Глава 6. СТРУКТУРНЫЕ И КОНТИНУАЛЬНЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОДНОСЛОЙНЫХ СРЕД

Саркисян С.О.
Ширакский государственный университет им. М.Налбандяна,
г. Гюмри, Армения, E-mail: s_sargsyan@yahoo.com

Введение

В настоящее время большой интерес вызывает проблема изучения физико-механических свойств материалов в зависимости от их внутренней (атомной или молекулярной) структуры. Особенно актуальным стала эта проблема в связи с развитием нанотехнологий, когда появились возможности управления атомной или молекулярной структурной для получения новых материалов с высокими физико-механическими свойствами [1-6].

Одним из основных методов изучения атомной или молекулярной системы веществ является метод молекулярной механики [5, 7-11], при котором движение отдельных частиц системы описываются классическими законами механики, в основном, при парном центральном силовом взаимодействии частиц.

Как устанавливается в работах [12-18], во многих случаях, простейшая модель, где атомы представляются материальными точками, связанными парным центральным силовым взаимодействием, оказывается недостаточной. С этой точки зрения в работах [12-18] предлагается новый подход, сущность которого состоит в дополнительном учете парного моментного взаимодействия. Это, в общем случае, приводит еще и к тому, что силы взаимодействия между атомами перестают быть центральными. Необходимость наряду с силовыми учесть также и моментные взаимодействия подтверждаются, например, при описании полимерных цепных структур, где без учета торсионного взаимодействия невозможно адекватное описание структурных свойств полимерных макромолекул.

Отметим, что модели с учетом моментного взаимодействия между атомами или молекулами обсуждаются и используются также в работах [19-23].

В работе [24] построена дискретная модель линейной цепочки атомов с учетом вращательного (моментного) взаимодействия между атомами и, одновременно, осуществлен предельный переход, обосновывая применимость прикладной теории микрополярных упругих тонких стержней [25], как континуальной модели рассматриваемого нанообьекта.

В данной работе развивается этот подход для следующей задачи. Рассмотрим плоскую решетку (монослой), состоящую из однородных сферических частиц массы m диаметра $2r,$ собственным моментном инерции $J,$ центры масс которых лежат в одной плоскости x_1, x_2 и, одновременно, в вершинах решетки. Будем учитывать взаимодействие с четырьмя самыми ближайшими соседями по решетке.

Рассмотрим два случаи: а) когда каждая частица системы движется в плоскости x_1x_2 (плоская задача). Это движение представляет собой смещение центра масс частицы с номером (j) по осям x_1, x_2 и вращение вокруг оси, проходящей через центр масс и параллельной оси $x_3;$ б) изгиб атомной системы частиц из плоскости $x_1x_2.$

Предположим, что силы или моменты, действующие на атомы монослоя, обусловленные влиянием других атомов, являются упругими, т.е. пропорциональными линейными или угловыми отклонениями между взаимодействующими атомами от равновесных.

Будем изучать малые колебания такой атомной системы.

1. Плоская задача

Рассмотрим случай а) (т.е колебания системы в плоскости x_1x_2). При движении в плоскости каждая частица имеет три степени свободы: смещение центра масс частицы с номером $N = N(i,j)$ (здесь, $i-$ номер строки, $j-$ номер столбца) по осям x_1 и x_2 (трансляционные степени свободы $v_1(i,j)$ и $v_2(i,j)$) и поворот относительно центра масс (ротационная степень свободы $\omega_3(i,j)$).

К плоским колебаниям атомного монослоя относятся сосредоточенные усилия: $\overline{T}_{11i,j}, \overline{T}_{22i,j+1}, \overline{T}_{11i+1,j}, \overline{T}_{22i,j}, \overline{S}_{22i,j+1}, \overline{S}_{12i,+1j}, \overline{S}_{12i,j}$ и сосредоточенные моменты: $\overline{L}_{13i+1,j}, \overline{L}_{13i,j}, \overline{L}_{23i,j+1}, \overline{L}_{23i,j}$, соответственно, действующие со стороны $(i,j-1), (i,j+1), (i-1,j), (i+1,j)$ близлежащих атомов, а $\frac{1}{2}\overline{q}_{x_1}(i,j)$, $\frac{1}{2}\overline{q}_{x_2}(i,j)$ и $\frac{1}{2}\overline{m}_{x_3}(i,j)$ – внешние сосредоточенные усилия и момент, действующие на атом с номером (i,j).

Напишем уравнения движения для атома под номером (i,j). Будем иметь:

$$
\begin{gathered}
\overline{T}_{i+1,j} - \overline{T}_{i-1,j} + \overline{S}_{i,j+1} - \overline{S}_{i,j-1} + \overline{q}_{x_1}(i,j) = m\frac{\partial^2 v_1^{i,j}}{\partial t^2}, \\
\overline{S}_{i+1,j} - \overline{S}_{i-1,j} + \overline{T}_{i,j+1} - \overline{T}_{i,j-1} + \overline{q}_{x_2}(i,j) = m\frac{\partial^2 v_2^{i,j}}{\partial t^2}, \\
\overline{L}_{i+1,j} - \overline{L}_{i-1,j} + \overline{L}_{i,j+1} - \overline{L}_{i,j-1} + (\overline{S}_{i+1,j}r + \overline{S}_{i-1,j}r) - (\overline{S}_{i,j+1}r + \overline{S}_{i,j-1}r) + \overline{m}_{x_3}(i,j) = J\frac{\partial^2 \omega_3(i,j)}{\partial t^2}.
\end{gathered}
\tag{1.1}
$$

К этим уравнениям движения следует присоединить геометрические соотношения (формулы для деформаций по оси x_1 и по оси x_2, углы сдвигов и относительные углы поворотов вокруг оси x_3).

