

где ρU_0 — внутренняя энергия недеформированного кристалла, определяемая формулой

$$\rho U_0 = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \Pi(a_{\alpha}). \quad (41)$$

3 Нахождение ряда макроскопических характеристик простых кристаллических решеток

В предыдущей главе были выведены макроскопические уравнения линейной теории упругости для простой кристаллической решетки с чисто силовым взаимодействием. Далее мы представим расчет ряда макроскопических характеристик подобных решеток — модулей упругости, волновых скоростей, а также определим равновесное состояние для некоторых наиболее часто встречающихся решеток.

3.1 Общие уравнения

Выражение для тензора жесткости простой кристаллической решетки (28) было получено в предыдущей главе. Ограничимся взаимодействием только ближайших соседей по кристаллической решетке. Тогда формула для тензора жесткости примет более простой вид (29):

$$\underline{\underline{4A}} = \frac{a^2 C}{2V_*} \sum_{\alpha} \underline{n}_{\alpha} \underline{n}_{\alpha} \underline{n}_{\alpha} \underline{n}_{\alpha}, \quad (42)$$

где $C \stackrel{\text{def}}{=} \Pi''(a)$ — жесткость межатомной связи; $\underline{n}_{\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} \underline{a}_{\alpha}/a_{\alpha}$ — орт направления на частицу с номером α .

Модуль объемного сжатия материала может быть вычислен так

$$K \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{d^2} \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{4A}} \cdot \underline{\underline{E}} = \frac{\mathcal{M} a^2 C}{2d^2 V_*}, \quad (43)$$

где \mathcal{M} — координационное число решетки (число ближайших соседей у каждого атома); d — размерность пространства (1, 2 или 3).

Коэффициенты жесткости (проекции тензора жесткости в произвольном ортонормированном базисе \underline{e}_k) могут определяться по формулам

$$\begin{aligned} C_{1111} &= \frac{a^2 C}{2V_*} \sum_{\alpha} (\underline{n}_{\alpha} \cdot \underline{e}_1)^4; & C_{1122} &= \frac{a^2 C}{2V_*} \sum_{\alpha} (\underline{n}_{\alpha} \cdot \underline{e}_1)^2 (\underline{n}_{\alpha} \cdot \underline{e}_2)^2; \\ C_{1112} &= \frac{a^2 C}{2V_*} \sum_{\alpha} (\underline{n}_{\alpha} \cdot \underline{e}_1)^3 (\underline{n}_{\alpha} \cdot \underline{e}_2). \end{aligned} \quad (44)$$

Напомним, что коэффициенты симметричны относительно произвольной перестановки индексов, поэтому формулы для остальных коэффициентов могут быть получены из приведенных выше путем замены или перестановки индексов. Уравнение распространения упругих волн таково:

$$\rho \ddot{\underline{u}} = \nabla \cdot (\underline{\underline{4A}} \cdot \nabla \underline{u}), \quad (45)$$

где ρ — плотность материала; \underline{u} — перемещение точек среды.

Очевидно, $\rho = m/V_*$, где m — масса частицы. Из уравнения (45) следует, что скорость продольных волн v_1 в направлении \underline{e}_1 равна C_{1111}/ρ , а скорость волн сдвига v_{12} в плоскости $(\underline{e}_1, \underline{e}_2)$ — C_{1122}/ρ . С использованием (44) получаем

$$v_1^2 = \frac{1}{2} v_0^2 \sum_{\alpha} (\underline{n}_{\alpha} \cdot \underline{e}_1)^4; \quad v_{12}^2 = \frac{1}{2} v_0^2 \sum_{\alpha} (\underline{n}_{\alpha} \cdot \underline{e}_1)^2 (\underline{n}_{\alpha} \cdot \underline{e}_2)^2, \quad (46)$$

где $v_0 = a\sqrt{C/m}$ — скорость распространения длинных волн в одномерной цепочке.

Изотропный тензор $\underline{\underline{A}}_0$, соответствующий тензору жесткости (42), определяется формулой [13]

$$\begin{aligned} \underline{\underline{A}}_0 &= G_0 \underline{\underline{J}}; & G_0 &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathcal{M}a^2 C}{2d(d+2)V_*}; \\ \underline{\underline{J}} &\stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k,n=1}^d (\underline{e}_k \underline{e}_k \underline{e}_n \underline{e}_n + \underline{e}_k \underline{e}_n \underline{e}_k \underline{e}_n + \underline{e}_k \underline{e}_n \underline{e}_n \underline{e}_k), \end{aligned} \quad (47)$$

где $\underline{\underline{J}}$ — простейший изотропный абсолютно симметричный тензор четвертого ранга; \underline{e}_k — векторы ортонормированного базиса; коэффициент G_0 связан с модулем объемного сжатия материала соотношением $G_0 = \frac{d}{d+2} K$ (модуль объемного сжатия, разумеется, одинаков для $\underline{\underline{A}}$ и $\underline{\underline{A}}_0$).

Тензор (47) получен из тензора (42) путем осреднения по всем пространственным направлениям. Тензор жесткости может быть изотропным вследствие симметрии решетки, для поликристаллического материала или приближенно при слабой анизотропии. При изотропии формулы (44) с учетом (47) принимают вид

$$C_{1111} = 3G_0; \quad C_{1122} = G_0; \quad C_{1112} = 0. \quad (48)$$

Соотношения упругости изотропного материала имеют вид

$$\underline{\underline{\tau}} = \underline{\underline{A}}_0 \cdot \cdot \underline{\underline{\varepsilon}} = G_0 (\text{tr} \underline{\underline{\varepsilon}} \underline{\underline{E}} + 2\underline{\underline{\varepsilon}}), \quad (49)$$

где $\underline{\underline{\tau}}$ — тензор напряжений; $\underline{\underline{\varepsilon}}$ — тензор деформаций.

Из (49), в частности, следует, что ранее введенный коэффициент G_0 в точности равен модулю сдвига изотропного материала, а модуль Юнга и коэффициент Пуассона при изотропии, соответственно, таковы:

$$E_0 = 2 \frac{d+2}{d+1} G_0 = \frac{2d}{d+1} K; \quad \nu_0 = \frac{1}{d+1}. \quad (50)$$

Скорости распространения волн в изотропном материале

$$v_l = \sqrt{\frac{3\mathcal{M}}{2d(d+2)}} v_0; \quad v_s = \frac{1}{\sqrt{3}} v_l, \quad (51)$$

где $v_l \equiv v_1$, $v_s \equiv v_{12}$ — соответственно, скорости продольных волн и сдвиговых волн (46).

3.2 Плотнупакованные решетки

В качестве примера рассмотрим три наиболее часто встречающиеся плотноупакованные решетки, соответствующие пространствам размерности

$d = 1, 2, 3$: одномерная цепочка, треугольная решетка в двухмерном пространстве (она же ГПУ — гексагональная плотноупакованная) и трехмерная гранецентрированная кубическая (ГЦК) решетка. Отметим, что для одномерного и двухмерного случая могут использоваться формулы (47)–(51), так как соответствующие тензоры жесткости изотропны. Трехмерная ГЦК решетка анизотропна, для нее будем выделять следующие направления: вдоль оси симметрии четвертого порядка (вдоль ребра кубической подрешетки), вдоль оси изотропии² (вдоль диагонали кубической подрешетки), любое направление в плоскости изотропии (перпендикулярное оси изотропии).

