

УДК 539.3

© 2007 г. Е. А. Иванова, А. М. Кривцов, Н. Ф. Морозов

**ПОЛУЧЕНИЕ МАКРОСКОПИЧЕСКИХ СООТНОШЕНИЙ УПРУГОСТИ
СЛОЖНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК ПРИ УЧЕТЕ МОМЕНТНЫХ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НА МИКРОУРОВНЕ**

Предлагается дискретная механическая модель сложной кристаллической решетки, содержащей частицы, обладающие как поступательными, так и вращательными степенями свободы и взаимодействующие между собой посредством сил и моментов. С использованием длинноволнового приближения осуществлен переход к континуальной модели кристаллической решетки; при этом показано, что динамика континуальной модели описывается уравнениями макроскопической моментной теории упругости. Получены выражения для макроскопических тензоров жесткости, зависящие от тензоров жесткости межатомных связей и векторов, определяющих геометрию решетки. Осуществлен переход к безмоментной теории упругости и показано, что макроскопические упругие модули безмоментной теории зависят как от силовых, так и от моментных характеристик межатомного взаимодействия. Вычислены жесткости межатомных связей в слое графита и показано, что поперечная жесткость межатомной связи сравнима с продольной, т.е. ковалентная связь – существенно нецентральная, что возможно только при наличии моментных взаимодействий на микроуровне.

Парные потенциалы взаимодействия, такие как потенциал Леннарда–Джонса, Ми или Морзе, широко применяются при решении задач механики сплошной среды методами молекулярной динамики. Эти потенциалы имеют ясный физический смысл и позволяют на качественном уровне описать термомеханические свойства многих материалов. Однако хорошо известно, что парные потенциалы, как правило, могут обеспечить устойчивость только плотноупакованных кристаллических решеток. Решетки с более низкой плотностью упаковки оказываются неустойчивыми для большинства парных потенциалов. Неустойчивы, например, структуры, характерные для ковалентных кристаллов – шестиугольная решетка на плоскости (структура графита) и структура алмаза в пространстве. Традиционное решение этой проблемы состоит в применении многочастичных потенциалов взаимодействия [1, 2], зависящих 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 параметров – туманным.

Альтернативный подход состоит во введении в рассмотрение вращательных степеней свободы и учете моментного вклада в межатомное взаимодействие [3, 4]. На примере простых кристаллических решеток было показано [3, 4], что учет парного моментного взаимодействия (дополнительно к парному силовому) может обеспечить устойчивость кристаллических структур с низкой плотностью упаковки. Развивался и другой подход [5, 6], также связанный с учетом вращательных степеней свободы. Ниже идеи работ [3, 4] распространяются на сложные кристаллические решетки¹. Разрабатывается метод описания кристаллической упаковки частиц слож-

¹ Простой называется кристаллическая решетка, все узлы которой равнозначны (например, простая кубическая решетка). Иными словами, для простой решетки перемещение на вектор, соединяющий любые два узла, является тождественным преобразованием. Решетка, не обладающая таким свойством, называется сложной (например, решетка графита или алмаза).

ной решетки, позволяющий получить в длинноволновом приближении [7] уравнения линейной моментной теории упругости. При этом используется подход [8–10] для безмоментного случая. При описании моментного взаимодействия между частицами наибольшую трудность составляет введение мер деформации и получение определяющих уравнений.

Ниже при определении векторов деформации и получении определяющих уравнений взаимодействия частиц используется подход, разработанный П.А. Жилиным для построения моментных теорий механики сплошных сред [11–14].

1. Описание межатомных взаимодействий на основе моментной теории. Атомы кристаллической решетки будем моделировать частицами, представляющими собой тела-точки. Под телом-точкой понимается [15] материальный объект нулевого объема, положение которого считается определенным, если заданы вектор положения $\mathbf{R}(t)$ и тензор поворота $\mathbf{P}(t)$. Взаимодействие между телами-точками характеризуется вектором силы и вектором момента. Динамические структуры и инерционные характеристики тела-точки вводятся следующим образом. Кинетической энергией тела-точки называется квадратичная форма его трансляционной и угловой скоростей \mathbf{v} , $\boldsymbol{\omega}$:

$$K = \frac{1}{2}m\mathbf{v}\mathbf{v} + \mathbf{v}\boldsymbol{\vartheta}\boldsymbol{\omega} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\omega}\boldsymbol{\theta}\boldsymbol{\omega} \quad (1.1)$$

Тензоры второго ранга $\boldsymbol{\vartheta}$, $\boldsymbol{\theta}$ называются тензорами инерции тела-точки, m – масса тела-точки. Количественно движение тела-точки называется линейная форма скоростей

$$\mathbf{K}_1 = \frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}} = m\mathbf{v} + \boldsymbol{\vartheta}\boldsymbol{\omega} \quad (1.2)$$

Собственным кинетическим моментом тела-точки называется линейная форма

$$\mathbf{K}_2 = \frac{\partial K}{\partial \boldsymbol{\omega}} = \mathbf{v}\boldsymbol{\vartheta} + \boldsymbol{\theta}\boldsymbol{\omega} \quad (1.3)$$

Кинетическим моментом тела-точки, вычисленным относительно опорной точки Q , называется величина

$$\mathbf{K}_2^Q = (\mathbf{R} - \mathbf{R}_Q) \times \frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}} + \frac{\partial K}{\partial \boldsymbol{\omega}} \quad (1.4)$$

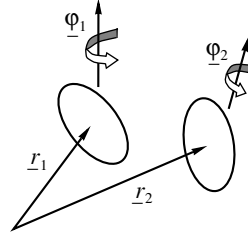
Ниже при моделировании кристаллической решетки будем рассматривать тела-точки, у которых $\boldsymbol{\vartheta} \equiv 0$. Для простоты далее будем называть их просто частицами.

Итак, рассмотрим две взаимодействующие частицы (1), моделирующие атомы кристаллической решетки. Определим зависимость силы и момента взаимодействия частиц от их взаимного расположения и ориентации, соблюдая полную аналогию с тем, как это делается в теории оболочек и стержней [11, 13].

В текущей конфигурации положение частиц задается радиус-векторами \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 , а ориентация – векторами поворотов $\boldsymbol{\varphi}_1$, $\boldsymbol{\varphi}_2$. В равновесном положении

$$\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_0, \quad \boldsymbol{\varphi}_1 = 0, \quad \boldsymbol{\varphi}_2 = 0$$

Введем следующие обозначения: \mathbf{F}_1 , \mathbf{M}_1 – сила и момент, действующие на частицу 1 со стороны частицы 2, \mathbf{F}_2 , \mathbf{M}_2 – сила и момент, действующие на частицу 2 со стороны частицы 1, \mathbf{F}_1^e , \mathbf{M}_1^e , \mathbf{F}_2^e , \mathbf{M}_2^e – внешние воздействия на частицы 1 и 2 соответственно. Моменты \mathbf{M}_1 и \mathbf{M}_1^e вычислены относительно частицы 1, моменты \mathbf{M}_2 и \mathbf{M}_2^e вычислены относительно частицы 2.



Фиг. 1

Запишем уравнения движения частицы 1, частицы 2 и системы, состоящей из обеих частиц:

$$m_1 \dot{\mathbf{v}}_1 = \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_1^e, \quad (\boldsymbol{\theta}_1 \boldsymbol{\omega}_1) \dot{} = \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_1^e, \quad m_2 \dot{\mathbf{v}}_2 = \mathbf{F}_2 + \mathbf{F}_2^e, \quad (\boldsymbol{\theta}_2 \boldsymbol{\omega}_2) \dot{} = \mathbf{M}_2 + \mathbf{M}_2^e \quad (1.5)$$

$$(\mathbf{r}_1 \times m_1 \mathbf{v}_1 + \boldsymbol{\theta}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_1 + \mathbf{r}_2 \times m_2 \mathbf{v}_2 + \boldsymbol{\theta}_2 \cdot \boldsymbol{\omega}_2) \dot{} = \mathbf{r}_1 \times \mathbf{F}_1^e + \mathbf{r}_2 \times \mathbf{F}_2^e + \mathbf{M}_2^e$$

Здесь $m_1, m_2, \boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2$ – массы и тензоры инерции частиц, $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \boldsymbol{\omega}_1, \boldsymbol{\omega}_2$ – их линейные и угловые скорости. Следствием уравнений (1.5) является третий закон Ньютона для сил и аналог третьего закона Ньютона для моментов

$$\mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2 = 0, \quad \mathbf{r}_1 \times \mathbf{F}_1 + \mathbf{M}_1 + \mathbf{r}_2 \times \mathbf{F}_2 + \mathbf{M}_2 = 0 \quad (1.6)$$

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

$$\left(\frac{1}{2} [m_1 \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1 + \boldsymbol{\omega}_1 \boldsymbol{\theta}_1 \boldsymbol{\omega}_1 + m_2 \mathbf{v}_2 \mathbf{v}_2 + \boldsymbol{\omega}_2 \boldsymbol{\theta}_2 \boldsymbol{\omega}_2] + U \right) \dot{} = \quad (1.7)$$

$$= \mathbf{F}_1^e \cdot \mathbf{v}_1 + \mathbf{M}_1^e \cdot \boldsymbol{\omega}_1 + \mathbf{F}_2^e \cdot \mathbf{v}_2 + \mathbf{M}_2^e \cdot \boldsymbol{\omega}_2$$

где U – внутренняя энергия системы (энергия взаимодействия частиц 1 и 2). Предполагая смещения из положения равновесия малыми величинами и принимая во внимание уравнения (1.5), (1.6), уравнение баланса энергии (1.7) можно привести к виду

$$\dot{U} = \mathbf{F} \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}} + \mathbf{M} \cdot \dot{\boldsymbol{\kappa}}$$

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_1 = -\mathbf{F}_2, \quad \mathbf{M} = \mathbf{M}_1 + \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times \mathbf{F}_1 = -\mathbf{M}_2 - \frac{1}{2}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \times \mathbf{F}_2 \quad (1.8)$$

$$\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_0 + \frac{1}{2} \mathbf{r}_0 \times (\boldsymbol{\varphi}_1 + \boldsymbol{\varphi}_2), \quad \boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{\varphi}_2 - \boldsymbol{\varphi}_1, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$$

Здесь \mathbf{M} имеет смысл момента, действующего на частицу 1 со стороны частицы 2, вычисленного относительно середины отрезка, соединяющего эти частицы. Векторы $\boldsymbol{\epsilon}$ и $\boldsymbol{\kappa}$, на которых совершают работу вектор силы и вектор момента (см. формулы (1.8)), назовем векторами деформации.