Используя следующие обозначения

$$
\begin{gathered}
T_{11}(i,j) = \frac{\overline{T}_{11}(i,j)}{2r}, \quad S_{12}(i,j) = \frac{\overline{S}_{12}(i,j)}{2r}, \quad S_{21}(i,j) = \frac{\overline{S}_{21}(i,j)}{2r}, \quad T_{22}(i,j) = \frac{\overline{T}_{22}(i,j)}{2r}, \\
L_{13}(i,j) = \frac{\overline{L}_{13}(i,j)}{2r}, \quad L_{23}(i,j) = \frac{\overline{L}_{23}(i,j)}{2r},
\end{gathered}
\tag{1.2}
$$

перепишем уравнения движения (1.1):

Уравнения движения

$$
\begin{gathered}
T_{11\,i+1,j} - T_{11\,i,j} + S_{21\,i,j+1} - S_{21\,i,j} + \frac{\overline{q}_{x_1\,i,j}}{2r} = \frac{m}{2r}\frac{\partial^2 v_{1i,j}}{\partial t^2}, \\
T_{22\,i,j+1} - T_{22\,i,j} + S_{12\,i+1,j} - S_{12\,i,j} + \frac{\overline{q}_{x_2\,i,j}}{2r} = \frac{m}{2r}\frac{\partial^2 v_{2i,j}}{\partial t^2},
\end{gathered}
\tag{1.3}
$$

$$
L_{13\,i+1,j} - L_{13\,i,j} + L_{23\,i,j+1} - L_{23\,i,j} + \frac{\overline{S}_{12i+1,j} + \overline{S}_{12i,j}}{2} - \frac{\overline{S}_{21i,j+1} + \overline{S}_{12i,j}}{2} + \frac{\overline{m}_{3i,j}}{2r} = \frac{J}{2r}\frac{d^2\omega_{3i,j}}{dt^2}.
$$

Относительное перемещение по оси x_1 центра тяжести атома O_{i+j} под номером $(i+1, j)$ относительно центра $O_{i,j}$ будет

$$\gamma_{11}(i,j)=\frac{v_1(i+1,j)-v_1(i,j)}{2r} \tag{1.4}$$

и, аналогично, перемещение по оси x_2 центра тяжести $O_{i+1,j}$ атома под номером $(i, j+1)$ относительно центра $O_{i,j}$ будет

$$\gamma_{22}(i,j)=\frac{v_2(i,j+1)-v_2(i,j)}{2r}. \tag{1.5}$$

Углы сдвигов будут:

$$\gamma_{12}(i,j)=\frac{v_2(i+1,j)-v_2(i,j)}{2r}+\omega_3(i,j), \quad \gamma_{21}(i,j)=\frac{v_1(i,j+1)-v_1(i,j)}{2r}-\omega_3(i,j) \tag{1.6}$$

Относительное вращение частицы под номером $(i+1, j)$ относительно частицы (i, j) и, аналогично, относительное вращение частицы под номером $(i, j+1)$ относительно частицы (i, j) будут:

$$\chi_{13}(i,j)=\frac{\omega_3(i+1,j)-\omega_3(i,j)}{2r}, \qquad \chi_{23}(i,j)=\frac{\omega_3(i,j+1)-\omega_3(i,j)}{2r}. \tag{1.7}$$

Физические соотношения между линейными деформациями, углов сдвига, углов поворота и усилиями-моментами, будут выражаться так:

$$\begin{gathered}
T_{11}(i,j)=k_4\gamma_{11}(i,j)+k_5\gamma_{22}(i,j) \qquad T_{22}(i,j)=k_4\gamma_{22}(i,j)+k_5\gamma_{11}(i,j) \\
S_{12}(i,j)+S_{21}(i,j)=k_1\left(\gamma_{12}(i,j)+\gamma_{21}(i,j)\right) \qquad S_{12}(i,j)-S_{21}(i,j)=k_2\left(\gamma_{12}(i,j)-\gamma_{21}(i,j)\right) \\
L_{13}(i,j)=k_3\chi_{13}(i,j) \qquad L_{23}(i,j)=k_3\chi_{23}(i,j)
\end{gathered} \tag{1.8}$$

Уравнения движения (1.3), геометрические соотношения (1.4)-(1.7) и физические соотношения (1.8) представляют собой математическую модель (модель молекулярной динамики) дискретной (атомной) структуры вещества, к которой следует присоединить начальные условия.

Для перехода к континуальной модели, систему уравнений (1.3), (1.4)-(1.7), (1.8) представим в следующем виде:

Уравнения движения

$$\begin{gathered}
\frac{T_{11\,i+1,j}-T_{11\,i,j}}{2r}+\frac{S_{21\,i,j+1}-S_{21\,i,j}}{2r}+\frac{q_{x_1\,i,j}}{2r\cdot 2r}=\frac{m}{2r\cdot 2r}\frac{d^2v_{1\,i,j}}{dt^2}, \\
\frac{S_{12\,i+1,j}-S_{12\,i,j}}{2r}+\frac{T_{22\,i,j+1}-T_{22\,i,j}}{2r}+\frac{q_{x_2\,i,j}}{2r\cdot 2r}=\frac{m}{2r\cdot 2r}\frac{d^2v_{2\,i,j}}{dt^2}, \\
\frac{L_{13\,i+1,j}-L_{13\,i,j}}{2r}+\frac{L_{23\,i,j+1}-L_{23\,i,j}}{2r}+\frac{S_{12\,i+1,j}+S_{12\,i,j}}{2}- \\
-\frac{S_{21\,i,j+1}+S_{21}(i,j)}{2}+\frac{m_3(i,j)}{2r\cdot 2r}=\frac{J}{2r\cdot 2r}\frac{d^2\omega_3(i,j)}{dt^2}.
\end{gathered} \tag{1.9}$$

Геометрические соотношения

$$\gamma_{11}(i,j)=\frac{v_1(i+1,j)-v_1(i,j)}{2r}, \quad \gamma_{22}(i,j)=\frac{v_2(i,j+1)-v_2(i,j)}{2r}, \tag{1.10}$$

$$\gamma_{12}(i,j)=\frac{v_2(i+1,j)-v_2(i,j)}{2r}+\omega_3(i,j),\quad \gamma_{21}(i,j)=\frac{v_1(i,j+1)-v_1(i,j)}{2r}-\omega_3(i,j),$$

$$\chi_{13}(i,j)=\frac{\omega_3(i+1,j)-\omega_3(i,j)}{2r},\quad \chi_{23}(i,j)=\frac{\omega_3(i,j+1)-\omega_3(i,j)}{2r}.$$