Несложно убедиться, что координационное число и объем элементарной ячейки для рассматриваемых решеток определяются соотношениями

$$\mathcal{M} = d(d + 1); \quad V_* = \frac{\sqrt{5 - d}}{2} a^d, \quad (52)$$

что позволяет получить явное выражение для коэффициента объемного сжатия, модуля Юнга, коэффициента Пуассона и скорости продольных волн

$$\begin{aligned} K &= \frac{(d + 1)}{d\sqrt{5 - d}} C a^{2-d}; & E &= \frac{2d}{d + 1} K; \\ \nu &= \frac{1}{d + 1}; & v_l &= \sqrt{\frac{3(d + 1)}{2(d + 2)}} v_0. \end{aligned} \quad (53)$$

Формула для K справедлива для любой из рассматриваемых решеток, остальные формулы справедливы для одномерной и двухмерной решеток, а также для изотропной составляющей трехмерной ГЦК решетки (т. е. могут приближенно использоваться для определения свойств поликристалла, состоящего из ГЦК зерен). На основании полученных формул можно установить значения некоторых безразмерных механических характеристик для различных кристаллических решеток (табл. 1). В таблице показаны значения скоростей продольных v_l и сдвиговых v_s волн по отношению к скорости распространения волн в одномерной цепочке v_0 , кроме того, приведены отношения модуля Юнга к коэффициенту объемного сжатия E/K и значения коэффициента Пуассона ν . В графе “Направление” указано: для скоростей — направление, в котором распространяется волна³; для модулей упругости — направление приложения нагрузки. В строке “ГЦК₀” приведены свойства материала, отвечающего изотропной части тензора жесткости ГЦК решетки.

²Указанная ось изотропии, вообще говоря, является осью симметрии третьего порядка, однако симметрия третьего порядка в данном случае приводит к трансверсальной изотропии тензора жесткости.

³Скорость распространения волн сдвига в заданном направлении внутри трехмерного кристалла зависит также от ориентации плоскости сдвига. Однако в рассматриваемом случае все эти плоскости оказываются равноправными [2].

Значения некоторых механических характеристик плотноупакованных решеток

d	Решетка	Направление	v_l/v_0	v_s/v_0	E/K	ν
1	Цепочка	Любое	1.00	—	1.00	—
2	ГПУ	Любое	1.06	0.61	1.33	0.33
3	ГЦК ₀	Любое	1.10	0.63	1.50	0.25
3	ГЦК	Ось четвертого порядка	1.00	0.71	1.00	0.33
3	ГЦК	В плоскости изотропии	1.12	0.65	1.61	0.23
3	ГЦК	Ось изотропии	1.15	0.58	1.80	0.20

3.3 Равновесное состояние кристаллической решетки

Для задания равновесной отсчетной конфигурации требуется знать равновесное расстояние между частицами в кристаллической упаковке. Если убывание силы взаимодействия недостаточно быстро для того, чтобы взаимодействием с частицами, расположенными на второй координационной сфере, можно было полностью пренебречь, то тогда это расстояние отличается от величины a (расстояния обращения в ноль силы взаимодействия). Покажем, каким образом это равновесное расстояние может быть определено, и рассчитаем его для некоторых простейших случаев.

Условие равновесия простой кристаллической решетки имеет вид (27)

$$\sum_{\alpha} \frac{1}{a_{\alpha}} f(a_{\alpha}) \underline{a}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} = 0, \quad (54)$$

где \underline{a}_{α} — радиус-вектор атома (узла) решетки, проведенный из рассматриваемого атома (α — номер узла); a_{α} — модуль \underline{a}_{α} ; функция $f(r) \stackrel{\text{def}}{=} -P'(r)$ представляет собой силу взаимодействия между частицами (притяжение отрицательно).

Для одномерной цепочки, треугольной и квадратной двумерных решеток, а также для всех кубических трехмерных решеток при отсутствии внешних сил тензор, стоящий в левой части (54), должен быть шаровым (в силу симметрии). В этом случае достаточно потребовать равенства нулю следа указанного тензора, что приводит к уравнению

$$\sum_{\alpha} a_{\alpha} f(a_{\alpha}) = 0. \quad (55)$$

Очевидно, не все расстояния a_{α} различны. Если сгруппировать их по координационным сферам, то формулу (55) можно переписать в виде

$$\sum_{k=1}^n N_k R_k f(R_k) = 0, \quad (56)$$

где k — номер координационной сферы; N_k — число лежащих на координационной сфере атомов; R_k — радиус координационной сферы; n — число сфер, принимаемых к рассмотрению (может быть ∞).

Решение уравнения (56) будем искать в виде $R_k = \rho_k R$, где ρ_k — известные из геометрических соображений константы; R — неизвестная величина, как правило, расстояние между некоторыми двумя атомами в решетке. При изменении R вся решетка изменяется, оставаясь подобной самой себе. Теперь соотношение (56) принимает вид уравнения относительно одной скалярной неизвестной R

$$\sum_{k=1}^n N_k \rho_k f(\rho_k R) = 0. \quad (57)$$

Для взаимодействия Леннарда–Джонса уравнение (57) может быть решено в общем виде

$$R = a \sqrt[6]{\frac{\sum_{k=1}^n N_k \rho_k^{-12}}{\sum_{k=1}^n N_k \rho_k^{-6}}}. \quad (58)$$

Приведем результаты вычисления равновесного положения для различных плотноупакованных решеток при взаимодействии Леннарда–Джонса и радиусе обрезания потенциала $2.1a$ (табл. 2). Величина ε характеризует относительное сжатие решетки и вычисляется по формуле

$$\varepsilon = (1 - R_1/a) \cdot 100\%.$$

Видно (см. табл. 2), что сжатие увеличивается с повышением размерности пространства.

Таблица 2

Параметры равновесного положения различных решеток
(d — размерность, $R_1 = \rho_1 R$ — расстояние между ближайшими атомами)

d	Решетка	R_1/a	$\varepsilon, \%$
1	Цепочка	0.9974599	0.25
2	ГПУ	0.9917496	0.83
3	ГЦК	0.9784147	2.16

4 Описание кристаллической упаковки частиц с учетом моментных взаимодействий

4.1 Различные подходы

к описанию межатомных 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. На плоскости это треугольная решетка, в трехмерном пространстве — гранецентрированная кубическая или какая-либо аналогичная ей решетка. Решетки с более низкой плотностью упаковки, например простая кубическая решетка, оказываются неустойчивыми и на плоскости, и в трехмерном пространстве для большинства парных потенциалов. Причина этого состоит в том, что расстояние между вторыми соседями (по диагоналям куба) оказывается на неустойчивом участке диаграммы сила–расстояние. Иными словами, 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 являются 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 [25, 24]. 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, но при переходе от одной кристаллической структуры к другой (скажем, графит–алмаз) приходится полностью менять потенциал взаимодействия.