Далее будем рассматривать упругое деформирование системы. Будем полагать, что внутренняя энергия, вектор силы и вектор момента зависят только от векторов деформации и не зависят от скоростей. Тогда

$$\mathbf{F} = \frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{\epsilon}}, \quad \mathbf{M} = \frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \quad (1.9)$$

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

$$U = \mathbf{F}^0 \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{M}^0 \cdot \boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{V} \cdot \boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\kappa} \quad (1.10)$$

Коэффициенты \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} называются тензорами жесткости, а \mathbf{F}^0 , \mathbf{M}^0 – начальными усилиями. В линейной теории тензоры жесткости – постоянные величины, причем тензоры \mathbf{A} и \mathbf{C} – симметричные, а тензор \mathbf{B} – произвольный. Согласно формулам (1.9), (1.10) вектор силы и вектор момента имеют вид

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^0 + \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\kappa}, \quad \mathbf{M} = \mathbf{M}^0 + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{V} + \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\kappa} \quad (1.11)$$

Исходя из теории симметрии тензорных величин [11], можно показать, что если внутренняя структура частиц такова, что в отсчетной конфигурации система симметрична относительно двух взаимно перпендикулярных плоскостей, тензор \mathbf{B} обращается в нуль. Для большинства простейших кристаллических решеток указанная симметрия имеет место.

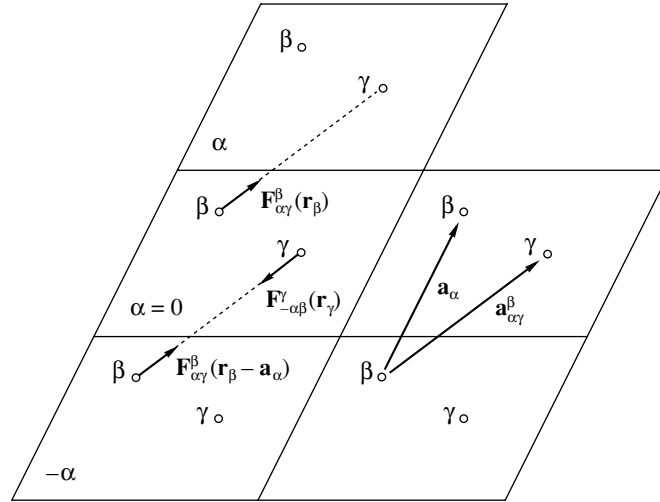
Выше при получении соотношений упругости использовался момент взаимодействия \mathbf{M} , вычисленный относительно середины отрезка, соединяющего взаимодействующие частицы. При этом тензоры жесткости \mathbf{B} , \mathbf{C} также имели смысл тензоров, вычисленных относительно середины отрезка, соединяющего частицы. Такой подход удобен с точки зрения применения теории симметрии для определения структуры тензоров жесткости. Однако при выводе уравнений движения дискретной среды, удобнее использовать моменты взаимодействия, вычисленные относительно частиц. Рассуждения, аналогичные проведенным выше, позволяют получить следующие описание взаимодействия частиц с использованием момента взаимодействия \mathbf{M}_1 , характеризующего воздействие частицы 2 на частицу 1 и вычисленного относительно частицы 1:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_1 &= \tilde{\mathbf{F}}^0 + \tilde{\mathbf{A}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_1 + \tilde{\mathbf{B}} \cdot \boldsymbol{\kappa}_1, & \mathbf{M}_1 &= \tilde{\mathbf{M}}^0 + \boldsymbol{\varepsilon}_1 \cdot \tilde{\mathbf{V}} + \tilde{\mathbf{C}} \cdot \boldsymbol{\kappa}_1 \\ \boldsymbol{\varepsilon}_1 &= \mathbf{r} - \mathbf{r}_0 + \mathbf{r}_0 \times \boldsymbol{\varphi}_2, & \boldsymbol{\kappa}_1 &= \boldsymbol{\varphi}_2 - \boldsymbol{\varphi}_1, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 \end{aligned} \quad (1.12)$$

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

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{F}}^0 &= \mathbf{F}^0, & \tilde{\mathbf{M}}^0 &= \mathbf{M}^0 + \frac{1}{2} \mathbf{r}_0 \times \mathbf{F}^0 \\ \tilde{\mathbf{A}} &= \mathbf{A}, & \tilde{\mathbf{B}} &= \mathbf{B} - \frac{1}{2} \mathbf{A} \times \mathbf{r}_0, & \tilde{\mathbf{C}} &= \mathbf{C} + \frac{1}{2} (\mathbf{r}_0 \times \mathbf{B} - \mathbf{B}^T \times \mathbf{r}_0) - \frac{1}{4} \mathbf{r}_0 \times \mathbf{A} \times \mathbf{r}_0 \end{aligned} \quad (1.13)$$

2. Геометрия кристаллической решетки. Рассмотрим сложную кристаллическую решетку (2). Решетку формируют частицы, взаимодействующие посредством сил и моментов (см. формулы (1.12)). Предполагается, что каждая частица взаимодействует с ограниченным числом соседей. Выделим в кристалле решетку Браве, которая разбивает пространство на элементарные ячейки. Рассмотрим некоторую элементарную ячейку, которую для удобства будем называть исходной. Пронумеруем все ячейки, в которых есть атомы, взаимодействующие с атомами исходной ячейки. Исходной ячейке присвоим номер $\alpha = 0$, остальным – номера $\alpha \pm 1, \pm 2, \dots \pm N$. При этом нумерация производится таким образом, чтобы ячейки, расположенные симметрично относительно исходной, имели индексы, противоположные по знаку. Частицы, входящие в каждую ячейку, пронумеруем индексами от 1 до M , где M – число частиц в элементарной ячейке.



Фиг. 2

Обозначим $\mathbf{a}_{\alpha\gamma}^\beta$ – радиус-вектор, определяющий положение частицы γ ячейки α относительно частицы β исходной ячейки в отсчетной конфигурации. Для краткости записи будем использовать обозначение $\mathbf{a}_\alpha \equiv \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\beta$. Легко показать, что имеет место свойство $\mathbf{a}_{-\alpha\beta}^\gamma = -\mathbf{a}_{\alpha\gamma}^\beta$.

3. Уравнения динамики частиц решетки. Предполагая перемещения и повороты малыми величинами, запишем уравнения динамики Эйлера для частицы γ исходной ячейки

$$m_\gamma \ddot{\mathbf{u}}_\gamma = \sum_{\alpha, \beta} \mathbf{F}_{\alpha\beta}^\gamma + \mathbf{f}_\gamma^*, \quad \boldsymbol{\theta}_\gamma \cdot \ddot{\boldsymbol{\phi}}_\gamma = \sum_{\alpha, \beta} \mathbf{M}_{\alpha\beta}^\gamma + \mathbf{m}_\gamma^* \quad (3.1)$$

Здесь $\mathbf{u}_\gamma, \boldsymbol{\phi}_\gamma$ – вектор перемещения и вектор поворота частицы, m_γ и $\boldsymbol{\theta}_\gamma$ – масса и тензор инерции, $\mathbf{F}_{\alpha\beta}^\gamma, \mathbf{M}_{\alpha\beta}^\gamma$ – сила и момент, действующие на частицу γ исходной ячейки со стороны частицы β ячейки α (фиг. 2), векторы \mathbf{f}_γ^* и \mathbf{m}_γ^* – внешние воздействия. Моменты $\mathbf{M}_{\alpha\beta}^\gamma$ и \mathbf{m}_γ^* вычислены относительно частицы γ исходной ячейки. Следствием уравнений (3.1) являются уравнения

$$\sum_\gamma m_\gamma \ddot{\mathbf{u}}_\gamma = \sum_\alpha \sum_{\beta, \gamma} \mathbf{F}_{\alpha\beta}^\gamma + \sum_\gamma \mathbf{f}_\gamma^*, \quad \sum_\gamma \boldsymbol{\theta}_\gamma \cdot \ddot{\boldsymbol{\phi}}_\gamma = \sum_\alpha \sum_{\beta, \gamma} \mathbf{M}_{\alpha\beta}^\gamma + \sum_\gamma \mathbf{m}_\gamma^* \quad (3.2)$$

Далее уравнения (3.2) будем называть уравнениями движения исходной ячейки. Заметим, однако, что уравнения (3.2) получаются путем формального суммирования уравнений (3.1); при этом первое уравнение фактически представляет собой формулировку первого закона динамики Эйлера, а второе уравнение, строго говоря, не является формулировкой второго закона динамики Эйлера для исходной ячейки.