Физические соотношения

$$T_{11}(i,j)=k_4\gamma_{11}(i,j)+k_5\gamma_{22}(i,j),\quad T_{22}(i,j)=k_4\gamma_{22}(i,j)+k_5\gamma_{11}(i,j),$$

$$S_{12}(i,j)=\frac{k_1+k_2}{2}\gamma_{12}(i,j)+\frac{k_1-k_2}{2}\gamma_{21}(i,j),\quad S_{21}(i,j)=\frac{k_1+k_2}{2}\gamma_{21}(i,j)+\frac{k_1-k_2}{2}\gamma_{12}(i,j),\qquad (1.11)$$

$$L_{13}(i,j)=k_3\chi_{13}(i,j),\quad L_{23}(i,j)=k_3\chi_{23}(i,j).$$

Предположим, что характерный период волнового движения в дискретном монослое атомов много больше расстояния между атомами. В этом случае возможны следующие замены [7,26]:

$$f(i,j,t)=f(x,y,t),$$

$$f(i+1,j,t)\to f(x_1+2r,x_2,t)=f(x_1,x_2,t)+\frac{\partial f_1(x_1,x_2,t)}{\partial x_1}2r+\ldots,\qquad (1.12)$$

$$f(i,j+1,t)\to f(x_1,x_2+2r,t)=f(x_1,x_2,t)+\frac{\partial f_1(x_1,x_2,t)}{\partial x_2}2r+\ldots.$$

Рассмотрим отношения

$$\frac{m}{2r2r},\quad \frac{J}{2r2r},\quad \frac{\overline{q}_{x_1\,i,j}}{2r2r},\quad \frac{\overline{q}_{x_2\,i,j}}{2r2r},\quad \frac{\overline{m}_{3i,j}}{2r2r}$$

и осуществим двумерный предельный переход: $2r\to 0,\ 2r\to 0,$ получим

$$\lim_{\substack{2r\to0\\2r\to0}}\frac{m}{2r2r}=\rho_0,\quad \lim_{\substack{2r\to0\\2r\to0}}\frac{J}{2r2r}=J_0,\qquad (1.13)$$

$$\lim_{\substack{2r\to0\\2r\to0}}\frac{\overline{q}_{x_1}(i,j)}{2r2r}=q_{x_1}(x_1,x_2,t),\quad \lim_{\substack{2r\to0\\2r\to0}}\frac{\overline{q}_{x_2}(i,j)}{2r2r}=q_{x_2}(x_1,x_2,t),\quad \lim_{\substack{2r\to0\\2r\to0}}\frac{\overline{m}_3(i,j)}{2r2r}=m_3(x_1,x_2,t).\qquad (1.14)$$

Здесь ρ_0- поверхностная плотность массы вещества, J_0- поверхностная плотность инерционного момента вещества, $q_{x_1},q_{x_2}-$ поверхностная плотность внешних силовых воздействий, а m_3- поверхностная плотность внешнего моментного воздействия.

В итоге, в континуальном приближении получим:

Уравнения движения

$$\frac{\partial T_{11}(x_1,x_2,t)}{\partial x_1}+\frac{\partial S_{21}(x_1,x_2,t)}{\partial x_2}+q_{x_1}(x_1,x_2,t)=\rho_0\frac{\partial^2 v_1(x_1,x_2,t)}{\partial t^2},$$

$$\frac{\partial S_{12}(x_1,x_2,t)}{\partial x_1}+\frac{\partial T_{22}(x_1,x_2,t)}{\partial x_2}+q_{x_2}(x_1,x_2,t)=\rho_0\frac{\partial^2 v_2(x_1,x_2,t)}{\partial t^2},\qquad (1.15)$$

$$\frac{\partial L_{13}(x_1,x_2,t)}{\partial x_1}+\frac{\partial L_{23}(x_1,x_2,t)}{\partial x_2}+S_{12}(x_1,x_2,t)-S_{21}(x_1,\ldots)+\ldots=\frac{\partial\,\omega}{\partial}\ldots$$

2

3 x_1, x_2, t

. t^2

Геометрические соотношения

$$\gamma_{11}(x_1,x_2,t)=\frac{\partial v_1(x_1,x_2,t)}{\partial x_1},\qquad \gamma_{22}(x_1,x_2,t)=\frac{\partial v_2(x_1,x_2,t)}{\partial x_1},$$

$$\gamma_{12}(x_1,x_2,t)=\frac{\partial v_2(x_1,x_2,t)}{\partial x_1}+\omega_3(x_1,x_2,t),\tag{1.16}$$

$$\gamma_{21}(x_1,x_2,t)=\frac{\partial v_1(x_1,x_2,t)}{\partial x_2}-\omega_3(x_1,x_2,t),$$

$$\chi_{13}(x_1,x_2,t)=\frac{\partial\omega_3(x_1,x_2,t)}{\partial x_1},\qquad \chi_{23}(x_1,x_2,t)=\frac{\partial\omega_3(x_1,x_2,t)}{\partial x_2}.$$

Физические соотношения упругости

$$T_{11}=k_4\gamma_{11}(x_1,x_2,t)+k_5\gamma_{22}(x_1,x_2,t),\qquad T_{22}(x_1,x_2,t)=k_4\gamma_{22}(x_1,x_2,t)+k_5\gamma_{11}(x_1,x_2,t),$$

$$S_{12}(x_1,x_2,t)=\frac{k_1+k_2}{2}\gamma_{12}(x_1,x_2,t)+\frac{k_1-k_2}{2}\gamma_{21}(x_1,x_2,t),\tag{1.17}$$

$$S_{21}(x_1,x_2,t)=\frac{k_1+k_2}{2}\gamma_{21}(x_1,x_2,t)+\frac{k_1-k_2}{2}\gamma_{12}(x_1,x_2,t),$$

$$L_{13}(x_1,x_2,t)=k_3\gamma_{13}(x_1,x_2,t),\ L_{23}(x_1,x_2,t)=k_3\gamma_{23}(x_1,x_2,t).$$

Легко убедиться, что система уравнений (1.15)-(1.17) континуальной модели атомного монослоя полностью совпадает с системой уравнений плоского напряженного состояния микрополярной упругой тонкой пластинки [27] и, между физическими постоянными k_4,k_5,k_1,k_2,k_3 и упругими постоянными этой пластинки, умноженные на $2h$ ($2h$ - толщина пластинки), имеют место следующие равенства:

$$k_4=\frac{2Eh}{1-\nu^2},\quad k_5=2h\frac{E\nu}{1-\nu^2},\quad k_1=4\mu h,\quad k_2=4\alpha h,\quad k_3=\frac{4\gamma\varepsilon}{\gamma+\varepsilon}2h.\tag{1.18}$$

Здесь, $E,\nu-$ модуль упругости и коэффициент Пуассона (классические постоянные) материала пластинки, $\alpha,\gamma,\varepsilon-$ новые микрополярные постоянные материала пластинки.

