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 [1]. Как устанавливается в работах [2-4], во многих случаях, простейшая модель [5], где атомы представляются материальными точками, связанными парным центральным силовым взаимодействием, оказывается недостаточной. С этой точки зрения в работах [2-4] предлагается подход изучения атомных систем, сущность которого состоит в дополнительном учете парного моментного взаимодействия.

В работе [6] построена дискретная модель линейной цепочки атомов с учетом моментного взаимодействия между атомами и, осуществлен предельный переход, обосновывая применимость прикладной теории микрополярных тонких стержней [7], как континуальная модель указанного нанообьекта.

В данной работе развивается подход работы [6] для построения дискретных и континуальных моделей нанокристаллических однослойных сред, обосновывая применимость плоского напряженного состояния и теории изгиба микрополярных тонких пластин [8] с независимыми полями перемещений и вращений.

2.Дискретная и континуальная модели нанокристалической однослойной среды (плоская задача и задача изгиба). Рассмотрим плоскую решетку (монослой), состоящую из однородных сферических частиц массы $m,$ собственным моментом инерции $J,$ диаметром $2r.$ Будем учитывать взаимодействие с четырьмя самими близлежащими контактирующими соседями по решетке. Центры масс указанных частиц лежат в одной плоскости и одновременно в вершинах решётки.

Сначала рассмотрим плоскую задачу.

Запишем кинетическую и потенциальную энергии для малых колебаний атомов.

Кинематическая энергия рассматриваемой дискретной системы частиц будет

$$T=\frac{1}{2}\sum_i\sum_j\left\{\frac{m}{2r2r}\left[\left(\frac{dv_{1(i,j)}}{dt}\right)^2+\left(\frac{dv_{2(i,j)}}{dt}\right)^2\right]+\frac{J}{2r2r}\left(\frac{d\omega_{s(i,j)}}{dt}\right)^2\right\}2r2r, \tag{1}$$

а потенциальная энергия системы будет выражаться следующим образом:

$$\begin{gathered}U=\frac{1}{2}\sum_i\sum_j\left\langle\left\{k_5\left(\frac{v_{1(i+1,j)}-v_{1(i,j)}}{2r}+\frac{v_{2(i,j+1)}-v_{2(i,j)}}{2r}\right)^2+\right.\right.\\
+\left(k_4-k_5\right)\left[\left(\frac{v_{1(i+1,j)}-v_{1(i,j)}}{2r}\right)^2+\left(\frac{v_{2(i,j+1)}-v_{2(i,j)}}{2r}\right)^2\right]+\\
+k_1\left[\frac{v_{2(i+1,j)}-v_{2(i,j)}}{2r}+\frac{v_{1(i,j+1)}-v_{1(i,j)}}{2r}\right]^2+k_2\left[\frac{v_{2(i+1,j)}-v_{2(i,j)}}{2r}-\frac{v_{1(i,j+1)}-v_{1(i,j)}}{2r}+2\omega_{3(i,j)}\right]^2+\\
\left.+k_3\left(\frac{\omega_{3(i+1,j)}-\omega_{3(i,j)}}{2r}\right)^2+k_3\left(\frac{\omega_{3(i,j+1)}-\omega_{3(i,j)}}{2r}\right)^2\right\}-\\
\left.-\left(\bar{q}_{1(i,j)}v_{1(i,j)}+\bar{q}_{2(i,j)}v_{2(i,j)}+\bar{m}_{3(i,j)}\omega_{3(i,j)}\right)\right\rangle 2r2r.\end{gathered} \tag{2}$$

На основе (1) и (2), составляя лагранжиан рассматриваемой системы: $L=T-U$ и выполняя варьирование в вариационном уравнении Гамильтона: $\delta\int_{t_1}^{t_2} Ldt=0,$ получим систему уравнений движения частицы под номером $(i,j).$

Выполняя предельный переход $2r\to 0, 2r\to 0,$ получим лагранжиан непрерывной (континуальной) системы:

$$L=\frac{1}{2}\iint\left\langle\left[\rho_0\left(\frac{\partial v_1}{\partial t}\right)^2+\left(\frac{\partial v_2}{\partial t}\right)^2+J_0\left(\frac{\partial\omega_3}{\partial t}\right)^2\right]-\left\{k_5\left(\frac{\partial v_1}{\partial x_1}+\frac{\partial v_2}{\partial x_2}\right)^2+\left(k_4-k_5\right)\left[\left(\frac{\partial v_1}{\partial x_1}\right)^2+\left(\frac{\partial v_2}{\partial x_2}\right)^2\right]+\right.\right.$$
$$\left.k_1\left(\frac{\partial v_2}{\partial x_1}+\frac{\partial v_1}{\partial x_2}\right)^2+k_2\left(\frac{\partial v_2}{\partial x_1}-\frac{\partial v_1}{\partial x_2}+2\omega_3\right)^2+k_3\left(\frac{\partial\omega_3}{\partial x_2}\right)^2+\left(q_{x_1}v_1+q_{x_2}v_2+m_3\omega_3\right)\right\rangle dx_1dx_2. \tag{3}$$

Если формулу (3) сравнивать с соответствующий формулой работы [8], приходим к выводу, что континуальная модель атомного монослоя при плоской задаче из себя представляет модель плоского напряженного состояния микрополярной тонкой пластинки с независимыми полями перемещений и вращений.