4. Описание взаимодействия частиц решетки. Рассмотрим две взаимодействующие частицы: частицу γ исходной ячейки, положение которой определяется вектором \mathbf{r}_γ и частицу β ячейки $-\alpha$, положение которой определяется вектором $\mathbf{r}_\beta - \mathbf{a}_\alpha$. На частицу γ исходной ячейки со стороны частицы β ячейки $-\alpha$ действуют сила $\mathbf{F}_{-\alpha\beta}^\gamma(\mathbf{r}_\gamma)$ и момент

$\mathbf{M}_{-\alpha\beta}^\gamma(\mathbf{r}_\gamma)$ (момент вычислен относительно частицы γ исходной ячейки). По отношению к ячейке $-\alpha$ исходная ячейка является ячейкой α . Следовательно, на частицу β ячейки $-\alpha$ со стороны частицы γ исходной ячейки действуют сила $\mathbf{F}_{\alpha\beta}^\beta(\mathbf{r}_\beta - \mathbf{a}_\alpha)$ и момент $\mathbf{M}_{\alpha\gamma}^\beta(\mathbf{r}_\beta - \mathbf{a}_\alpha)$ (момент вычислен относительно частицы β ячейки $-\alpha$). Согласно третьему закону Ньютона для сил и его аналогу для моментов (1.6) имеют место соотношения (см. фиг. 2)

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{-\alpha\beta}^\gamma(\mathbf{r}_\gamma) + \mathbf{F}_{\alpha\beta}^\beta(\mathbf{r}_\beta - \mathbf{a}_\alpha) &= 0 \\ \mathbf{M}_{-\alpha\beta}^\gamma(\mathbf{r}_\gamma) - \frac{1}{2}\mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma \times \mathbf{F}_{-\alpha\beta}^\gamma(\mathbf{r}_\gamma) + \mathbf{M}_{\alpha\gamma}^\beta(\mathbf{r}_\beta - \mathbf{a}_\alpha) - \frac{1}{2}\mathbf{a}_{\alpha\gamma}^\beta \times \mathbf{F}_{\alpha\gamma}^\beta(\mathbf{r}_\beta - \mathbf{a}_\alpha) &= 0 \end{aligned} \quad (4.1)$$

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

Предполагая справедливость длинноволнового приближения (см. [7]), имеем

$$\mathbf{F}_{\alpha\gamma}^\beta(\mathbf{r}_\beta - \mathbf{a}_\alpha) \approx \mathbf{F}_{\alpha\gamma}^\beta(\mathbf{r}_\beta) - \mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla_\beta \mathbf{F}_{\alpha\gamma}^\beta, \quad \mathbf{M}_{\alpha\gamma}^\beta(\mathbf{r}_\beta - \mathbf{a}_\alpha) \approx \mathbf{M}_{\alpha\gamma}^\beta(\mathbf{r}_\beta) - \mathbf{a}_\alpha \cdot \nabla_\beta \mathbf{M}_{\alpha\gamma}^\beta \quad (4.2)$$

где ∇_β – оператор ∇ , вычисленный в точке исходной ячейки, положение которой определяется вектором \mathbf{r}_β . Следствием формул (4.1), (4.2) являются соотношения

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{-\alpha\beta}^\gamma(\mathbf{r}_\gamma) &\approx -\mathbf{F}_{\alpha\gamma}^\beta(\mathbf{r}_\beta) + \mathbf{a}_\alpha \nabla_\beta \mathbf{F}_{\alpha\gamma}^\beta \\ \mathbf{M}_{-\alpha\beta}^\gamma(\mathbf{r}_\gamma) &\approx -\mathbf{M}_{\alpha\gamma}^\beta(\mathbf{r}_\beta) + \mathbf{a}_{\alpha\gamma}^\beta \times \mathbf{F}_{\alpha\gamma}^\beta(\mathbf{r}_\beta) + \mathbf{a}_\alpha \nabla_\beta \cdot \hat{\mathbf{M}}_{\alpha\gamma}^\beta \end{aligned} \quad (4.3)$$

где $\hat{\mathbf{M}}_{\alpha\gamma}^\beta = \mathbf{M}_{\alpha\gamma}^\beta - \mathbf{a}_{\alpha\gamma}^\beta \times \mathbf{F}_{\alpha\gamma}^\beta$ – вектор, имеющий смысл момента, действующего на частицу β исходной ячейки со стороны частицы γ ячейки α , вычисленного относительно частицы γ ячейки α . Используя формулы (4.3), проведем следующие преобразования:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{F}_{\alpha\beta}^\gamma &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} (\mathbf{F}_{\alpha\beta}^\gamma + \mathbf{F}_{\alpha\gamma}^\beta) \\ \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{M}_{\alpha\beta}^\gamma &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} (\mathbf{M}_{\alpha\beta}^\gamma + \mathbf{M}_{-\alpha\beta}^\gamma) \approx \left(\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha\gamma}^\beta \mathbf{F}_{\alpha\gamma}^\beta \right) + \nabla \left(\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_\alpha \hat{\mathbf{M}}_{\alpha\gamma}^\beta \right) \end{aligned} \quad (4.4)$$

Знак $(\)_\times$ – обозначение векторного инварианта. В формулах (4.4) используется приближение $\hat{\nabla}_\beta \approx \nabla$, оператор ∇ вычисляется в точке исходной ячейки, положение которой определяется вектором \mathbf{r} . Заметим, что при переходе к длинноволновому приближению вектор \mathbf{r} можно рассматривать как вектор, определяющий положение исходной ячейки. При учете соотношений (4.4) уравнения движения исходной ячейки 3.2) в длинноволновом приближении записываются так:

$$\begin{aligned} \sum_{\gamma} m_{\gamma} \ddot{\mathbf{u}}_{\gamma} &= \nabla \left(\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{F}_{\alpha\gamma}^{\beta} \right) + \sum_{\gamma} \mathbf{f}_{\gamma}^* \\ \sum_{\gamma} \boldsymbol{\theta}_{\gamma} \cdot \ddot{\boldsymbol{\phi}}_{\gamma} &= \left(\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha\gamma}^{\beta} \mathbf{F}_{\alpha\gamma}^{\beta} \right) + \nabla \left(\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha} \hat{\mathbf{M}}_{\alpha\gamma}^{\beta} \right) + \sum_{\gamma} \mathbf{m}_{\gamma}^* \end{aligned} \quad (4.5)$$

Таким образом, получены дифференциальные уравнения движения исходной ячейки.

Ниже будет показано, что при соответствующем определении понятий тензоров напряжений, векторов объемной плотности внешних нагрузок и векторов перемещений дифференциальные уравнения (4.5) совпадают с уравнениями движения макроскопической моментной теории упругости.

5. Внутренние уравнения равновесия. Дифференциальные уравнения (4.5) описывают движение элементарной ячейки в целом и не характеризуют движение каждой частицы в отдельности. Движения каждой частицы элементарной ячейки описываются уравнениями (3.1). Однако, поскольку в уравнениях движения ячейки (4.5) сохранены только асимптотически главные члены, в уравнениях частиц (3.1) также имеет смысл отбросить поправочные слагаемые.

Итак, проведем нестрогий асимптотический анализ уравнений движения частиц исходной ячейки (3.1). В качестве малого параметра примем величину $\mathbf{a}_\varepsilon \cdot \nabla \sim \varepsilon$, при этом будем считать $\varepsilon M \ll 1$, где M – число частиц в элементарной ячейке. Тогда из уравнений (4.5) с учетом тождества

$$\sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha\gamma}^\beta \times \mathbf{F}_{\alpha\gamma}^\beta = \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma \times \mathbf{F}_{\alpha\beta}^\gamma$$

можно получить следующие асимптотические оценки:

$$\sum_{\gamma} m_{\gamma} \ddot{\mathbf{u}}_{\gamma} - \sum_{\gamma} \mathbf{f}_{\gamma}^* \sim \varepsilon M^2 \mathbf{F}_{\alpha\beta}^{\gamma}, \quad \sum_{\gamma} \boldsymbol{\theta}_{\gamma} \cdot \ddot{\boldsymbol{\phi}}_{\gamma} - \sum_{\gamma} \mathbf{m}_{\gamma}^* - \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \times \mathbf{F}_{\alpha\beta}^{\gamma} \sim \varepsilon M^2 \mathbf{M}_{\alpha\beta}^{\gamma} \quad (5.1)$$

Предположим, что внешние нагрузки – медленно меняющиеся функции пространственных координат, т.е.

$$|\mathbf{f}_{\gamma}^* - \mathbf{f}_{\beta}^*| \sim \varepsilon |\mathbf{f}_{\gamma}^*|, \quad |\mathbf{m}_{\gamma}^* - \mathbf{m}_{\beta}^*| \sim \varepsilon |\mathbf{m}_{\gamma}^*|$$