Теперь перейдем к вариационному изложению как дискретной системы атомного монослоя, так и его континуальной модели.

Вариационный принцип Гамильтона для общих механических систем можем записать в следующем общем виде:

$$\delta\int_{t_0}^{t_1}(T-U)dt=0,\tag{1.19}$$

где $T-$ кинематическая энергия системы, а $U-$ полная потенциальная энергия система, $L=T-U$ представляет собой лагранжиан данной системы, t_0 и t_1- начало и конец движения.

Кинетическая энергия рассматриваемой дискретной системы частиц будет

$$T=\frac{1}{2}\sum_i\sum_j\left\{m\left[\left(\frac{dv_{1\,i,j}}{dt}\right)^2+\left(\frac{dv_{2\,i,j}}{dt}\right)^2\right]+J\left(\frac{d\omega_{3\,i,j}}{dt}\right)^2\right\},\tag{1.20}$$

а полная потенциальная энергия системы будет выражаться следующим образом:

$$U=\frac{1}{2}\sum_i\sum_j\Bigg\langle\Bigg\{k_5\left(\frac{v_{1\,i+1,j}-v_{1\,i,j}}{2r}+\frac{v_{2\,i,j+1}-v_{2\,i,j}}{2r}\right)^2+$$
$$+(k_4-k_5)\left[\left(\frac{v_{1\,i+1,j}-v_{1\,i,j}}{2r}\right)^2+\left(\frac{v_{2\,i,j+1}-v_{2\,i,j}}{2r}\right)^2\right]+$$
$$+k_1\left[\frac{v_2(i+1,j)-v_2(i,j)}{2r}+\frac{v_1(i,j+1)-v_1(i,j)}{2r}\right]^2+k_2\left[\frac{v_2(i+1,j)-v_2(i,j)}{2r}-\frac{v_1(i,j+1)-v_1(i,j)}{2r}+2\omega_3(i,j)\right]^2+ \tag{1.21}$$
$$+k_3\left(\frac{\omega_3(i+1,j)-\omega_3(i,j)}{2r}\right)^2+k_3\left(\frac{\omega_3(i,j+1)-\omega_3(i,j)}{2r}\right)^2\Bigg\}-$$
$$-\left(\bar q_{x_1}(i,j)\,v_1(i,j)+\bar q_{x_2}(i,j)\,v_2(i,j)+\bar m_3(i,j)\,\omega_3(i,j)\right)\Bigg\rangle 2r\,2r.$$

Если при помощи (1.20) и (1.21) составить лагранжиан дискретной системы, тогда выполняя варьирование в вариационном уравнении Гамильтона (1.19), получим систему уравнений движения (1.9) частицы под номером (i,j).

Для получения вариационного уравнения Гамильтона для континуальной модели атомного монослоя дискретных частиц, лагранжиан $L=T-U$ (где T определяется формулой (1.20), а U –формулой (1.21)) перепишем так:

$$L=\sum_i\sum_j L_{ij}\,2r\,2r \tag{1.22}$$

и предельным переходом придем к выражению лагранжиана для континуальной модели:

$$L=\frac{1}{2}\iint\Bigg\langle\left[\rho_0\left(\frac{\partial v_1}{\partial t}\right)^2+\left(\frac{\partial v_2}{\partial t}\right)^2+J_0\left(\frac{\partial\omega_3}{\partial t}\right)^2\right]-\Bigg\{k_5\left(\frac{\partial v_1}{\partial x_1}+\frac{\partial v_2}{\partial x_2}\right)^2+$$
$$+(k_4-k_5)\left[\left(\frac{\partial v_1}{\partial x_1}\right)^2+\left(\frac{\partial v_2}{\partial x_2}\right)^2\right]+k_1\left(\frac{\partial v_2}{\partial x_1}+\frac{\partial v_1}{\partial x_2}\right)^2+k_2\left(\frac{\partial v_2}{\partial x_1}-\frac{\partial v_1}{\partial x_2}+2\omega_3\right)^2+ \tag{1.23}$$
$$+k_3\left(\frac{\partial\omega_3}{\partial x_1}\right)^2+k_3\left(\frac{\partial\omega_3}{\partial x_2}\right)^2\Bigg\}+\left(q_{x_1}v_1+q_{x_2}v_2+m_3\omega_3\right)\Bigg\rangle dx_1\,dx_2.$$

Если учесть соответствия (1.18), тогда можем утверждать, что лагранжиан (1.23) континуальной модели атомного монослоя при плоской задаче одновременно представляет из себя лагранжиан плоского напряженного состояния микрополярных упругих тонких пластин [28].

2.Задача изгиба

Рассмотрим случай б), т.е. колебания рассматриваемой среды из плоскости x_1x_2. При движении из плоскости x_1x_2 каждая частица имеет три степени свободы: смещение центра масс частицы с номером $N(i,j)$ по оси x_3 (трансляционная степень свободы $U_3(i,j)$) и вращения относительно осей x_1 и x_2, проходящих через центра масс частицы (ротационные степени свободы $\omega_1(i,j)$ и $\omega_2(i,j)$).

К задаче изгиба атомного монослоя из плоскости x_1x_2 относятся сосредоточенные усилия: $\bar{N}_{13\,i,j}$, $\bar{N}_{23\,i,j}$ и сосредоточенные моменты: $L_{11}(i,j), L_{22}(i,j), L_{12}(i,j), L_{21}(i,j)$. Внешние сосредоточенные силы, действующие на атом с номером (i,j) это $\bar{q}_1(i,j), \bar{q}_2(i,j), \bar{q}_3(i,j)$, и сосредоточенные моменты- $\bar{m}_1(i,j), \bar{m}_2(i,j)$.