Альтернативный подход состоит в учете моментного вклада в межатомное взаимодействие. Известно, что ковалентные связи направленные, что свидетельствует о возможности передачи ими моментных взаимодействий. Необходимость учета моментного взаимодействия давно подтверждена для описания полимеров, где без учета торсионного взаимодействия (т. е. взаимодействия, отвечающего повороту вокруг направления связи) невозможно адекватно описать структурные свойства полимерных молекул. Моментное взаимодействие имеет ясный физический смысл, что делает его более предпочтительным, чем многочастичное взаимодействие.

4.2 Описание взаимодействия частиц общего вида на основе моментной теории

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

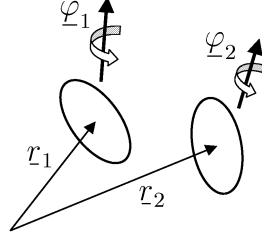


Рис. 1: Моментное взаимодействие двух частиц

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 [5, 9]. Рассмотрим две взаимодействующие частицы (рис. 1). В актуальной конфигурации положение частиц задается радиус-векторами $\underline{r}_1, \underline{r}_2$, а ориентация частиц — векторами поворотов $\underline{\varphi}_1, \underline{\varphi}_2$. В равновесном положении $\underline{r}_2 - \underline{r}_1 = \underline{r}_0$, $\underline{\varphi}_1 = 0, \underline{\varphi}_2 = 0$.

Введем следующие обозначения: $\underline{F}_1, \underline{M}_1$ — сила и момент, действующие на частицу 1 со стороны частицы 2; $\underline{F}_2, \underline{M}_2$ — сила и момент, действующие на частицу 2 со стороны частицы 1; $\underline{F}_1^e, \underline{M}_1^e, \underline{F}_2^e, \underline{M}_2^e$ — внешние воздействия на частицы 1 и 2, соответственно. Моменты \underline{M}_1 и \underline{M}_1^e вычислены относительно частицы 1, а моменты \underline{M}_2 и \underline{M}_2^e — относительно частицы 2. Запишем уравнения движения частицы 1 и частицы 2

$$\begin{aligned} m_1 \dot{\underline{v}}_1 &= \underline{F}_1 + \underline{F}_1^e; & (\underline{\theta}_1 \cdot \underline{\omega}_1) \cdot &= \underline{M}_1 + \underline{M}_1^e; \\ m_2 \dot{\underline{v}}_2 &= \underline{F}_2 + \underline{F}_2^e; & (\underline{\theta}_2 \cdot \underline{\omega}_2) \cdot &= \underline{M}_2 + \underline{M}_2^e, \end{aligned} \quad (59)$$

а также уравнения движения системы, состоящей из обеих частиц:

$$\begin{aligned} (m_1 \underline{v}_1 + m_2 \underline{v}_2) \cdot &= \underline{F}_1^e + \underline{F}_2^e; \\ (\underline{r}_1 \times m_1 \underline{v}_1 + \underline{\theta}_1 \cdot \underline{\omega}_1 + \underline{r}_2 \times m_2 \underline{v}_2 + \underline{\theta}_2 \cdot \underline{\omega}_2) \cdot &= \\ &= \underline{r}_1 \times \underline{F}_1^e + \underline{M}_1^e + \underline{r}_2 \times \underline{F}_2^e + \underline{M}_2^e. \end{aligned} \quad (60)$$

Здесь $m_1, m_2, \underline{\theta}_1, \underline{\theta}_2$ — массы и тензоры инерции частиц, $\underline{v}_1, \underline{v}_2, \underline{\omega}_1, \underline{\omega}_2$ — их линейные и угловые скорости. Заметим, что уравнения баланса моментов (59) записаны относительно частиц, а уравнение баланса моментов

(60) — относительно некоторой неподвижной точки (начала отсчета). Результатом уравнений (59), (60) является третий закон Ньютона для сил и аналог третьего закона Ньютона для моментов:

$$\underline{F}_1 + \underline{F}_2 = 0; \quad \underline{r}_1 \times \underline{F}_1 + \underline{M}_1 + \underline{r}_2 \times \underline{F}_2 + \underline{M}_2 = 0. \quad (61)$$

Подчеркнем, что третий закон Ньютона — независимый закон только в механике Ньютона, описывающей движение материальных точек. В механике Эйлера, где уравнение баланса сил и уравнение баланса моментов формулируются для тел общего вида и являются независимыми законами, третий закон Ньютона — следствие первого закона динамики Эйлера (уравнения баланса сил). Запишем уравнение баланса энергии для системы, состоящей из двух частиц:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{2} \left[m_1 \underline{v}_1 \cdot \underline{v}_1 + \underline{\omega}_1 \cdot \underline{\theta}_1 \cdot \underline{\omega}_1 + m_2 \underline{v}_2 \cdot \underline{v}_2 + \underline{\omega}_2 \cdot \underline{\theta}_2 \cdot \underline{\omega}_2 \right] + U \right) \dot{} = \\ & = \underline{F}_1^e \cdot \underline{v}_1 + \underline{M}_1^e \cdot \underline{\omega}_1 + \underline{F}_2^e \cdot \underline{v}_2 + \underline{M}_2^e \cdot \underline{\omega}_2, \end{aligned} \quad (62)$$

где U — внутренняя энергия системы (энергия взаимодействия частиц 1 и 2).

Предполагая смещения из положения равновесия малыми величинами и принимая во внимание уравнения (59), (61), уравнение баланса энергии (62) можно привести к виду

$$\begin{aligned} \dot{U} &= \underline{F} \cdot \underline{\dot{\varepsilon}} + \underline{M} \cdot \underline{\dot{\kappa}}; \quad \underline{F} = \underline{F}_1 = -\underline{F}_2; \\ \underline{M} &= \underline{M}_1 + \frac{1}{2}(\underline{r}_1 - \underline{r}_2) \times \underline{F}_1 = -\underline{M}_2 - \frac{1}{2}(\underline{r}_2 - \underline{r}_1) \times \underline{F}_2; \\ \underline{\varepsilon} &= \underline{r} - \underline{r}_0 + \frac{1}{2}\underline{r}_0 \times (\underline{\varphi}_1 + \underline{\varphi}_2); \quad \underline{\kappa} = \underline{\varphi}_2 - \underline{\varphi}_1, \quad \underline{r} = \underline{r}_2 - \underline{r}_1. \end{aligned} \quad (63)$$

Здесь \underline{M} — момент, действующий на частицу 1 со стороны частицы 2, вычисленный относительно середины отрезка, соединяющего эти частицы. Векторы $\underline{\varepsilon}$ и $\underline{\kappa}$, на которых совершают работу вектор силы и вектор момента (см. формулы (63)), назовем векторами деформации. Далее будем рассматривать упругое деформирование системы. Предположим, что внутренняя энергия, вектор силы и вектор момента зависят только от векторов деформации и не зависят от скоростей. Тогда

$$\underline{F} = \frac{\partial U}{\partial \underline{\varepsilon}}, \quad \underline{M} = \frac{\partial U}{\partial \underline{\kappa}}. \quad (64)$$