Ниже будет показано, что для перемещений и поворотов частиц ячейки имеют место асимптотические оценки:

$$|\mathbf{u}_{\gamma} - \mathbf{u}_{\beta}| \sim \varepsilon |\mathbf{u}_{\gamma}|, \quad |\boldsymbol{\phi}_{\gamma} - \boldsymbol{\phi}_{\beta}| \sim \varepsilon |\boldsymbol{\phi}_{\gamma}| \quad (5.2)$$

Следовательно,

$$\sum_{\gamma} (m_{\gamma} \ddot{\mathbf{u}}_{\gamma} - \mathbf{f}_{\gamma}^*) \approx M (m_{\gamma} \ddot{\mathbf{u}}_{\gamma} - \mathbf{f}_{\gamma}^*), \quad \sum_{\gamma} (\boldsymbol{\theta}_{\gamma} \cdot \ddot{\boldsymbol{\phi}}_{\gamma} - \mathbf{m}_{\gamma}^*) \approx M (\boldsymbol{\theta}_{\gamma} \cdot \ddot{\boldsymbol{\phi}}_{\gamma} - \mathbf{m}_{\gamma}^*)$$

Тогда в соответствие с оценками (5.1) можно утверждать, что

$$m_{\gamma} \ddot{\mathbf{u}}_{\gamma} - \mathbf{f}_{\gamma}^* \sim \varepsilon M \mathbf{F}_{\alpha\beta}^{\gamma}, \quad \boldsymbol{\theta}_{\gamma} \cdot \ddot{\boldsymbol{\phi}}_{\gamma} - \mathbf{m}_{\gamma}^* - \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \times \mathbf{F}_{\alpha\beta}^{\gamma} \sim \varepsilon M \mathbf{M}_{\alpha\beta}^{\gamma} \quad (5.3)$$

Следовательно, асимптотически главные члены уравнений (3.1) имеют вид

$$\sum_{\alpha, \beta} \mathbf{F}_{\alpha\beta}^{\gamma} = 0, \quad \sum_{\alpha, \beta} \left(\mathbf{M}_{\alpha\beta}^{\gamma} - \frac{1}{2} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \times \mathbf{F}_{\alpha\beta}^{\gamma} \right) = 0 \quad (5.4)$$

Итак, получены $2M$ внутренних уравнений равновесия. Уравнения первой группы представляют собой уравнения баланса сил, а уравнения второй группы, строго говоря, не являются уравнениями баланса моментов, поскольку представляют собой сумму моментов, вычисленных относительно разных точек. Заметим, что среди уравнений (5.4) только $2(M - 1)$ независимых. Действительно, используя асимптотически главные чле-

ны соотношений (4.4), нетрудно показать, что \sum_{γ} уравнений (5.4) тождественно равны нулю. Этот факт подтверждает правильность уравнений (5.4).

Заметим, что, воспользовавшись уравнениями (5.4), можно доказать важные тождества

$$\sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{F}_{\alpha\gamma}^{\beta} = \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha\gamma}^{\beta} \mathbf{F}_{\alpha\gamma}^{\beta}, \quad \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha} \hat{\mathbf{M}}_{\alpha\gamma}^{\beta} = \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha\gamma}^{\beta} \hat{\mathbf{M}}_{\alpha\gamma}^{\beta} \quad (5.5)$$

Легко показать также, что имеют место тождества

$$\sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha\gamma}^{\beta} \times \mathbf{F}_{\alpha\gamma}^{\beta} = 0, \quad \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha\gamma}^{\beta} \mathbf{a}_{\alpha\gamma}^{\beta} \times \mathbf{F}_{\alpha\gamma}^{\beta} = 0 \quad (5.6)$$

6. Континуальные уравнения движения. Принимая во внимание тождества (5.5), (5.6), можно показать, что уравнения движения исходной ячейки (4.5) совпадают с уравнениями динамики макроскопической моментной теории упругости

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{f} = \rho \ddot{\mathbf{u}}, \quad \nabla \cdot \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\tau}_{\times} + \mathbf{m} = \rho \boldsymbol{\vartheta} \cdot \dot{\boldsymbol{\varphi}} \quad (6.1)$$

Эквивалентность уравнений (4.5) и (6.1) достигается при использовании следующих обозначений:

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha\gamma}^{\beta} \mathbf{F}_{\alpha\gamma}^{\beta}, \quad \boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha\gamma}^{\beta} \left[\mathbf{M}_{\alpha\gamma}^{\beta} - \frac{1}{2} \mathbf{a}_{\alpha\gamma}^{\beta} \times \mathbf{F}_{\alpha\gamma}^{\beta} \right] \quad (6.2)$$

$$\left(\sum_{\gamma} m_{\gamma} \right) \mathbf{u} = \sum_{\gamma} m_{\gamma} \mathbf{u}_{\gamma}, \quad \left(\sum_{\gamma} \boldsymbol{\theta}_{\gamma} \right) \cdot \boldsymbol{\varphi} = \sum_{\gamma} \boldsymbol{\theta}_{\gamma} \cdot \boldsymbol{\varphi}_{\gamma} \quad (6.3)$$

$$\rho = \frac{1}{V_*} \sum_{\gamma} m_{\gamma}, \quad \rho \boldsymbol{\vartheta} = \frac{1}{V_*} \sum_{\gamma} \boldsymbol{\theta}_{\gamma}, \quad \mathbf{f} = \frac{1}{V_*} \sum_{\gamma} \mathbf{f}_{\gamma}^*, \quad \mathbf{m} = \frac{1}{V_*} \sum_{\gamma} \mathbf{m}_{\gamma}^* \quad (6.4)$$

Здесь V_* – объем элементарной ячейки. Тензор $\boldsymbol{\tau}$ будем называть тензором напряжений, тензор $\boldsymbol{\mu}$ – тензором моментных напряжений. Вектор \mathbf{u} определяет перемещение центра масс исходной ячейки (его будем называть вектором перемещений ячейки), вектор $\boldsymbol{\varphi}$ представляет собой осредненный по частицам вектор поворота (его будем называть вектором поворота ячейки), ρ – массовая плотность, $\boldsymbol{\vartheta}$ – тензор инерции среды, приходящийся на единицу массы (или массовая плотность тензора инерции), \mathbf{f} – объемная плотность внешних сил, \mathbf{m} – объемная плотность внешних моментов.

Перепишем внутренние уравнения равновесия (5.4) в виде

$$\sum_{\beta} \boldsymbol{\tau}_{\beta}^{\gamma} = 0, \quad \sum_{\beta} \boldsymbol{\mu}_{\beta}^{\gamma} = 0 \quad (6.5)$$

где введены обозначения

$$\boldsymbol{\tau}_{\beta}^{\gamma} = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \mathbf{F}_{\alpha\beta}^{\gamma}, \quad \boldsymbol{\mu}_{\beta}^{\gamma} = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \left(\mathbf{M}_{\alpha\beta}^{\gamma} - \frac{1}{2} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \times \mathbf{F}_{\alpha\beta}^{\gamma} \right) \quad (6.6)$$

Вектор $\boldsymbol{\tau}_{\beta}^{\gamma}$ будем называть вектором напряжений, а вектор $\boldsymbol{\mu}_{\beta}^{\gamma}$ – вектором моментных напряжений.

Уравнения (6.1), (6.5) представляют собой континуальные уравнения движения ячейки с микроструктурой.

7. Тензоры деформации и векторы невязки. Рассмотрим две взаимодействующие частицы: частицу γ исходной ячейки и частицу β ячейки α . Векторы деформации этой системы $\boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha\beta}^\gamma, \boldsymbol{\kappa}_{\alpha\beta}^\gamma$ определяются формулами (1.12) и имеют вид

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha\beta}^\gamma = \mathbf{u}_\beta(\mathbf{r}_\beta + \mathbf{a}_\alpha) - \mathbf{u}_\gamma(\mathbf{r}_\gamma) + \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma \times \boldsymbol{\varphi}_\beta(\mathbf{r}_\beta + \mathbf{a}_\alpha), \quad \boldsymbol{\kappa}_{\alpha\beta}^\gamma = \boldsymbol{\varphi}_\beta(\mathbf{r}_\beta + \mathbf{a}_\alpha) - \boldsymbol{\varphi}_\gamma(\mathbf{r}_\gamma) \quad (7.1)$$

Используя длинноволновое приближение (см. [7]), запишем выражения для векторов деформации (7.1)

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha\beta}^\gamma = \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{u}_\beta^\gamma + \frac{1}{2} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma \times (\mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma \cdot \boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\varphi}_\beta^\gamma), \quad \boldsymbol{\kappa}_{\alpha\beta}^\gamma = \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma \cdot \boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\varphi}_\beta^\gamma \quad (7.2)$$

Здесь введены в рассмотрение тензоры деформации решетки

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \nabla_\gamma (\mathbf{u}_\beta + \mathbf{u}_\gamma) + \mathbf{E} \times \frac{1}{2} [\boldsymbol{\varphi}_\beta + \boldsymbol{\varphi}_\gamma], \quad \boldsymbol{\kappa} = \frac{1}{2} \nabla_\gamma (\boldsymbol{\varphi}_\beta + \boldsymbol{\varphi}_\gamma), \quad (7.3)$$

где \mathbf{E} – единичный тензор и векторы невязки

$$\mathbf{u}_\beta^\gamma = \mathbf{u}_\beta - \mathbf{u}_\gamma, \quad \boldsymbol{\varphi}_\beta^\gamma = \boldsymbol{\varphi}_\beta - \boldsymbol{\varphi}_\gamma \quad (7.4)$$

Все величины в формулах (7.3), (7.4) вычисляются при $\mathbf{r} = \mathbf{r}_\gamma + \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma/2$.