Уравнения движения атома с номером (i,j) будут:

$$\begin{cases} \bar{N}_{13\,i+1,j} - \bar{N}_{13\,i,j} + \bar{N}_{23\,i,j+1} - \bar{N}_{23\,i,j} + \bar{q}_{3\,i,j} = m\dfrac{d^2 v_{3\,i,j}}{dt^2} \\ \bar{L}_{12\,i+1,j} - \bar{L}_{12\,i,j} + \bar{L}_{22\,i,j+1} - \bar{L}_{22\,i,j} - \bar{N}_{13\,i+1,j}\,r - \bar{N}_{13\,i,j}\,r + \\ +\dfrac{\bar{m}_{2\,i,j}}{2} + \dfrac{\bar{m}_{2\,i,j}}{2} + q_{1\,i,j}\,2r = J\dfrac{d^2\omega_{2\,i,j}}{dt^2}, \\ \bar{L}_{21\,i,j+1} - \bar{L}_{21\,i,j} + \bar{L}_{11\,i+1,j} - \bar{L}_{11\,i,j} - \bar{N}_{23\,i,j+1}\,r - N_{23\,i,j}\,r + \dfrac{\bar{m}_{1\,i,j}}{2} + \\ +\dfrac{\bar{m}_{1\,i,j}}{2} - \bar{q}_{2}(i,j)\,2r = J\dfrac{d^2\omega_{1}(i,j)}{dt^2}. \end{cases} \tag{2.1}$$

Примем следующие обозначения

$$N_{13}(i,j) = \frac{\bar{N}_{13}(i,j)}{2r},\quad N_{23}(i,j) = \frac{\bar{N}_{23}(i,j)}{2r},\quad L_{11}(i,j) = \frac{\bar{L}_{11}(i,j)}{2r},\quad L_{22}(i,j) = \frac{\bar{L}_{22}(i,j)}{2r},$$
$$L_{12}(i,j) = \frac{\bar{L}_{12}(i,j)}{2r},\quad L_{21}(i,j) = \frac{\bar{L}_{21}(i,j)}{2r}. \tag{2.2}$$

В новых обозначениях, уравнения движения (2.2) можем представить в следующем виде:

$$\begin{cases} N_{13\,i+1,j} - N_{13\,i,j} + N_{23\,i,j+1} - N_{23\,i,j} + \dfrac{q_{3i,j}}{2r} = \dfrac{m}{2r}\dfrac{d^2 v_{3i,j}}{dt^2}, \\ L_{12\,i+1,j} - L_{11\,i,j} + L_{22\,i,j+1} - L_{22\,i,j} - \dfrac{N_{13i+1,j} + N_{13i,j}}{2} + \dfrac{m_{2i,j}}{2r} + q_{1\,i,j}\,2r = \dfrac{J}{2r}\dfrac{d^2\omega_{2i,j}}{dt^2}, \\ L_{21\,i,j+1} - L_{21\,i,j} + L_{11\,i+1,j} - L_{11\,i,j} + \dfrac{N_{23\,i,j+1} + N_{23\,i,j}}{2} + \dfrac{m_{1\,i,j}}{2r} - q_{2\,i,j} = \dfrac{J}{2r}\dfrac{d^2\omega_{1\,i,j}}{dt^2}. \end{cases} \tag{2.3}$$

Теперь обе части каждого уравнения из (2.3) разделим на $2r$ и уравнения движения перепишем в окончательном виде так:

$$\begin{cases} \dfrac{N_{13i+1,j} - N_{13i,j}}{2r} + \dfrac{N_{23i,j+1} - N_{23i,j}}{2r} + \dfrac{q_{3i,j}}{2r2r} = \dfrac{m}{2r2r}\dfrac{d^2 v_{3i,j}}{dt^2}, \\ \dfrac{L_{12i+1,j} - L_{12i,j}}{2r} + \dfrac{L_{22i,j+1} - L_{22i,j}}{2r} - \dfrac{N_{13i+1,j} + N_{13i,j}}{2} + \dfrac{m_{2i,j}}{2r2r} + q_{1\,i,j} = \dfrac{J}{2r2r}\dfrac{d^2\omega_{2i,j}}{dt^2}, \\ \dfrac{L_{21\,i,j+1} - L_{21\,i,j}}{2r} + \dfrac{L_{11\,i+1,j} - L_{11\,i,j}}{2r} + \dfrac{N_{23\,i,j+1} + N_{23\,i,j}}{2} + \dfrac{m_1(i,j)}{2r2r} - q_2(i,j) = \dfrac{J}{2r2r}\dfrac{d^2\omega_1(i,j)}{dt^2}. \end{cases} \tag{2.4}$$

Здесь приняты следующие обозначения:

$$\tilde{q}_1(i,j)=\frac{\bar{q}_1(i,j)}{2r},\qquad \tilde{q}_2(i,j)=\frac{\bar{q}_2(i,j)}{2r}. \tag{2.5}$$

Рассматривая геометрическую сторону деформаций атомного монослоя для сдвиговых деформаций в плоскостях x_1x_3 и x_2x_3, а также для изгибов и кручений имеем:

$$\gamma_{13}(i,j)=\frac{v_3(i+1,j)-v_3(i,j)}{2r}+\omega_2(i,j),\qquad \gamma_{23}(i,j)=\frac{v_3(i,j+1)-v_3(i,j)}{2r}-\omega_1(i,j),$$
$$\chi_{11}(i,j)=\frac{\omega_1(i+1,j)-\omega_1(i,j)}{2r},\qquad \chi_{22}(i,j)=\frac{\omega_2(i,j+1)-\omega_2(i,j)}{2r}, \tag{2.6}$$
$$\chi_{12}(i,j)=\frac{\omega_2(i+1,j)-\omega_2(i,j)}{2r},\qquad \chi_{21}(i,j)=\frac{\omega_1(i,j+1)-\omega_1(i,j)}{2r}.$$

Физические соотношения между приведенными усилиями и моментами, с одной стороны, и деформациями и изгиб-кручениями, с другой стороны, можем представить в следующем виде:

$$\gamma_{13}(i,j)=c_1N_{13}(i,j)+c_2\tilde{q}(i,j),\qquad \gamma_{23}(i,j)=c_1N_{23}(i,j)+c_2\tilde{q}(i,j),$$
$$L_{12}(i,j)=k_1\chi_{12}(i,j)+k_2\chi_{21}(i,j),\qquad L_{21}(i,j)=k_1\chi_{21}(i,j)+k_2\chi_{12}(i,j), \tag{2.7}$$
$$L_{11}(i,j)=k_3\chi_{11}(i,j)+k_4\chi_{22}(i,j),\qquad L_{22}(i,j)=k_3\chi_{22}(i,j)+k_4\chi_{11}(i,j),$$

где $c_1, c_2, k_1, k_2, k_3, k_4$ физические постоянные рассматриваемой атомной системы.