Теперь рассмотрим задачу изгиба.

В этом случае кинематическая энергия дискретной системы частиц будет

$$T=\frac{1}{2}\sum_i\sum_j\left[m\left(\frac{dv_{3(i,j)}}{dt}\right)^2+J\left(\frac{d\omega_{1(i,j)}}{dt}\right)^2+J\left(\frac{d\omega_{2(i,j)}}{dt}\right)^2\right], \tag{4}$$

а потенциальная энергия системы имеет вид

$$U=\frac{1}{2}\sum_i\sum_j\left\{k_5\left[\left(\frac{v_{3(i+1,j)}-v_{3(i,j)}}{2r}+\omega_{2(i,j)}\right)-c_2\tilde{q}_{1(i,j)}\right]^2+k_5\left[\left(\frac{v_{3(i,j+1)}-v_{3(i,j)}}{2r}-\omega_{1(i,j)}\right)-c_2\tilde{q}_{2(i,j)}\right]^2+\right.$$
$$+k_2\left[\left(\frac{\omega_{2(i+1,j)}-\omega_{2(i,j)}}{2r}\right)+\left(\frac{\omega_{1(i,j+1)}-\omega_{1(i,j)}}{2r}\right)\right]^2+\left(k_1-k_2\right)\left(\frac{\omega_{2(i+1,j)}-\omega_{2(i,j)}}{2r}\right)^2+$$
$$+\left(k_1-k_2\right)\left(\frac{\omega_{1(i,j+1)}-\omega_{1(i,j)}}{2r}\right)^2+k_4\left[\left(\frac{\omega_{1(i+1,j)}-\omega_{1(i,j)}}{2r}\right)+\left(\frac{\omega_{2(i,j+1)}-\omega_{2(i,j)}}{2r}\right)\right]^2+ \tag{5}$$
$$\left.+\left(k_3-k_4\right)\left(\frac{\omega_{1(i+1,j)}-\omega_{1(i,j)}}{2r}\right)^2+\left(k_3-k_4\right)\left(\frac{\omega_{2(i,j+1)}-\omega_{2(i,j)}}{2r}\right)^2\right\}-$$
$$-\sum_i\sum_j\left(\bar{q}_{3(i,j)}v_{3(i,j)}+\bar{m}_{1(i,j)}\omega_{1(i,j)}+\bar{m}_{2(i,j)}\omega_{2(i,j)}+\bar{q}_{x_1(i,j)}2r\omega_{2(i,j)}-\bar{q}_{x_2(i,j)}2r\omega_{1(i,j)}\right).$$

При помощи выражений (4) и (5), определяя лагранжиан дискретной системы частиц $(L=T-U),$ из вариационного уравнения Гамильтона получим уравнения движения частицы под номером (i,j) при изгибной деформации монослоя.

Осуществляя предельный переход, получим вид лагранжиана для соответствующей континуальной модели

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

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

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

$$
+\left(k_1-k_2\right)\left(\frac{\omega_{1(i,j+1)}-\omega_{1(i,j)}}{2r}\right)^2+k_4\left[\left(\frac{\omega_{1(i+1,j)}-\omega_{1(i,j)}}{2r}\right)+\left(\frac{\omega_{2(i,j+1)}-\omega_{2(i,j)}}{2r}\right)\right]^2+ \tag{6}
$$

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

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

Если формулу (6) сравнивать с соответствующей формулой работы [8], приходим к утверждению, что континуальная модель атомного монослоя при изгибной деформации представляет собой прикладную теорию изгиба микрополярных пластин с независимыми полями перемещений и вращений.

Список литературы:

1.Морозов Н.Ф. Структурная механика материалов и элементов конструкций. Взаимодействие нано-микро-мезо и макромасштабов при деформировании и разрушении//Известия РАН. Механика твердого тела. -2005. -N4. -С. 188-189.

2.Беринский И.Е., Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. Применение моментного взаимодействия к построенного устойчивой модели кристаллической решетки графита//Известия АН России. Механикатвердоготела. -2007. -N5. -С. 6-16.

3.Gendelman O.V., Manevitch L.I. The descriptson of polyethylene crystal as a continuum with internal degress of freedom//Inter. J. ofSolidsandStructures. -1996. -V.33. -P.1781-1798.

4.Павлов И.С., Потапов А.И. Структурные модели в механике нанокристаллических сред//Доклады РАН. -2008. -Т. 421, N3. -С. 348-352.

5.Борн М., Кунь Х. Динамическая теория кристаллических решеток. М.: Изд-во иностр. лит, 1958.- 488с.

6.Саркисян С.О. Микрополярная стержневая модель для нанокристаллического материала, состоящего из линейных цепочек атомов//Физическая мезомеханика. -2016. -Т. 19, N 4. -С. 14-20.

7.Саркисян С.О. Прикладные одномерные теории балок на основе несимметричной теории упругости// Физическая мезомеханика. -2008. -Т. 11, N 5. -С. 41-54.

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