Поскольку деформации считаются малыми, а отсчетная конфигурация — ненапряженной, для внутренней энергии можно принять следующую аппроксимацию:

$$U = \frac{1}{2} \underline{\varepsilon} \cdot \underline{A} \cdot \underline{\varepsilon} + \underline{\varepsilon} \cdot \underline{B} \cdot \underline{\kappa} + \frac{1}{2} \underline{\kappa} \cdot \underline{C} \cdot \underline{\kappa}. \quad (65)$$

Коэффициенты $\underline{\underline{A}}$, $\underline{\underline{B}}$, $\underline{\underline{C}}$ называются тензорами жесткости. В линейной теории тензоры жесткости — постоянные величины, причем тензоры $\underline{\underline{A}}$ и $\underline{\underline{C}}$ — симметричные, а тензор $\underline{\underline{B}}$ — произвольный. Согласно формулам (64), (65) вектор силы и вектор момента имеют вид

$$\underline{F} = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\varepsilon} + \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\kappa}; \quad \underline{M} = \underline{\varepsilon} \cdot \underline{\underline{B}} + \underline{\underline{C}} \cdot \underline{\kappa}. \quad (66)$$

Исходя из теории симметрии тензорных величин [5] можно показать, что если внутренняя структура частиц такова, что в отсчетной конфигурации система симметрична относительно двух взаимно перпендикулярных плоскостей, тензор $\underline{\underline{B}}$ обращается в ноль. При этом выражения для силы и момента упрощаются:

$$\underline{F} = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\varepsilon}; \quad \underline{M} = \underline{\underline{C}} \cdot \underline{\kappa}. \quad (67)$$

Для большинства простейших кристаллических решеток указанная симметрия имеет место.

Альтернативная форма представления соотношений упругости. Ранее, при получении соотношений упругости, использовался момент взаимодействия \underline{M} , вычисленный относительно середины отрезка, соединяющего взаимодействующие частицы. При этом тензоры жесткости $\underline{\underline{B}}$, $\underline{\underline{C}}$ также являлись тензорами, вычисленными относительно середины отрезка, соединяющего частицы. Такой подход удобен при применении теории симметрии для определения структуры тензоров жесткости. Однако при выводе уравнений движения дискретной среды удобнее использовать моменты взаимодействия, вычисленные относительно частиц. Поэтому получим соотношения упругости с использованием момента взаимодействия \underline{M}_1 , характеризующего воздействие частицы 2 на частицу 1 и вычисленного относительно частицы 1. Итак, перепишем уравнение (63) в форме

$$\begin{aligned} \dot{U} &= \underline{F}_1 \cdot \dot{\underline{\varepsilon}}_1 + \underline{M}_1 \cdot \dot{\underline{\kappa}}_1; \\ \underline{\varepsilon}_1 &= \underline{r} - \underline{r}_0 + \underline{r}_0 \times \underline{\varphi}_2; \quad \underline{\kappa}_1 = \underline{\varphi}_2 - \underline{\varphi}_1; \quad \underline{r} = \underline{r}_2 - \underline{r}_1. \end{aligned} \quad (68)$$

Векторы $\underline{\varepsilon}_1$ и $\underline{\kappa}_1$, на которых совершают работу вектор силы \underline{F}_1 и вектор момента \underline{M}_1 , так же как и векторы $\underline{\varepsilon}$, $\underline{\kappa}$ (см. формулы (63)), называются векторами деформации. Согласно (68) соотношения упругости принимают вид

$$\underline{F}_1 = \frac{\partial U}{\partial \underline{\varepsilon}_1}; \quad \underline{M}_1 = \frac{\partial U}{\partial \underline{\kappa}_1}. \quad (69)$$

Считая деформации малыми, представим внутреннюю энергию так:

$$U = \frac{1}{2} \underline{\varepsilon}_1 \cdot \underline{\tilde{A}} \cdot \underline{\varepsilon}_1 + \underline{\varepsilon}_1 \cdot \underline{\tilde{B}} \cdot \underline{\kappa}_1 + \frac{1}{2} \underline{\kappa}_1 \cdot \underline{\tilde{C}}_1 \cdot \underline{\kappa}_1. \quad (70)$$

Тогда, согласно формулам (69), (70), векторы силы и момента имеют вид

$$\underline{F}_1 = \underline{\tilde{A}} \cdot \underline{\varepsilon}_1 + \underline{\tilde{B}} \cdot \underline{\kappa}_1; \quad \underline{M}_1 = \underline{\varepsilon}_1 \cdot \underline{\tilde{B}} + \underline{\tilde{C}} \cdot \underline{\kappa}_1. \quad (71)$$

Тензоры жесткости $\underline{\tilde{A}}$, $\underline{\tilde{B}}$, $\underline{\tilde{C}}$ отличаются от тензоров жесткости \underline{A} , \underline{B} , \underline{C} . Эти величины связаны между собой соотношениями

$$\underline{\tilde{A}} = \underline{A}; \quad \underline{\tilde{B}} = \underline{B} - \frac{1}{2} \underline{A} \times \underline{r}_0; \quad \underline{\tilde{C}} = \underline{C} - \frac{1}{4} \underline{B}^T \times \underline{r}_0 - \frac{1}{4} \underline{r}_0 \times \underline{A} \times \underline{r}_0. \quad (72)$$

4.3 Уравнения динамики частиц кристаллической решетки

Рассматривается идеальная простая кристаллическая решетка, которую формируют частицы общего вида, взаимодействующие посредством сил и моментов (см. формулы (67)). Положение и ориентация частицы с номером α задаются вектором положения \underline{R}_α и вектором поворота $\underline{\varphi}_\alpha$. В отсчетном положении $\underline{R}_\alpha = \underline{r}_\alpha$, $\underline{\varphi}_\alpha = 0$. Предполагая перемещения и повороты малыми величинами, запишем уравнения динамики Эйлера для исходной частицы

$$m \ddot{\underline{u}} = \sum_{\alpha} \underline{F}_\alpha + \underline{q}_*; \quad \underline{\theta} \cdot \ddot{\underline{\varphi}} = \sum_{\alpha} \underline{M}_\alpha + \underline{m}_*. \quad (73)$$

Здесь m и $\underline{\theta}$ — масса и тензор инерции исходной частицы, \underline{F}_α , \underline{M}_α — вектор силы и вектор момента, действующие на исходную частицу со стороны частицы с индексом “ α ”, векторы \underline{q}_* и \underline{m}_* — внешние воздействия. Моменты \underline{M}_α и \underline{m}_* вычислены относительно исходной частицы.