Если использовать обозначение

$$\frac{1}{c_1}=k_5,$$

тогда физические соотношения (2.7) примут вид:

$$N_{13}(i,j)=k_5\left(\gamma_{13}(i,j)-c_2\tilde{q}_1(i,j)\right),\qquad N_{23}(i,j)=k_5\left(\gamma_{23}(i,j)-c_2\tilde{q}_2(i,j)\right),$$
$$L_{11}(i,j)=k_3\chi_{11}(i,j)+k_4\chi_{22}(i,j),\qquad L_{22}(i,j)=k_3\chi_{22}(i,j)+k_4\chi_{11}(i,j), \tag{2.8}$$
$$L_{12}(i,j)=k_1\chi_{12}(i,j)+k_2\chi_{21}(i,j),\qquad L_{21}(i,j)=k_1\chi_{21}(i,j)+k_2\chi_{12}(i,j).$$

Полная потенциальная энергия системы (энергия деформаций плюс- потенциал внешних усилий и моментов) будет выражаться так:

$$\begin{aligned} U=\frac{1}{2}\sum_i\sum_j\Bigg\{ & k_5\left[\left(\frac{v_{3\,i+1,j}-v_{3\,i,j}}{2r}+\omega_{2\,i,j}\right)-c_2q_{1\,i,j}\right]^2+k_5\left[\left(\frac{v_{3\,i,j+1}-v_{3\,i,j}}{2r}-\omega_{1\,i,j}\right)-c_2q_{2\,i,j}\right]^2+\\ &+k\left[\left(\frac{\omega_{2\,i+1,j}-\omega_{2\,i,j}}{2r}\right)+\left(\frac{\omega_{1\,i,j+1}-\omega_{1\,i,j}}{2r}\right)\right]^2+\left(k_1-k_2\right)\left(\frac{\omega_{2\,i+1,j}-\omega_{2\,i,j}}{2r}\right)^2+\\ &+\left(k_1-k_2\right)\left(\frac{\omega_{1\,i,j+1}-\omega_{1\,i,j}}{2r}\right)^2+k_4\left[\left(\frac{\omega_{1\,i+1,j}-\omega_{1\,i,j}}{2r}\right)+\left(\frac{\omega_{2\,i,j+1}-\omega_{2\,i,j}}{2r}\right)\right]^2+\\ &+\left(k_3-k_4\right)\left(\frac{\omega_{1\,i+1,j}-\omega_{1\,i,j}}{2r}\right)^2+\left(k_3-k_4\right)\left(\frac{\omega_{2\,i,j+1}-\omega_{2\,i,j}}{2r}\right)^2\Bigg\}-\\ &-\sum_i\sum_j\left(-q_{3\,i,j}v_{3\,i,j}+-m_{1\,i,j}\omega_{1\,i,j}+-m_{2\,i,j}\omega_{2\,i,j}+-q_{x_1\,i,j}2r\,\omega_{2\,i,j}--q_{x_2\,i,j}2r\,\omega_{1\,i,j}\right). \end{aligned} \tag{2.9}$$

Кинетическая энергия системы будет:

$$T=\frac{1}{2}\sum_i\sum_j\left[m\left(\frac{dv_{3\ i,j}}{dt}\right)^2+J\left(\frac{d\omega_{1\ i,j}}{dt}\right)^2+J\left(\frac{d\omega_{2\ i,j}}{dt}\right)^2\right], \tag{2.10}$$

Гамильтониан системы: $L=T-U,$ при помощи (2.9), (2.10), представим так:

$$L=\sum_i\sum_j L_{ij}2r2r,\quad L_{ij}=\frac{1}{2}\left[\frac{m}{2r2r}\left(\frac{dv_{3\ i,j}}{dt}\right)^2+\frac{J}{2r2r}\left(\frac{d\omega_{1\ i,j}}{dt}\right)^2+\frac{J}{2r2r}\left(\frac{d\omega_{2\ i,j}}{dt}\right)^2\right]-$$

$$-\frac{1}{2}\left\{\sum_i\sum_j\left\{k_5\left[\left(\frac{v_{3\ i+1,j}-v_{3\ i,j}}{2r}+\omega_{2\ i,j}\right)-c_2\tilde{q}_{1\ i,j}\right]^2+k_5\left[\left(\frac{v_{3\ i,j+1}-v_{3\ i,j}}{2r}-\omega_{1\ i,j}\right)-c_2\tilde{q}_{2\ i,j}\right]^2+\right.\right.$$

$$+k_2\left[\left(\frac{\omega_{2i+1,j}-\omega_{2i,j}}{2r}\right)+\left(\frac{\omega_{1i,j+1}-\omega_{1i,j}}{2r}\right)\right]^2+(k_1-k_2)\left(\frac{\omega_{2i+1,j}-\omega_{2i,j}}{2r}\right)^2+$$

$$+(k_1-k_2)\left(\frac{\omega_{1i,j+1}-\omega_{1i,j}}{2r}\right)^2+k_4\left[\left(\frac{\omega_{1i+1,j}-\omega_{1i,j}}{2r}\right)+\left(\frac{\omega_{2i,j+1}-\omega_{2i,j}}{2r}\right)\right]^2+ \tag{2.11}$$

$$\left.\left.+(k_3-k_4)\left(\frac{\omega_{1i+1,j}-\omega_{1i,j}}{2r}\right)^2+(k_3-k_4)\left(\frac{\omega_{2i,j+1}-\omega_{2i,j}}{2r}\right)^2\right\}+\right.$$

$$\left.+\left(\frac{q_{3\ i,j}}{r2r}v_{3\ i,j}+\frac{m_{1\ i,j}}{2r2r}\omega_{1\ i,j}+\frac{m_{2\ i,j}}{2r2r}\omega_{1\ i,j}+\frac{q_{x_1\ i,j}}{2r}\omega_{2\ i,j}-\frac{q_{x_2\ i,j}}{2r}\omega_{1\ i,j}\right)\right\}.$$

2

Выше была изложена структурная модель атомного монослоя при изгибной деформации.