Заметим, что согласно оценкам (5.2), обоснование которым будет дано ниже, и формулам (6.3), которые вводят в рассмотрение векторы перемещения и поворота ячейки $\mathbf{u}, \boldsymbol{\varphi}$, имеют место приближения

$$\mathbf{u}_\gamma \approx \mathbf{u}, \quad \boldsymbol{\varphi}_\gamma \approx \boldsymbol{\varphi}$$

допускающие ошибку $O(\varepsilon)$ в сравнении с главным членом. Тогда тензоры деформации (7.3) можно переписать в виде

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla \mathbf{u} + \mathbf{E} \times \boldsymbol{\varphi}, \quad \boldsymbol{\kappa} = \nabla \boldsymbol{\varphi} \quad (7.5)$$

Таким образом, асимптотически главные члены выражений (7.3), (7.5) совпадают.

8. Соотношения упругости в неявной форме. Рассмотрим две взаимодействующие частицы: частицу γ исходной ячейки и частицу β ячейки α . Согласно формулам (1.12) соотношения упругости для рассматриваемой системы частиц имеют вид

$$\mathbf{F}_{\alpha\beta}^\gamma = \tilde{\mathbf{F}}_{\alpha\beta}^\gamma + \tilde{\mathbf{A}}_{\alpha\beta}^\gamma \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha\beta}^\gamma + \mathbf{B}_{\alpha\beta}^\gamma \cdot \boldsymbol{\kappa}_{\alpha\beta}^\gamma, \quad \mathbf{M}_{\alpha\beta}^\gamma = \tilde{\mathbf{M}}_{\alpha\beta}^\gamma + \boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha\beta}^\gamma \cdot \tilde{\mathbf{B}}_{\alpha\beta}^\gamma + \tilde{\mathbf{C}}_{\alpha\beta}^\gamma \cdot \boldsymbol{\kappa}_{\alpha\beta}^\gamma \quad (8.1)$$

Подставив выражения (7.2) в соотношения упругости (8.1) и воспользовавшись соотношениями для тензоров жесткости (1.13), после преобразований получим выражения для векторов силы и момента в виде функций тензоров деформации и векторов невязки. Подставив их в формулы (6.2), (6.6), получим выражения для тензоров и векторов напряжений

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} &= \boldsymbol{\tau}_0 + {}^4\mathbf{A}^* \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + {}^4\mathbf{B}^* \cdot \boldsymbol{\kappa} + \sum_{\beta, \gamma} [{}^3\mathbf{A}_\beta^\gamma \cdot \mathbf{u}_\beta^\gamma + {}^3\mathbf{B}_\beta^\gamma \cdot \boldsymbol{\varphi}_\beta^\gamma] \\ \boldsymbol{\mu} &= \boldsymbol{\mu}_0 + ({}^4\mathbf{B}^*)^T \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + {}^4\mathbf{C}^* \cdot \boldsymbol{\kappa} + \sum_{\beta, \gamma} [({}^3\mathbf{B}_\beta^\gamma)^T \cdot \mathbf{u}_\beta^\gamma + {}^3\mathbf{C}_\beta^\gamma \cdot \boldsymbol{\varphi}_\beta^\gamma] \\ \boldsymbol{\tau}_\beta^\gamma &= \tilde{\boldsymbol{\tau}}_\beta^\gamma + \boldsymbol{\varepsilon}^T \cdot {}^3\mathbf{A}_\beta^\gamma + \boldsymbol{\kappa}^T \cdot ({}^3\mathbf{B}_\beta^\gamma)^T + \mathbf{A}_\beta^\gamma \cdot \mathbf{u}_\beta^\gamma + \mathbf{B}_\beta^\gamma \cdot \boldsymbol{\varphi}_\beta^\gamma \\ \boldsymbol{\mu}_\beta^\gamma &= \tilde{\boldsymbol{\mu}}_\beta^\gamma + \boldsymbol{\varepsilon}^T \cdot {}^3\mathbf{B}_\beta^\gamma + \boldsymbol{\kappa}^T \cdot {}^3\mathbf{C}_\beta^\gamma + ({}^3\mathbf{B}_\beta^\gamma)^T \cdot \mathbf{u}_\beta^\gamma + \mathbf{C}_\beta^\gamma \cdot \boldsymbol{\varphi}_\beta^\gamma \end{aligned} \quad (8.2)$$

Тензоры жесткости вычисляются по формулам

$$\begin{aligned}
{}^4\mathbf{Z}^* &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma \mathbf{Z}_{\alpha\beta}^\gamma \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma, \quad {}^3\mathbf{Z}_\beta^\gamma = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma \mathbf{Z}_{\alpha\beta}^\gamma, \quad \mathbf{Z}_\beta^\gamma = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \mathbf{Z}_{\alpha\beta}^\gamma, \quad \mathbf{Z} = \mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C} \\
({}^4\mathbf{B}^{*T}) &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma (\mathbf{B}_{\alpha\beta}^\gamma)^T \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma, \quad ({}^3\mathbf{B}_\beta^\gamma)^T = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma (\mathbf{B}_{\alpha\beta}^\gamma)^T \\
\boldsymbol{\tau}_0 &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma \tilde{\mathbf{F}}_{\alpha\beta}^\gamma, \quad \boldsymbol{\mu}_0 = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma \left(\tilde{\mathbf{M}}_{\alpha\beta}^\gamma - \frac{1}{2} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma \times \tilde{\mathbf{F}}_{\alpha\beta}^\gamma \right) \\
\tilde{\boldsymbol{\tau}}_\beta^\gamma &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \tilde{\mathbf{F}}_{\alpha\beta}^\gamma, \quad \tilde{\boldsymbol{\mu}}_\beta^\gamma = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} \left(\tilde{\mathbf{M}}_{\alpha\beta}^\gamma - \frac{1}{2} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma \times \tilde{\mathbf{F}}_{\alpha\beta}^\gamma \right)
\end{aligned} \tag{8.3}$$

Таким образом, формулы (8.2) позволяют выразить тензоры и векторы напряжений через тензоры деформации решетки $\boldsymbol{\varepsilon}$, $\boldsymbol{\kappa}$ и векторы невязки \mathbf{u}_β^γ , $\boldsymbol{\phi}_\beta^\gamma$. Для определения связи векторов невязки с тензорами деформации решетки служат внутренние уравнения равновесия (6.5). Подставив выражения для векторов напряжений (8.2) в уравнения (6.5), получим систему $2M$ уравнений (из которых $2(M-1)$ независимых)

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\varepsilon}^T \dots {}^3\mathbf{A}^\gamma + \boldsymbol{\kappa}^T \dots ({}^3\mathbf{B}^\gamma)^T + \sum_{\beta} [\mathbf{A}_\beta^\gamma \cdot \mathbf{u}_\beta^\gamma + \mathbf{B}_\beta^\gamma \cdot \boldsymbol{\phi}_\beta^\gamma] &= 0 \\
\boldsymbol{\varepsilon}^T \dots {}^3\mathbf{B}^\gamma + \boldsymbol{\kappa}^T \dots {}^3\mathbf{C}^\gamma + \sum_{\beta} [(\mathbf{B}_\beta^\gamma)^T \cdot \mathbf{u}_\beta^\gamma + \mathbf{C}_\beta^\gamma \cdot \boldsymbol{\phi}_\beta^\gamma] &= 0
\end{aligned} \tag{8.4}$$

Тензоры жесткости второго ранга определяются выражениями (8.3), а тензоры жесткости третьего ранга вычисляются по формулам

$${}^3\mathbf{A}^\gamma = \sum_{\beta} {}^3\mathbf{A}_\beta^\gamma, \quad {}^3\mathbf{B}^\gamma = \sum_{\beta} {}^3\mathbf{B}_\beta^\gamma, \quad {}^3\mathbf{C}^\gamma = \sum_{\beta} {}^3\mathbf{C}_\beta^\gamma \tag{8.5}$$

При выводе уравнений (8.4) учтено, что для начальных напряжений выполняются условия равновесия отсчетной конфигурации

$$\sum_{\beta} \tilde{\boldsymbol{\tau}}_\beta^\gamma = 0, \quad \sum_{\beta} \tilde{\boldsymbol{\mu}}_\beta^\gamma = 0 \tag{8.6}$$

Принимая во внимание выражения для векторов невязки (7.4), заметим, что система (8.4) фактически является системой уравнений относительно векторов перемещения и поворота \mathbf{u}_γ , $\boldsymbol{\phi}_\gamma$

9. Соотношения упругости в явной форме. Представим векторы перемещений и поворотов в виде

$$\mathbf{u}_\gamma = \boldsymbol{\varepsilon}^T \dots {}^3\mathbf{U}_\gamma^\varepsilon + \boldsymbol{\kappa}^T \dots {}^3\mathbf{U}_\gamma^\kappa + \mathbf{u}_0, \quad \boldsymbol{\phi}_\gamma = \boldsymbol{\varepsilon}^T \dots {}^3\boldsymbol{\Phi}_\gamma^\varepsilon + \boldsymbol{\kappa}^T \dots {}^3\boldsymbol{\Phi}_\gamma^\kappa + \boldsymbol{\phi}_0 \tag{9.1}$$