Согласно третьему закону Ньютона для сил и его аналогу для моментов (61) имеют место следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \underline{F}_{-\alpha}(\underline{r}) + \underline{F}_\alpha(\underline{r} - \underline{a}_\alpha) &= 0; \\ \underline{M}_{-\alpha}(\underline{r}) + \frac{1}{2} \underline{a}_\alpha \times \underline{F}_{-\alpha}(\underline{r}) + \underline{M}_\alpha(\underline{r} - \underline{a}_\alpha) - \frac{1}{2} \underline{a}_\alpha \times \underline{F}_\alpha(\underline{r} - \underline{a}_\alpha) &= 0. \end{aligned} \quad (74)$$

Предполагая справедливость длинноволнового приближения, имеем

$$\underline{F}_\alpha(\underline{r} - \underline{a}_\alpha) \approx \underline{F}_\alpha(\underline{r}) - \underline{a}_\alpha \cdot \nabla \underline{F}_\alpha; \quad \underline{M}_\alpha(\underline{r} - \underline{a}_\alpha) \approx \underline{M}_\alpha(\underline{r}) - \underline{a}_\alpha \cdot \nabla \underline{M}_\alpha. \quad (75)$$

Из формул (74), (75) следуют соотношения

$$\begin{aligned} \underline{F}_{-\alpha}(\underline{r}) &\approx -\underline{F}_\alpha(\underline{r}) + \nabla \cdot \underline{a}_\alpha \underline{F}_\alpha; \\ \underline{M}_{-\alpha}(\underline{r}) &\approx -\underline{M}_\alpha(\underline{r}) + \underline{a}_\alpha \times \underline{F}_\alpha(\underline{r}) + \nabla \cdot \underline{a}_\alpha (\underline{M}_\alpha - \underline{a}_\alpha \times \underline{F}_\alpha). \end{aligned} \quad (76)$$

Используя формулы (76), можно показать, что

$$\sum_{\alpha} \underline{F}_{\alpha} = \nabla \cdot \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} \underline{F}_{\alpha};$$

$$\sum_{\alpha} \underline{M}_{\alpha} = \left(\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} \underline{F}_{\alpha} \right)_{\times} + \nabla \cdot \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} (\underline{M}_{\alpha} - \underline{a}_{\alpha} \times \underline{F}_{\alpha}). \quad (77)$$

Заметим, что разность $\underline{M}_{\alpha} - \underline{a}_{\alpha} \times \underline{F}_{\alpha}$ является моментом, действующим на исходную частицу со стороны частицы с индексом “ α ”, вычисленного относительно частицы с индексом “ α ”. Введем обозначения:

$$\underline{\tau} = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} \underline{F}_{\alpha}; \quad \underline{\mu} = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} (\underline{M}_{\alpha} - \underline{a}_{\alpha} \times \underline{F}_{\alpha}). \quad (78)$$

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

$$\rho = \frac{1}{V_*} m; \quad \rho \underline{\vartheta} = \frac{1}{V_*} \underline{\theta}; \quad \underline{q} = \frac{1}{V_*} \underline{q}_*; \quad \underline{m} = \frac{1}{V_*} \underline{m}_*. \quad (79)$$

Здесь ρ — массовая плотность, $\underline{\vartheta}$ — тензор инерции среды, приходящийся на единицу массы (или массовая плотность тензора инерции), \underline{q} — объемная плотность внешних сил, \underline{m} — объемная плотность внешних моментов.

Используя соотношения (77) и обозначения (78), (79), перепишем уравнения движения рассматриваемой частицы (73) в виде

$$\rho \underline{\ddot{u}} = \nabla \cdot \underline{\tau} + \underline{q}; \quad \rho \underline{\vartheta} \cdot \underline{\ddot{\varphi}} = \nabla \cdot \underline{\mu} + \underline{\tau}_{\times} + \underline{m}. \quad (80)$$

Отметим, что уравнения (80) по своей структуре совпадают с уравнениями динамики макроскопической моментной теории упругости.

4.4 Соотношения упругости

Согласно формулам (78) тензор моментных напряжений выражается через векторы моментов \underline{M}_{α} , вычисленные относительно исходной частицы. Поэтому будем использовать соотношения упругости в форме (71):

$$\underline{F}_{\alpha} = \underline{\tilde{A}}_{\alpha} \cdot \underline{\varepsilon}_{\alpha} + \underline{\tilde{B}}_{\alpha} \cdot \underline{\kappa}_{\alpha}; \quad \underline{M}_{\alpha} = \underline{\varepsilon}_{\alpha} \cdot \underline{\tilde{B}}_{\alpha} + \underline{\tilde{C}}_{\alpha} \cdot \underline{\kappa}_{\alpha}, \quad (81)$$

где векторы деформации $\underline{\varepsilon}_{\alpha}$, $\underline{\kappa}_{\alpha}$ определяются формулами (68) и имеют вид

$$\underline{\varepsilon}_{\alpha} = \underline{u}_{\alpha} - \underline{u} + \underline{a}_{\alpha} \times \underline{\varphi}_{\alpha}; \quad \underline{\kappa}_{\alpha} = \underline{\varphi}_{\alpha} - \underline{\varphi}. \quad (82)$$

Используя длинноволновое приближение, запишем

$$\underline{u}_\alpha = \underline{u}(r + \underline{a}_\alpha) \approx \underline{u}(r) + \underline{a}_\alpha \cdot \nabla \underline{u}; \quad \underline{\varphi}_\alpha = \underline{\varphi}(r + \underline{a}_\alpha) \approx \underline{\varphi}(r) + \underline{a}_\alpha \cdot \nabla \underline{\varphi}. \quad (83)$$

Тогда выражения для векторов деформации (82) примут вид

$$\underline{\varepsilon}_\alpha = \underline{a}_\alpha \cdot \nabla \underline{u} + \underline{a}_\alpha \times (\underline{\varphi} + \underline{a}_\alpha \cdot \nabla \underline{\varphi}); \quad \underline{\kappa}_\alpha = \underline{a}_\alpha \cdot \nabla \underline{\varphi}. \quad (84)$$

Далее будем считать $\underline{B}_\alpha = 0$, тогда $\underline{\tilde{B}}_\alpha = -\frac{1}{2}\underline{A}_\alpha \times \underline{a}_\alpha$. Подставив выражения (84) в соотношения упругости (81) и воспользовавшись соотношениями между тензорами жесткости (72), получим для тензора напряжений и тензора моментных напряжений (78) следующие выражения:

$$\underline{\tau} = {}^4\underline{A} \cdot \cdot \underline{\varepsilon} + {}^4\underline{B}_1 \cdot \cdot \underline{\kappa}; \quad \underline{\mu} = {}^4\underline{B}_2 \cdot \cdot \underline{\varepsilon} + {}^4\underline{C} \cdot \cdot \underline{\kappa}, \quad (85)$$

где тензоры деформации $\underline{\varepsilon}$ и $\underline{\kappa}$ имеют вид

$$\underline{\varepsilon} = \nabla \underline{u} + \underline{E} \times \underline{\varphi}; \quad \underline{\kappa} = \nabla \underline{\varphi}, \quad (86)$$

а тензоры жесткости ${}^4\underline{A}$, ${}^4\underline{B}_1$, ${}^4\underline{B}_2$, ${}^4\underline{C}$ вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} {}^4\underline{A} &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \underline{a}_\alpha \underline{A}_\alpha \underline{a}_\alpha; & {}^4\underline{B}_1 &= \frac{1}{4V_*} \sum_{\alpha} \underline{a}_\alpha \underline{A}_\alpha \times \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha; \\ {}^4\underline{B}_2 &= -\frac{1}{4V_*} \sum_{\alpha} \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha \times \underline{A}_\alpha \underline{a}_\alpha; & {}^4\underline{C} &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \underline{a}_\alpha \underline{\tilde{C}}_\alpha \underline{a}_\alpha. \end{aligned} \quad (87)$$

Таким образом, уравнения (80), (85), (86) представляют собой замкнутую систему уравнений, описывающих движение атомов простой кристаллической решетки. Входящие в эти уравнения тензоры жесткости выражаются через величины, характеризующие жесткость межатомных взаимодействий и структуру кристаллической решетки, по формулам (87).