Уравнения движения в виде (2.4), геометрические соотношения (2.6) и физические соотношения (2.8) молекулярно-динамической модели атомного монослоя при изгибной деформации из плоскости x_1x_2 позволяют перейти к пределу (с учетом (1.12), (1.13)) и прийти к континуальной модели. В итоге указанная континуальная модель атомного монослоя при изгибной деформации определяется следующей системой уравнений:

Уравнения движения

$$\frac{\partial N_{13}(x_1,x_2,t)}{\partial x_1}+\frac{\partial N_{23}(x_1,x_2,t)}{\partial x_2}+q_3(x_1,x_2,t)=\rho_0\frac{d^2v_3(x_1,x_2,t)}{dt^2},$$

$$\frac{\partial L_{11}(x_1,x_2,t)}{\partial x_1}+\frac{\partial L_{21}(x_1,x_2,t)}{\partial x_2}+N_{23}(x_1,x_2,t)-q_2(x_1,x_2,t)+$$

$$+m_1(x_1,x_2,t)=J_0\frac{d^2\omega_1(x_1,x_2,t)}{dt^2}, \tag{2.12}$$

$$\frac{\partial L_{12}(x_1,x_2,t)}{\partial x_1}+\frac{\partial L_{22}(x_1,x_2,t)}{\partial x_2}+q_1(x_1,x_2,t)-N_{13}(x_1,x_2,t)+$$

$$+m_2(x_1,x_2,t)=J_0\frac{d^2\omega_2(x_1,x_2,t)}{dt^2};$$

Соотношения упругости

$$N_{13}=\frac{1}{c_1}\gamma_{13}\left(x_1,x_2,t\right)-\frac{c_2}{c_1}q_1\left(x_1,x_2,t\right),\ N_{23}=\frac{1}{c_1}\gamma_{23}\left(x_1,x_2,t\right)-\frac{c_2}{c_1}q_2\left(x_1,x_2,t\right),$$
$$L_{11}=k_3\chi_{11}\left(x_1,x_2,t\right)+k_4\chi_{22}\left(x_1,x_2,t\right),\ L_{22}=k_3\chi_{22}\left(x_1,x_2,t\right)+k_4\chi_{11}\left(x_1,x_2,t\right),\qquad(2.13)$$
$$L_{12}=k_1\chi_{12}\left(x_1,x_2,t\right)+k_2\chi_{21}\left(x_1,x_2,t\right),\ L_{21}=k_1\chi_{21}\left(x_1,x_2,t\right)+k_2\chi_{12}\left(x_1,x_2,t\right);$$

Геометрические соотношения

$$\gamma_{13\,i,j}=\frac{v_{3\,i+1,j}-v_{3\,i,j}}{2r}+\omega_{2\,i,j},\qquad \gamma_{13\,i,j}=\frac{\partial v_3\left(x_1,x_2,t\right)}{\partial x_1}+\omega_2\left(x_1,x_2,t\right),$$
$$\gamma_{23\,i,j}=\frac{v_{3\,i,j+1}-v_{3\,i,j}}{2r}-\omega_{1\,i,j},\qquad \gamma_{23\,i,j}=\frac{\partial v_3\left(x_1,x_2,t\right)}{\partial x_2}-\omega_1\left(x_1,x_2,t\right),\qquad(2.14)$$
$$\chi_{11}=\frac{\partial\omega_1\left(x_1,x_2,t\right)}{\partial x_1},\quad \chi_{22}=\frac{\partial\omega_2\left(x_1,x_2,t\right)}{\partial x_2},\quad \chi_{12}=\frac{\partial\omega_2\left(x_1,x_2,t\right)}{\partial x_1},\quad \chi_{21}=\frac{\partial\omega_1\left(x_1,x_2,t\right)}{\partial x_2}.$$

Полученная система уравнений (2.12)-(2.14) континуальной модели атомного монослоя при изгибной деформации от плоскости x_1x_2 полностью совпадает с системой уравнений изгибной деформации микрополярной упругой тонкой пластинки при изгибной деформации [27] и, между физическими постоянными атомной системы и упругими постоянными пластинки (умноженные на $2h$), можно установить следующие связи:

$$c_1=\frac{4\mu\alpha}{\mu+\alpha}2h,\quad c_2=\frac{\mu-\alpha}{\mu+\alpha},\quad k_3=\frac{4\gamma\left(\gamma+\beta\right)}{2\gamma+\beta}2h,\quad k_4=\frac{2\gamma\beta}{2\gamma+\beta}2h,\qquad(2.15)$$
$$k_1=\left(\gamma+\varepsilon\right)2h,\quad k_2=\left(\gamma-\varepsilon\right)2h.$$

Предельным переходом в выражении функции Гамильтона дискретной системы:

$$\sum_i\sum_j L_{ij}\,2r2r$$

с учетом (2.11), перейдем к выражению функции Гамильтона для континуальной системы атомного монослоя:

$$L=\frac{1}{2}\iint\Bigg\langle\left[\rho_0\left(\frac{\partial v_3}{\partial t}\right)^2+J_0\left(\frac{\partial\omega_1}{\partial t}\right)^2+J_0\left(\frac{\partial\omega_2}{\partial t}\right)^2\right]-\Bigg\{k_5\left[\left(\frac{\partial v_3}{\partial x_1}+\omega_2\right)-c_2q_1\right]^2+$$
$$+k_5\left[\left(\frac{\partial v_3}{\partial x_2}-\omega_1\right)-c_2q_2\right]^2 k_2\left(\frac{\partial\omega_2}{\partial x_1}+\frac{\partial\omega_1}{\partial x_2}\right)^2+\left(k_1-k_2\right)\left(\frac{\partial\omega_2}{\partial x_1}\right)^2+\left(k_1-k_2\right)\left(\frac{\partial\omega_1}{\partial x_2}\right)^2+\qquad(2.16)$$
$$+k_4\left(\frac{\partial\omega_1}{\partial x_1}+\frac{\partial\omega_2}{\partial x_2}\right)^2+\left(k_3-k_4\right)\left(\frac{\partial\omega_1}{\partial x_1}\right)^2+\left(k_3-k_4\right)\left(\frac{\partial\omega_2}{\partial x_2}\right)^2+q_3v_3+m_1\omega_1+m_2\omega_2+q_{x_1}\omega_2-q_{x_2}\omega_1\Bigg\rangle dx_1dx_2.$$

Заключение

В работе с учетом моментного взаимодействия между атомами и, что не имеет место центральное силовое взаимодействие, построена дискретная модель атомного монослоя при плоской деформации и при изгибной деформации. Предельными переходами построены континуальные модели атомного монослоя и плоской деформации и при изгибной деформации. Установлено, что для плоской задачи атомного монослоя континуальная модель совпадает с моделью плоского напряженного состояния микрополярных упругих тонких пластин, а при изгибной деформации - с моделью изгибной деформации микрополярных упругих тонких пластин. В двух рассмотренных задачах получены формулы, связывающие физические постоянные дискретной задачи атомного монослоя с упругими постоянными прикладной теории микрополярных пластин.