Тензоры третьего ранга ${}^3\mathbf{U}_{\varepsilon\gamma}$, ${}^3\mathbf{U}_{\kappa\gamma}$, ${}^3\boldsymbol{\Phi}_{\varepsilon\gamma}$, ${}^3\boldsymbol{\Phi}_{\kappa\gamma}$ будем называть тензорами внутренних связей. Заметим, что векторы \mathbf{u}_γ , $\boldsymbol{\phi}_\gamma$ всегда могут быть представлены в форме (9.1), поскольку это общая линейная зависимость между векторами \mathbf{u}_γ , $\boldsymbol{\phi}_\gamma$ и тензорами второго ранга $\boldsymbol{\varepsilon}$, $\boldsymbol{\kappa}$. Подставив выражения (9.1) в соотношения для векторов невязки (7.4), получим

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_\beta^\gamma &= \boldsymbol{\varepsilon}^T \dots ({}^3\mathbf{U}_\beta^\varepsilon - {}^3\mathbf{U}_\gamma^\varepsilon) + \boldsymbol{\kappa}^T \dots ({}^3\mathbf{U}_\beta^\kappa - {}^3\mathbf{U}_\gamma^\kappa) \\
\boldsymbol{\phi}_\beta^\gamma &= \boldsymbol{\varepsilon}^T \dots ({}^3\boldsymbol{\Phi}_\beta^\varepsilon - {}^3\boldsymbol{\Phi}_\gamma^\varepsilon) + \boldsymbol{\kappa}^T \dots ({}^3\boldsymbol{\Phi}_\beta^\kappa - {}^3\boldsymbol{\Phi}_\gamma^\kappa)
\end{aligned} \tag{9.2}$$

Заметим, что выражения для векторов невязки (7.4) не зависят от векторов \mathbf{u}_0, Φ_0 . Следовательно, векторы \mathbf{u}_0, Φ_0 могут быть выбраны произвольно. Можно было бы положить их равными нулю, однако удобнее определить их следующим образом:

$$\sum_{\gamma} \mathbf{u}_{\gamma} = M\mathbf{u}_0, \quad \sum_{\gamma} \Phi_{\gamma} = M\Phi_0 \quad (9.3)$$

Получим уравнения для определения тензоров внутренних связей. Для этого подставим выражения для векторов невязки (9.2) в уравнения (8.4), что приведет к системе линейных однородных алгебраических уравнений относительно тензоров деформации. Уравнения должны быть справедливы при любых значениях тензоров деформации. Это возможно, если коэффициенты при тензорах деформации тождественно равны нулю. Приравняв нулю коэффициенты при тензорах $\boldsymbol{\varepsilon}$ и \mathbf{k} , получим систему $4M$ уравнений для тензоров внутренних связей, среди которых только $4(M - 1)$ независимых. Чтобы замкнуть эту систему уравнений, заметим, что следствием соотношений (9.1), (9.3) являются два линейных однородных уравнения, представляющих собой геометрические связи. Поскольку эти уравнения должны выполняться при любых $\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{k}$, они равносильны четырем уравнениям, накладывающим геометрические связи на тензоры внутренних связей. Добавление этих уравнений к полученной ранее системе дает замкнутую систему $4M$ уравнений относительно тензоров внутренних связей, которая распадается на две независимые системы $2M$ уравнений

$$\begin{aligned} {}^3\mathbf{A}^{\gamma} + \sum_{\beta} [{}^3\mathbf{U}_{\beta}^{\varepsilon} - {}^3\mathbf{U}_{\gamma}^{\varepsilon}] \cdot \mathbf{A}_{\beta}^{\gamma} + \sum_{\beta} [{}^3\Phi_{\beta}^{\varepsilon} - {}^3\Phi_{\gamma}^{\varepsilon}] \cdot (\mathbf{A}_{\beta}^{\gamma})^T &= 0, \quad \sum_{\gamma} {}^3\mathbf{U}_{\gamma}^{\varepsilon} = 0 \\ {}^3\mathbf{B}^{\gamma} + \sum_{\beta} [{}^3\mathbf{U}_{\beta}^{\varepsilon} - {}^3\mathbf{U}_{\gamma}^{\varepsilon}] \cdot \mathbf{B}_{\beta}^{\gamma} + \sum_{\beta} [{}^3\Phi_{\beta}^{\varepsilon} - {}^3\Phi_{\gamma}^{\varepsilon}] \cdot \mathbf{C}_{\beta}^{\gamma} &= 0, \quad \sum_{\gamma} {}^3\Phi_{\gamma}^{\varepsilon} = 0 \\ ({}^3\mathbf{B}^{\gamma})^t + \sum_{\beta} [{}^3\mathbf{U}_{\beta}^{\kappa} - {}^3\mathbf{U}_{\gamma}^{\kappa}] \cdot \mathbf{A}_{\beta}^{\gamma} + \sum_{\beta} [{}^3\Phi_{\beta}^{\kappa} - {}^3\Phi_{\gamma}^{\kappa}] \cdot (\mathbf{B}_{\beta}^{\gamma})^T &= 0, \quad \sum_{\gamma} {}^3\mathbf{U}_{\gamma}^{\kappa} = 0 \\ {}^3\mathbf{C}^{\gamma} + \sum_{\beta} [{}^3\mathbf{U}_{\beta}^{\kappa} - {}^3\mathbf{U}_{\gamma}^{\kappa}] \cdot \mathbf{B}_{\beta}^{\gamma} + \sum_{\beta} [{}^3\Phi_{\beta}^{\kappa} - {}^3\Phi_{\gamma}^{\kappa}] \cdot \mathbf{C}_{\beta}^{\gamma} &= 0, \quad \sum_{\gamma} {}^3\Phi_{\gamma}^{\kappa} = 0 \end{aligned} \quad (9.4)$$

Как видно из уравнений (9.4), тензоры внутренних связей являются характеристиками материала и не зависят от движения частиц решетки. Заметим, что из формул (9.1) для перемещений \mathbf{u}_{γ} и поворотов Φ_{γ} , где тензоры внутренних связей определяются уравнениями (9.4), следует, что $|\mathbf{u}_{\gamma} - \mathbf{u}|$ – малая величина порядка $\varepsilon\mathbf{u}$, а $|\Phi_{\gamma} - \Phi|$ – малая величина порядка $\varepsilon\Phi$.

Определение тензоров внутренних связей дает возможность записать соотношения упругости в явной форме. Действительно, подставив выражения для векторов невязки (9.2) в соотношения упругости (8.2), получим

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}^0 + {}^4\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + {}^4\mathbf{B} \cdot \mathbf{k}, \quad \boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_0 + {}^4\tilde{\mathbf{B}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + {}^4\mathbf{C} \cdot \mathbf{k} \quad (9.5)$$

Макроскопические тензоры жесткости ${}^4\mathbf{A}, {}^4\mathbf{B}, {}^4\tilde{\mathbf{B}}, {}^4\mathbf{C}$ вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} {}^4\mathbf{A} &= {}^4\mathbf{A}^* + \sum_{\beta, \gamma} ({}^4\mathbf{A}_{\beta}^{\gamma} \cdot [{}^3\mathbf{U}_{\beta}^{\varepsilon} - {}^3\mathbf{U}_{\gamma}^{\varepsilon}]^T + {}^4\mathbf{B}_{\beta}^{\gamma} \cdot [{}^3\Phi_{\beta}^{\varepsilon} - {}^3\Phi_{\gamma}^{\varepsilon}]^T) \\ {}^4\mathbf{B} &= {}^4\mathbf{B}^* + \sum_{\beta, \gamma} ({}^4\mathbf{A}_{\beta}^{\gamma} \cdot [{}^3\mathbf{U}_{\beta}^{\kappa} - {}^3\mathbf{U}_{\gamma}^{\kappa}]^T + {}^4\mathbf{B}_{\beta}^{\gamma} \cdot [{}^3\Phi_{\beta}^{\kappa} - {}^3\Phi_{\gamma}^{\kappa}]^T) \\ {}^4\tilde{\mathbf{B}} &= ({}^4\mathbf{B}^*)^T + \sum_{\beta, \gamma} (({}^4\mathbf{B}_{\beta}^{\gamma})^t \cdot [{}^3\mathbf{U}_{\beta}^{\varepsilon} - {}^3\mathbf{U}_{\gamma}^{\varepsilon}]^T + {}^4\mathbf{C}_{\beta}^{\gamma} \cdot [{}^3\Phi_{\beta}^{\varepsilon} - {}^3\Phi_{\gamma}^{\varepsilon}]^T) \end{aligned} \quad (9.6)$$

$${}^4\mathbf{C} = {}^4\mathbf{C}^* + \sum_{\beta, \gamma} (({}^4\mathbf{B}_{\beta}^{\gamma})^t \cdot [{}^3\mathbf{U}_{\beta}^{\kappa} - {}^3\mathbf{U}_{\gamma}^{\kappa}]^T + {}^4\mathbf{C}_{\beta}^{\gamma} \cdot [{}^3\mathbf{\Phi}_{\beta}^{\kappa} - {}^3\mathbf{\Phi}_{\gamma}^{\kappa}]^T)$$

Операция транспонирования для тензора третьего ранга определяется следующим образом:

$${}^3\mathbf{D} \Rightarrow D^{igk} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k \Rightarrow {}^3\mathbf{D}^T = D^{igk} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_j \mathbf{e}_i \quad (9.7)$$

10. Энергетический подход к определению тензоров деформации и векторов невязки.