4.5 Уравнение баланса энергии

Запишем уравнение баланса энергии двух взаимодействующих частиц — исходной частицы и частицы с номером α в форме (68):

$$\dot{W}_\alpha = \underline{F}_\alpha \cdot \dot{\underline{\varepsilon}}_\alpha + \underline{M}_\alpha \cdot \dot{\underline{\kappa}}_\alpha. \quad (88)$$

Уравнение баланса энергии, приходящейся на одну частицу, таково:

$$\dot{W} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \dot{W}_\alpha = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \left[\underline{F}_\alpha \cdot \dot{\underline{\varepsilon}}_\alpha + \underline{M}_\alpha \cdot \dot{\underline{\kappa}}_\alpha \right]. \quad (89)$$

Используя выражения (84), (86) для векторов и тензоров деформации, нетрудно показать, что уравнение (89) приводится к виду

$$\dot{W} = \left(\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \underline{F}_{\alpha} \underline{a}_{\alpha} \right) \cdot \cdot \underline{\dot{\varepsilon}} + \left[\frac{1}{2} \sum_{\alpha} (\underline{M}_{\alpha} - \underline{a}_{\alpha} \times \underline{F}_{\alpha}) \underline{a}_{\alpha} \right] \cdot \cdot \underline{\dot{\kappa}}. \quad (90)$$

Введем, как это делалось ранее,

$$U = W/m; \quad \rho U = W/V_*, \quad (91)$$

где U и ρU — внутренние энергии, приходящиеся на единицу массы и единицу объема, соответственно.

Тогда с использованием выражений (78) для тензора напряжений $\underline{\underline{\tau}}$ и тензора моментных напряжений $\underline{\underline{\mu}}$ уравнение (90) может быть записано в форме

$$(\rho U) \cdot = \underline{\underline{\tau}}^T \cdot \cdot \underline{\dot{\varepsilon}} + \underline{\underline{\mu}}^T \cdot \cdot \underline{\dot{\kappa}}. \quad (92)$$

Таким образом, доказано, что введенные ранее величины $\underline{\underline{\varepsilon}}$ и $\underline{\underline{\kappa}}$ — это именно те тензоры деформаций, на которых совершают работу тензор напряжений $\underline{\underline{\tau}}$ и тензор моментных напряжений $\underline{\underline{\mu}}$. Отметим, что тензоры деформации (86) в точности совпадают с тензорами деформации макроскопической моментной теории упругости. Тогда, согласно уравнению баланса энергии (92), тензор напряжений $\underline{\underline{\tau}}$ и тензор моментных напряжений $\underline{\underline{\mu}}$, определяемые формулами (78), должны в точности совпадать с соответствующими величинами макроскопической моментной теории упругости. Поскольку рассматривается упругое деформирование системы, согласно уравнению баланса энергии (92), соотношения упругости имеют вид

$$\underline{\underline{\tau}} = \frac{\partial \rho U}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}}, \quad \underline{\underline{\mu}} = \frac{\partial \rho U}{\partial \underline{\underline{\kappa}}}. \quad (93)$$

Представим плотность внутренней энергии так:

$$\rho U = \frac{1}{2} \underline{\underline{\varepsilon}} \cdot \cdot \cdot \cdot \underline{\underline{A}}_* \cdot \cdot \underline{\underline{\varepsilon}} + \underline{\underline{\varepsilon}} \cdot \cdot \cdot \cdot \underline{\underline{B}}_* \cdot \cdot \underline{\underline{\kappa}} + \frac{1}{2} \underline{\underline{\kappa}} \cdot \cdot \cdot \cdot \underline{\underline{C}}_* \cdot \cdot \underline{\underline{\kappa}}, \quad (94)$$

где $\underline{\underline{A}}_*$, $\underline{\underline{B}}_*$, $\underline{\underline{C}}_*$ — некоторые коэффициенты, являющиеся тензорами жесткости.

Подставив (94) в соотношения упругости (93), получим

$$\underline{\underline{\tau}}^T = \underline{\underline{A}}_* \cdot \cdot \underline{\underline{\varepsilon}} + \underline{\underline{B}}_* \cdot \cdot \underline{\underline{\kappa}}; \quad \underline{\underline{\mu}}^T = \underline{\underline{\varepsilon}} \cdot \cdot \underline{\underline{B}}_* + \underline{\underline{C}}_* \cdot \cdot \underline{\underline{\kappa}}. \quad (95)$$

Сравнивая выражения (95) с полученными выше выражениями (85), нетрудно установить связь между тензорами жесткости $\underline{\underline{A}}_*$, $\underline{\underline{B}}_*$, $\underline{\underline{C}}_*$ и

${}^4\underline{\underline{A}}$, ${}^4\underline{\underline{B}}_1$, ${}^4\underline{\underline{B}}_2$, ${}^4\underline{\underline{C}}$. Воспользовавшись теоремой о спектральном разложении симметричного тензора, представим тензоры второго ранга $\underline{\underline{A}}_\alpha$, $\tilde{\underline{\underline{C}}}_\alpha$, характеризующие жесткость межатомных связей, в виде разложения по собственным векторам:

$$\underline{\underline{A}}_\alpha = \sum_{n=1}^3 A_{\alpha n} \underline{e}_n \underline{e}_n; \quad \tilde{\underline{\underline{C}}}_\alpha = \sum_{n=1}^3 C_{\alpha n} \underline{e}_n \underline{e}_n. \quad (96)$$

Тогда тензоры жесткости кристаллической решетки (87), являющиеся коэффициентами в выражениях для $\underline{\underline{\tau}}$ и $\underline{\underline{\mu}}$ (см. формулы (85)), примут вид

$$\begin{aligned} {}^4\underline{\underline{A}} &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \sum_{n=1}^3 A_{\alpha n} \underline{a}_\alpha \underline{e}_n \underline{e}_n \underline{a}_\alpha; & {}^4\underline{\underline{B}}_1 &= \frac{1}{4V_*} \sum_{\alpha} \sum_{n=1}^3 A_{\alpha n} \underline{a}_\alpha \underline{e}_n \underline{e}_n \times \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha; \\ {}^4\underline{\underline{B}}_2 &= \frac{1}{4V_*} \sum_{\alpha} \sum_{n=1}^3 A_{\alpha n} \underline{a}_\alpha \underline{e}_n \times \underline{a}_\alpha \underline{e}_n \underline{a}_\alpha; & {}^4\underline{\underline{C}} &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \sum_{n=1}^3 C_{\alpha n} \underline{a}_\alpha \underline{e}_n \underline{e}_n \underline{a}_\alpha. \end{aligned} \quad (97)$$