Список литературы:

1. Физическая мезомеханика и компьюторное конструирование материалов / Под ред. В.Е. Панина- Новосибирск: Наука, 1995.-Т.1.- 320с.
2. Елисеев, А.А. Функциональные наноматериалы / А.А. Елисеев, А.В. Лукашин / Под ред. Ю.Д. Третьякова- М.: Изд-во. “Физматлит”, 2010.- 456с.
3. Ибрагимов, И.М. Основы компьюторного моделирования наносистем / И.М. Ибрагимов, А.Н. Ковшов, Ю.Ф. Назаров- СПб.: М., Краснодар. Лань, 2010.- 384с.
4. Кормилицын, О.П. Механика материалов и структур нано-и микромеханики /О.П.Кормилицын, Ю.А. Шукейло- М.: Академия, 2008.- 224с.
5. Введение в микро-и наномеханику. Математические модели и методы. Под ред. А.И.Потапова.- Н.Новгород: Изд-во НГТУ, 2010.- 303с.
6. Поздняков, В.А. Физическое материаловедение наноструктурных материалов / М.: Изд-во МГИУ, 2007.- 424с.
7. Косович, А.М. Основы механики кристаллической решетки / М.: Наука, 1972.- 280с.
8. Головнева, Е.И. Моделирование квазистатических процессов в кристаллах методом молекулярной динамики / Е.И. Головнева, И.Ф. Головнев, В.М. Фомин // Физическая мезомеханика.- 2003.- Т. 6.-с.5-10.
9. Алехин, В.В. Собственные колебания и выпучивание графеновых листов /В.В. Алехин, Б.Д Аннин, А.В. Бабичев, С.Н. Коробейников // Известия РАН. Механика твердого тела.- 2013.- №5.- с. 34-38.
10. Odegard, G.M. Equivalent-continuum modeling with application to carbon nanotubes / G.M. Odegard, T.S. Gates, L.M. Nicholson // Wise K.E.NASA Langley Research Center. Technical Memorandum NASA/TM-2002-211454.
11. Гольдштейн, Р.В. Дискретно-континуальная модель нанотрубки / Р.В. Гольдштейн, А.В. Ченцов // Известия АН России. Механика твердого тела.- 2005.- №4.- с.57-74.
12. Иванова, Е.А. Получение макроскопических соотношений упругости сложных кристаллических решеток с учетом моментных взаимодействий на микроуровне / Е.А. Иванова, А.М. Кривцов, Н.Ф. Морозов // Прикладная математика и механика.- 2007.- Т. 41, Вып. 4.-с. 595-615.
13. Иванова, Е.А. Описание кристаллической упаковки частиц с учетом моментных взаимодействий / Е.А. Иванова, А.М. Кривцов, Н.Ф. Морозов, А.Д. Фарсова // Известия РАН Механика твердого тела.- 2003.-N4.-с. 110-127.
14. Кривцов, А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой / М.: Физматлит.- 2007.- 304с.
15. Беринский, И.Е. Применение моментного взаимодействия к построению устойчивой модели кристаллической решетки графита / И.Е. Беринский, Е.А. Иванова, А.М. Кривцов, Н.Ф. Морозов // Известия АН России. Механика твердого тела.- 2007.- N5.- с. 6-16.
16. Товстик, П.Е. Статический и динамический анализ двумерных решеток графита / П.Е.Товстик, Т.П. Товстик // Известия РАН. Механика твердого тела.- 2012.- N5.- с. 35-43.
17. Бызов, А.П. Математическое моделирование моментных взаимодействий частиц с вращательными степенями свободы/ А.П. Бызов, Е.А. Иванова // Научно-технические ведомости СПбГПУ.- 2007.-N2.-с. 260-268.
18. Беринский И.Е. Стержневая модель кристаллической решетки графена / Науч. техн. ведомости СПбГПУ, 2010.- 104.- с. 13-20.
19. Болотин, В.В. К теории армированных тел / Известия АН СССР. Механика, 1965.- №1.- с. 74-80.
20. Pavlov, I.S. A 2D granular medium with rotating particles / I.S. Pavlov, A.I. Potapov, G.A. Mangin // Intern. J. Solids and Structures.- 2006.- V. 43.- №20. p. 6194-6207.

21. Бровко, Г.Л. Моделирование свойств и движений неоднородного одномерного кинтинума сложной структуры типа Коссера / Г.Л. Бровко, О.А. Иванова // Известия РАН. Механикатвердоготела.- 2008.- №1.- с. 22-36.

22. Mechanics of Micropolar Media Es. By O. Brul in and R.K.T.Hsieh. World Scientific. Singapore.- 1982.- 478p.

23. Gendelman, O.V. The descriptson of polyethylene crystal as a continuum with internal degress of freedom / O.V.Gendelman, L.I. Manevitch // Inter. J. of Solids and Structures.- 1996.- V.- 33.- p. 1781-1798.

24. Саркисян, С.О. Микрополярная стержневая модель для нанокристаллического материала, состоящего из линейных цепочек атомов / Физическая мезомеханика.- 2016.- Т. 19.- № 4. с. 14-20.

25. Саркисян, С.О. Прикладные одномерные теории балок на основе несимметричной теории упругости / Физическая мезомеханика.- 2008.- Т. 11.- №5. с. 41-54.

26. Голдстейн, Г. Классическая механика/ М.: Наука.- 1975.- 416с.

27. Саркисян, С.О. Краевые задачи несимметричной теории упругости для тонких пластин / Прикладная математика и механика.- 2008.-Т.72.-Вып.1.-с.129-147.

28. Sargsyan, S.O. Energy balance equation, energetic theorems and variation equation for the general theory of micropolar elastic isotropic thin shells / International Journal of mechanics.- 2014.- V.8.- p.93-100.