Запишем уравнение баланса энергии двух взаимодействующих частиц – частицы γ исходной ячейки и частицы β ячейки α в форме

$$\dot{W}_{\alpha\beta}^{\gamma} = \mathbf{F}_{\alpha\beta}^{\gamma} \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_{\alpha\beta}^{\gamma} + \mathbf{M}_{\alpha\beta}^{\gamma} \cdot \dot{\boldsymbol{\kappa}}_{\alpha\beta}^{\gamma} \quad (10.1)$$

Просуммировав уравнения (10.1) по индексам α, β, γ получим уравнение баланса энергии для всей системы

$$\dot{W} = \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \dot{W}_{\alpha\beta}^{\gamma} = \sum_{\alpha, \beta, \gamma} [\mathbf{F}_{\alpha\beta}^{\gamma} \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}}_{\alpha\beta}^{\gamma} + \mathbf{M}_{\alpha\beta}^{\gamma} \cdot \dot{\boldsymbol{\kappa}}_{\alpha\beta}^{\gamma}] \quad (10.2)$$

Используя соотношения (7.2), связывающие векторы деформации с тензорами деформации (7.5) и векторами невязки (7.4), уравнение (10.2) приводим к виду

$$\begin{aligned} \dot{W} = & \left(\sum_{\alpha, \beta, \gamma} \mathbf{F}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha} \right) \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}} + \left(\sum_{\alpha, \beta, \gamma} \left[\mathbf{M}_{\alpha\beta}^{\gamma} - \frac{1}{2} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \times \mathbf{F}_{\alpha\beta}^{\gamma} \right] \mathbf{a}_{\alpha} \right) \cdot \dot{\boldsymbol{\kappa}} + \\ & + \sum_{\beta, \gamma} \left[\left(\sum_{\alpha} \mathbf{F}_{\alpha\beta}^{\gamma} \right) \cdot \dot{\mathbf{u}}_{\beta}^{\gamma} + \left(\sum_{\alpha} \left[\mathbf{M}_{\alpha\beta}^{\gamma} - \frac{1}{2} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \times \mathbf{F}_{\alpha\beta}^{\gamma} \right] \cdot \dot{\boldsymbol{\phi}}_{\beta}^{\gamma} \right) \right] \end{aligned} \quad (10.3)$$

Введем в рассмотрение массовую плотность внутренней энергии

$$\rho U = \frac{1}{2V_*} W = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} W_{\alpha\beta}^{\gamma} \quad (10.4)$$

Тогда с использованием выражений (6.2) для тензоров напряжений $\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\mu}$ и выражений (6.6) для векторов напряжений $\boldsymbol{\tau}_{\beta}^{\gamma}, \boldsymbol{\mu}_{\beta}^{\gamma}$, уравнение (10.3) можно записать в форме

$$(\rho U) \dot{} = \boldsymbol{\tau}^T \cdot \dot{\boldsymbol{\epsilon}} + \boldsymbol{\mu}^T \cdot \dot{\boldsymbol{\kappa}} + \sum_{\beta, \gamma} [\boldsymbol{\tau}_{\beta}^{\gamma} \cdot \dot{\mathbf{u}}_{\beta}^{\gamma} + \boldsymbol{\mu}_{\beta}^{\gamma} \cdot \dot{\boldsymbol{\phi}}_{\beta}^{\gamma}] \quad (10.5)$$

Таким образом, доказано, что введенные выше величины $\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\kappa}, \mathbf{u}_{\beta}^{\gamma}, \boldsymbol{\phi}_{\beta}^{\gamma}$ – это именно те меры деформаций, на которых совершают работу тензоры напряжений $\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\mu}$ и векторы напряжений $\boldsymbol{\tau}_{\beta}^{\gamma}, \boldsymbol{\mu}_{\beta}^{\gamma}$. Отметим, что тензоры деформации (7.5) в точности совпадают с тензорами деформации макроскопической моментной теории упругости. Тогда согласно уравнению баланса энергии (10.5) тензор напряжений $\boldsymbol{\tau}$ и тензор моментных напряжений $\boldsymbol{\mu}$, определяемые формулами (6.2), должны в точности совпадать с соответствующими величинами макроскопической моментной теории упругости.

11. Соотношения Коши–Грина. Получим соотношения упругости, используя энергетический подход. Поскольку рассматривается упругое деформирование си-

стемы, соотношения Коши – Грина согласно уравнению баланса энергии (10.5) имеют вид

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\partial \rho U}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}, \quad \boldsymbol{\mu} = \frac{\partial \rho U}{\partial \boldsymbol{\kappa}}, \quad \boldsymbol{\tau}_\beta^\gamma = \frac{\partial R U}{\partial \mathbf{u}_\beta^\gamma}, \quad \boldsymbol{\mu}_\beta^\gamma = \frac{\partial \rho U}{\partial \boldsymbol{\varphi}_\beta^\gamma} \quad (11.1)$$

Таким образом, для получения соотношений между напряжениями и деформациями с помощью формул (11.1) требуется задание плотности внутренней энергии как функции тензоров деформации и векторов невязки.

Энергия взаимодействия частицы γ исходной ячейки с частицей β ячейки α имеет вид

$$W_{\alpha\beta}^\gamma = \tilde{\mathbf{F}}_{\alpha\beta}^\gamma \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha\beta}^\gamma + \tilde{\mathbf{M}}_{\alpha\beta}^\gamma \cdot \boldsymbol{\kappa}_{\alpha\beta}^\gamma + \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha\beta}^\gamma \cdot \tilde{\mathbf{A}}_{\alpha\beta}^\gamma \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha\beta}^\gamma + \boldsymbol{\varepsilon}_{\alpha\beta}^\gamma \cdot \tilde{\mathbf{B}}_{\alpha\beta}^\gamma \cdot \boldsymbol{\kappa}_{\alpha\beta}^\gamma + \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa}_{\alpha\beta}^\gamma \cdot \tilde{\mathbf{C}}_{\alpha\beta}^\gamma \cdot \boldsymbol{\kappa}_{\alpha\beta}^\gamma \quad (11.2)$$

Подставив в формулу для массовой плотности внутренней энергии системы (10.4) выражение для энергии взаимодействия двух частиц (11.2) и выражения для векторов деформации (7.2), получим выражение для плотности внутренней энергии в виде квадратичной форме тензоров деформации и векторов невязки

$$\begin{aligned} \rho U = & \boldsymbol{\varepsilon}^T \cdot \boldsymbol{\tau}_0 + \boldsymbol{\kappa}^T \cdot \boldsymbol{\mu}_0 + \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^T \cdot \mathbf{A}^* \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon}^T \cdot \mathbf{B}^* \cdot \boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa}^T \cdot \mathbf{C}^* \cdot \boldsymbol{\kappa} + \\ & + \boldsymbol{\varepsilon}^T \cdot \sum_{\beta, \gamma} [{}^3 \mathbf{A}_\beta^\gamma \cdot \mathbf{u}_\beta^\gamma + {}^3 \mathbf{B}_\beta^\gamma \cdot \boldsymbol{\varphi}_\beta^\gamma] + \boldsymbol{\kappa}^T \cdot \sum_{\beta, \gamma} [({}^3 \mathbf{B}_\beta^\gamma)^t \cdot \mathbf{u}_\beta^\gamma + {}^3 \mathbf{C}_\beta^\gamma \cdot \boldsymbol{\varphi}_\beta^\gamma] + \\ & + \sum_{\beta, \gamma} \left[\tilde{\boldsymbol{\tau}}_\beta^\gamma \cdot \mathbf{u}_\beta^\gamma + \tilde{\boldsymbol{\mu}}_\beta^\gamma \cdot \boldsymbol{\varphi}_\beta^\gamma + \frac{1}{2} \mathbf{u}_\beta^\gamma \cdot \mathbf{A}_\beta^\gamma \cdot \mathbf{u}_\beta^\gamma + \mathbf{u}_\beta^\gamma \cdot \mathbf{B}_\beta^\gamma \cdot \boldsymbol{\varphi}_\beta^\gamma + \frac{1}{2} \boldsymbol{\varphi}_\beta^\gamma \cdot \mathbf{C}_\beta^\gamma \cdot \boldsymbol{\varphi}_\beta^\gamma \right] \end{aligned} \quad (11.3)$$

Подставив выражение для плотности внутренней энергии (11.3) в соотношения Коши – Грина (11.1), получим соотношения упругости в неявной форме, в точности совпадающие с соотношениями (8.2), что подтверждает логическую непротиворечивость построенной теории.

Подставив в формулу (11.3) выражения для векторов невязки (9.2), после преобразований с учетом уравнений (8.6) получим выражение для плотности внутренней энергии в виде квадратичной формы тензоров деформации

$$\rho U = \boldsymbol{\varepsilon}^T \cdot \boldsymbol{\tau}_0 + \boldsymbol{\kappa}^T \cdot \boldsymbol{\mu}_0 + \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon}^T \cdot \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\kappa} + \boldsymbol{\kappa}^T \cdot \tilde{\mathbf{B}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\kappa}) \quad (11.4)$$

Тензоры жесткости и тензоры начальных напряжений определяются формулами (9.6).