Тензоры жесткости кристаллической решетки ${}^4\underline{\underline{A}}_*$, ${}^4\underline{\underline{B}}_*$, ${}^4\underline{\underline{C}}_*$, являющиеся коэффициентами в выражениях для $\underline{\underline{\tau}}^T$ и $\underline{\underline{\mu}}^T$ (см. формулы (95)), будут выглядеть так:

$$\begin{aligned} {}^4\underline{\underline{A}}_* &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \sum_{n=1}^3 A_{\alpha n} \underline{e}_n \underline{a}_\alpha \underline{e}_n \underline{a}_\alpha; & {}^4\underline{\underline{C}}_* &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \sum_{n=1}^3 C_{\alpha n} \underline{e}_n \underline{a}_\alpha \underline{e}_n \underline{a}_\alpha; \\ {}^4\underline{\underline{B}}_* &= \frac{1}{4V_*} \sum_{\alpha} \sum_{n=1}^3 A_{\alpha n} \underline{e}_n \underline{a}_\alpha \underline{e}_n \times \underline{a}_\alpha \underline{a}_\alpha. \end{aligned} \quad (98)$$

Таким образом, тензоры (98) получаются из тензоров (97) путем перестановки векторов в тетрадах.

4.6 Условия устойчивости квадратной решетки

Рассмотрим в качестве примера задачу об устойчивости квадратной кристаллической решетки (рис. 2, *a*). Предположим сначала, что атомы моделируются материальными точками. Если считать, что атомы в узлах решетки взаимодействуют только с ближайшими атомами, находящимися на расстоянии $|\underline{a}_\alpha| = a$, 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. Условие устойчивости конфигурации

решетки — положительная определенность плотности внутренней энергии (94), которая в данном случае имеет вид

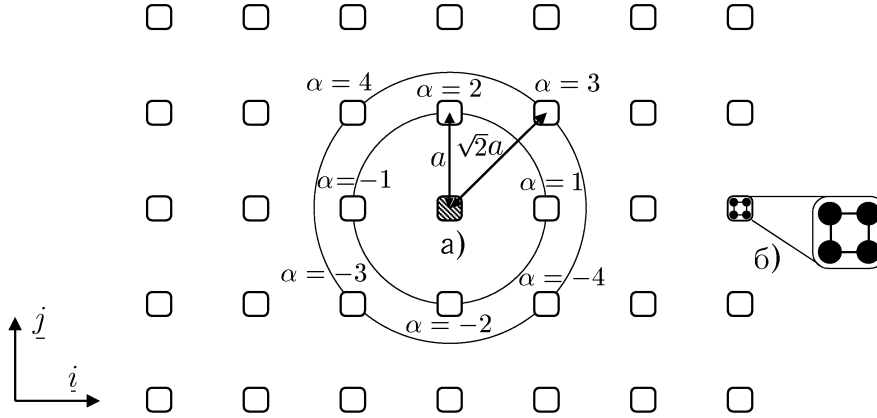


Рис. 2: Квадратная решетка: а — окрестность выделенной частицы; б — вариант внутренней структуры частицы (первая координационная сфера — $\alpha = \pm 1, \pm 2$; вторая координационная сфера — $\alpha = \pm 3, \pm 4$)

$$\rho U = \frac{a^2}{2V_*} [(A_1 + A_2)(\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2) + 2A_2\varepsilon_x\varepsilon_y + A_2(\varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yx})^2], \quad (99)$$

где A_1, A_2 — коэффициенты, характеризующие жесткости связи с частицами, находящимися на расстоянии a и $\sqrt{2}a$, соответственно.

Если взаимодействие между атомами описывается потенциалом M_i , то 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 (99) 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} .

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 компенсировать 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. Выражение для плотности внутренней энергии (94) имеет вид

$$\begin{aligned} \rho U = \frac{a^2}{2V_*} & \left[(A_1 + A_2 + \tilde{A}_2)(\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2) + 2(A_2 - \tilde{A}_2)\varepsilon_x\varepsilon_y + \right. \\ & \left. + (\tilde{A}_1 + A_2 + \tilde{A}_2)(\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{yx}^2) + 2(A_2 - \tilde{A}_2)\varepsilon_{xy}\varepsilon_{yx} + (C_1 + 2C_2)(\kappa_{xz}^2 + \kappa_{yz}^2) \right]. \end{aligned} \quad (100)$$

Здесь индексы “1” и “2” присвоены коэффициентам A , \tilde{A} и C , характеризующим жесткости связи с атомами первой координационной сферы (находящимися на расстоянии a) и атомами второй координационной сферы (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), C — моментную жесткость на поворот частиц друг относительно друга.

Квадратичная форма (100) будет положительно определенной при выполнении следующих неравенств:

$$\begin{aligned} A_1 + A_2 + \tilde{A}_2 &> |A_2 - \tilde{A}_2|; \\ \tilde{A}_1 + A_2 + \tilde{A}_2 &> |A_2 - \tilde{A}_2|; \\ C_1 + 2C_2 &> 0. \end{aligned} \quad (101)$$

Конкретные значения коэффициентов жесткости связи атомов решетки A_γ , \tilde{A}_γ , C_γ зависят от потенциала взаимодействия. Если потенциал достаточно быстро убывает с расстоянием и имеет структуру, сходную со структурой потенциала Ми, то несложно 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

$$\begin{aligned} A_1 > 0; \quad \tilde{A}_1 \geq 0; \quad C_1 > 0; \\ A_2 < 0; \quad \tilde{A}_2 < 0; \quad C_2 < 0, \end{aligned} \quad (102)$$

поперечные жесткости существенно меньше соответствующих продольных

$$|\tilde{A}_1| \ll A_1; \quad |\tilde{A}_2| \ll |A_2|, \quad (103)$$

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

$$|A_2| \ll |A_1|; \quad |\tilde{A}_2| \ll |\tilde{A}_1|; \quad |C_2| \ll |C_1|. \quad (104)$$

При выполнении условий (102) — (104) первое и третье неравенства из (101) выполняются автоматически, а второе неравенство принимает вид

$$\tilde{A}_1 > 2|A_2|. \quad (105)$$

Условие (105) 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 — рис. 2, б. Обозначим длину стороны квадрата h . Выберем некоторую исходную частицу, присвоим ей номер $\alpha = 0$ и рассмотрим взаимодействие данной частицы с соседними: $\alpha = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4$ (рис. 2, а). 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 $\sqrt{2}a$. Будем считать, что взаимодействие между материальными точками, принадлежащими разным частицам, описывается потенциалом Ми.

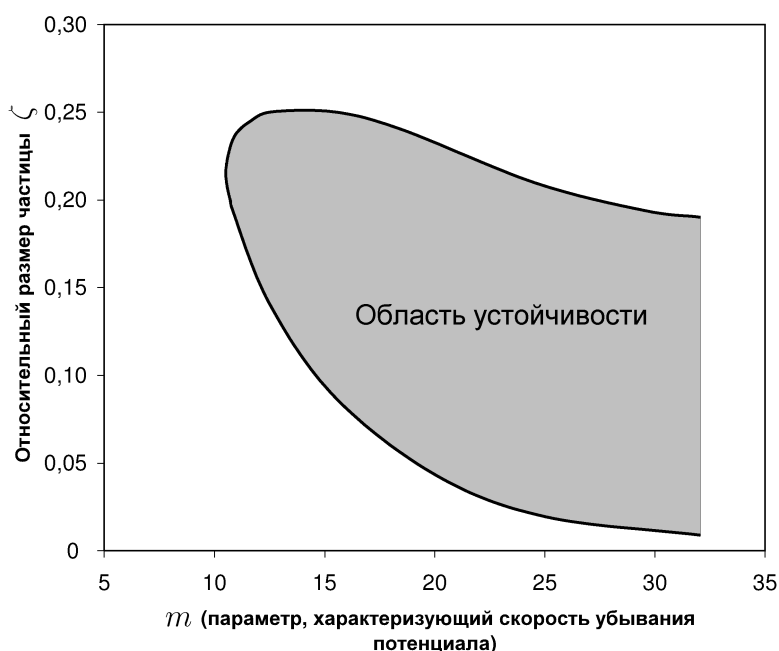


Рис. 3: Область устойчивости квадратной решетки при использовании моментного взаимодействия, определяемого потенциалом Ми при $n = 2m$

Нетрудно убедиться, что условия устойчивости (101) зависят от трех параметров: m , n и $\zeta = h/a$. Первые два параметра определяют скорость убывания потенциала Ми. Параметр ζ представляет собой отношение размера частицы к межатомному расстоянию. Представим область устойчивости на плоскости параметров ζ , m для случая $n = 2m$ (рис. 3).

Список литературы

- [1] **Борн М., Кунь Х.** Теория кристаллических решеток. М.: Изд-во иностр. лит., 1959. 488 с.
- [2] **Вустер У.** Применение тензоров и теории групп для описания физических свойств кристаллов. М.: Мир, 1977.
- [3] **Димитриенко Ю.И.** Тензорное исчисление. М.: Высш. шк., 2001. 575 с.
- [4] **Жилин П.А.** Векторы и тензоры второго ранга в трехмерном пространстве. СПб.: Нестор, 2001. 276 с.
- [5] **Жилин П.А.** Основные уравнения неклассической теории оболочек // Тр. ЛПИ. № 386. Л., 1982. С. 29–46.
- [6] **Жилин П.А.** Основные уравнения теории неупругих сред // Актуальные проблемы механики: Тр. XXVIII летней шк. СПб., 2001. С. 14–58.
- [7] **Жилин П.А.** Теоретическая механика. СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2001. 146 с.
- [8] **Жилин П.А.** Тензор поворота в описании кинематики твердого тела // Тр. СПбГТУ. № 443. 1992. С. 100–121.
- [9] **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. шк.-семинара, 1996. СПб., 1997. С. 313–337.
- [10] **Косевич А.М.** Основы механики кристаллической решетки. М.: Наука, 1972.
- [11] **Косевич А.М.** Теория кристаллической решетки. Харьков: Вища шк., 1988.
- [12] **Кочин Н.Е.** Векторное исчисление и начала тензорного исчисления. М.: Изд-во АН СССР, 1961. 426 с.
- [13] **Кривцов А.М.** К теории сред с микроструктурой // Тр. СПбГТУ. № 443. 1992. С. 9–17.
- [14] **Кривцов А.М., Кривцова Н.В.** Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // Дальневост. мат. журн. 2002. Т. 3, № 2. С. 254–276.
- [15] **Кунин И.А.** Теория упругих сред с микроструктурой. М.: Наука, 1975. 416 с.
- [16] **Лагалли М.** Векторное исчисление / ОНТИ. М.; Л., 1936. 343 с.
- [17] **Лейбфрид Г.** Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов / Пер. с нем. М. Физматгиз, 1963.
- [18] **Лейбфрид Г., Людвиг В.** Теория ангармонических эффектов в кристаллах. М.: Изд-во иностр. лит., 1963. 232 с.
- [19] **Лурье А.И.** Теория упругости. М.: Наука, 1970.
- [20] **Лурье А.И.** Нелинейная теория упругости. М.: Наука, 1980. 512 с.
- [21] **Морозов Н.Ф., Паукшто М.В.** Дискретные и гибридные модели механики разрушения. СПб. Изд-во С.-Петербур. ун-та, 1995. 160 с.
- [22] **Пальмов В.А.** Колебания упруго-пластических тел. М.: Наука, 1976. 348 с.
- [23] **Трусделл К.** Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. М.: Мир, 1975.
- [24] **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.
- [25] **Terstoff J.** New empirical approach for the structure and energy of covalent systems // Phys. Rev. B. 1988. Vol. 37. P. 6991–7000.

Оглавление

Введение	3
1 Общие сведения	4
1.1 Кристаллическая решетка	4
1.2 Длинноволновое приближение	5
1.3 Потенциалы взаимодействия	5
1.3.1 Потенциал Леннарда–Джонса	6
1.3.2 Потенциал Морзе	7
1.3.3 Потенциал Ми	7
1.4 Обозначения векторных и тензорных величин	8
2 Описание кристаллической упаковки частиц с учетом силовых взаимодействий	8
2.1 Уравнения динамики частиц кристаллической решетки	8
2.2 Соотношения упругости	10
2.3 Внутренняя энергия кристалла	12
3 Нахождение ряда макроскопических характеристик простых кристаллических решеток	13
3.1 Общие уравнения	14
3.2 Плотноупакованные решетки	15
3.3 Равновесное состояние кристаллической решетки	17
4 Описание кристаллической упаковки частиц с учетом моментных взаимодействий	19
4.1 Различные подходы к описанию межатомных взаимодействий	19
4.2 Описание взаимодействия частиц общего вида на основе моментной теории	20
4.3 Уравнения динамики частиц кристаллической решетки	23
4.4 Соотношения упругости	24
4.5 Уравнение баланса энергии	25
4.6 Условия устойчивости квадратной решетки	27
Список литературы	30

Иванова Елена Александровна
Кривцов Антон Мирославович
Морозов Никита Федорович
Фирсова Алла Дмитриевна

Теоретическая механика
Определение эквивалентных упругих характеристик
дискретных систем

Учебное пособие

Редактор *О.В. Мазрова*
Технический редактор *А.И. Колодяжная*

Оригинал-макет подготовлен авторами

Директор Издательства СПбГПУ *А.В. Иванов*

Свод. темплан 2003 г.

Лицензия ЛР № 020583 от 07.08.97

Налоговая льгота — Общероссийский классификатор продукции СК 005–93, т. 2;
95 3005 — учебная литература

Подписано в печать
Усл. печ. л.
Заказ

Формат
Уч.-изд. л.

Тираж

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет.
Издательство СПбГПУ, член Издательско-полиграфической ассоциации университетов России.
Адрес университета и издательства: 195251, Санкт-Петербург, Политехническая, 29.