Воспользовавшись формулами (9.4), (9.6), можно показать, что имеет место тождество

$$\boldsymbol{\varepsilon}^T \cdot \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\kappa} \equiv \boldsymbol{\kappa}^T \cdot \tilde{\mathbf{B}} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \quad (11.5)$$

Подставив выражение для плотности внутренней энергии (11.4) в соотношения Коши – Грина (11.1), получим соотношения упругости в явной форме, в точности совпадающие с соотношениями (9.5), что также подтверждает логическую непротиворечивость построенной теории. Отметим, что тензоры деформации решетки (7.5) в точности совпадают с тензорами деформации макроскопической моментной теории упругости. Соотношения упругости (9.5) также совпадают с соотношениями упругости макроскопической теории. Тогда тензор напряжений $\boldsymbol{\tau}$ и тензор моментных напряжений $\boldsymbol{\mu}$, определяемые формулами (6.2), должны совпадать с соответствующими величинами макроскопической моментной теории упругости.

12. Определение тензоров жесткости двухатомных кристаллических решеток. Рассмотрим сложную кристаллическую решетку, элементарная ячейка которой содержит два атома: например двумерная шестиугольная решетка, трехмерная решетка графита и алмаза, кубическая решетка NaCl и др. Для таких решеток система уравнений для определения тензора жесткости может быть решена в явном виде. Ниже ограничимся случаем, когда уравнения для силовых и моментных тензоров жесткости разделяются, однако можно показать, что явное решение существует и для общего случая, когда имеются перекрестные тензоры жесткости.

Согласно соотношениям (9.4) и (9.6), при отсутствии перекрестных жесткостей макроскопические тензоры жесткости ${}^4\mathbf{A}$ и ${}^4\mathbf{C}$ вычисляются по формулам

$${}^4\mathbf{A} = {}^4\mathbf{A}^* + \sum_{\beta, \gamma} {}^4\mathbf{A}_{\beta}^{\gamma} [{}^3\mathbf{U}_{\beta}^{\varepsilon} - {}^3\mathbf{U}_{\gamma}^{\varepsilon}]^T, \quad {}^4\mathbf{C} = \sum_{\beta, \gamma} {}^4\mathbf{C}_{\beta}^{\gamma} [{}^3\mathbf{\Phi}_{\beta}^{\kappa} - {}^3\mathbf{\Phi}_{\gamma}^{\kappa}]^T \quad (12.1)$$

где промежуточные переменные – тензоры невязки ${}^3\mathbf{U}_{\gamma}^{\varepsilon}$ и ${}^3\mathbf{\Phi}_{\gamma}^{\kappa}$, определяются в результате решения двух независимых систем M уравнений

$${}^3\mathbf{A}^{\gamma} + \sum_{\beta} [{}^3\mathbf{U}_{\beta}^{\varepsilon} - {}^3\mathbf{U}_{\gamma}^{\varepsilon}] \mathbf{A}_{\beta}^{\gamma} = 0, \quad {}^3\mathbf{C}^{\gamma} + \sum_{\beta} [{}^3\mathbf{\Phi}_{\beta}^{\kappa} - {}^3\mathbf{\Phi}_{\gamma}^{\kappa}] \mathbf{C}_{\beta}^{\gamma} = 0 \quad (12.2)$$

В данном случае $M = 2$, а индексы β и γ принимают значения 1 и 2. Кроме того, для тензоров невязки выполняются тождества (9.4), т.е.

$${}^3\mathbf{U}_1^{\varepsilon} + {}^3\mathbf{U}_2^{\varepsilon} = 0, \quad {}^3\mathbf{\Phi}_1^{\kappa} + {}^3\mathbf{\Phi}_2^{\kappa} = 0 \quad (12.3)$$

Следовательно, из четырех уравнений (12.2) только два независимые, например уравнения при $\gamma = 1$.

Совместное решение уравнений (12.2) при $\gamma = 1$ и уравнений (12.3) позволяет найти тензоры невязки в явном виде

$${}^3\mathbf{U}_1^{\varepsilon} = \frac{1}{2} ({}^3\mathbf{A}^1) \cdot (\mathbf{A}_2^1)^{-1}, \quad {}^3\mathbf{\Phi}_1^{\kappa} = \frac{1}{2} ({}^3\mathbf{C}^1) \cdot (\mathbf{C}_2^1)^{-1} \quad (12.4)$$

а их подстановка в формулы (12.1) позволяет получить явные выражения для тензоров жесткости

$${}^4\mathbf{A} = {}^4\mathbf{A}^* - 2({}^3\mathbf{A}_2^1) \cdot (\mathbf{A}_1^2)^{-T} \cdot ({}^3\mathbf{A}_2^1)^T, \quad {}^4\mathbf{C} = {}^4\mathbf{C}^* - 2({}^3\mathbf{C}_2^1) \cdot (\mathbf{C}_1^2)^{-T} \cdot ({}^3\mathbf{C}_2^1)^T \quad (12.5)$$

Здесь обозначено $\mathbf{A}^{-T} \stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{A}^{-1})^T$ и использованы тождества

$${}^3\mathbf{A}^1 = {}^3\mathbf{A}_2^1 = -{}^3\mathbf{A}_1^2, \quad {}^3\mathbf{C}^1 = {}^3\mathbf{C}_2^1 = -{}^3\mathbf{C}_1^2 \quad (12.6)$$

13. Вычисление тензоров жесткости шестиугольной решетки. В этом разделе для шестиугольной решетки (двумерной решетки графита) рассчитываются тензоры жесткости и определяется связь макроскопических модулей упругости с жесткостями межатомных связей.

Жесткости межатомных связей. Так как рассматривается двумерная решетка, то будем считать, что все атомы перемещаются в плоскости, перпендикулярной единичному вектору \mathbf{k} , а повороты осуществляются вокруг вектора \mathbf{k} . Представим тензоры жесткости межатомных связей в виде

$$\mathbf{A}_{\alpha\beta}^{\gamma} = A_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} + D_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{d}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{d}_{\alpha\beta}^{\gamma}, \quad \mathbf{C}_{\alpha\beta}^{\gamma} = C_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{k} \mathbf{k}; \quad \mathbf{d}_{\alpha\beta}^{\gamma} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{k} \times \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \quad (13.1)$$

Согласно первой формуле (13.1) тензор $\mathbf{A}_{\alpha\beta}^{\gamma}$ не содержит слагаемого, пропорционального тензору $\mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{d}_{\alpha\beta}^{\gamma} + \mathbf{d}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma}$ (перекрестный член), что справедливо при наличии

определенных симметрий, существующих у многих кристаллических решеток, в том числе у шестиугольной. Произведения $A_{\alpha\beta}^{\gamma} (a_{\alpha\beta}^{\gamma})^2$ и $D_{\alpha\beta}^{\gamma} (a_{\alpha\beta}^{\gamma})^2$ – соответственно продольная и поперечная жесткость межатомных связей. Отметим, что наличие поперечных жесткостей свидетельствует о нецентральности межатомного взаимодействия. Известно, что нецентральное взаимодействие имеет место только в моментных теориях [15].

Подстановка выражений (13.1) в соотношения (8.3) приводит к следующим выражениям для тензоров жесткости:

$$\begin{aligned}
 {}^4\mathbf{A}^* &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} (A_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} + D_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{d}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{d}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma}), \quad {}^4\mathbf{C}^* = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} C_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{k} \mathbf{k} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \\
 {}^3\mathbf{A}_{\beta}^{\gamma} &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} (A_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} + D_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{d}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{d}_{\alpha\beta}^{\gamma}), \quad {}^3\mathbf{C}_{\beta}^{\gamma} = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} C_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{k} \mathbf{k} \\
 \mathbf{A}_{\gamma}^{\beta} &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} (A_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} + D_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{d}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{d}_{\alpha\beta}^{\gamma}), \quad \mathbf{C}_{\beta}^{\gamma} = \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} C_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{k} \mathbf{k}
 \end{aligned} \tag{13.2}$$

В силу последней формулы (13.1) справедливо тождество

$$\mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} + \mathbf{d}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{d}_{\alpha\beta}^{\gamma} = (\mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma})^2 \mathbf{E} \tag{13.3}$$

где \mathbf{E} – двумерный единичный тензор. Тождество (13.3) позволяет исключить векторы $\mathbf{d}_{\alpha\beta}^{\gamma}$ из формул (13.2).

Отметим, что полученные формулы для тензоров жесткостей справедливы при любом числе атомов, входящих в элементарную ячейку.

Использование симметрии кристаллической решетки. Вычисление тензоров жесткости сильно упрощается при использовании пространственной симметрии. Шестиугольная решетка относительно каждого узла обладает симметрией третьего порядка (симметрией относительно поворота на угол $2\pi/3$), этим же свойством должны обладать промежуточные тензоры жесткости, связанные с узлами решетки. Для тензоров 1-го, 2-го и 4-го рангов это приводит к изотропии соответствующих тензоров. Для тензора 1-го ранга (вектора) это означает, что соответствующий тензор должен быть нулевым, для 2-го ранга – шаровым. Использование указанных соображений позволяет получить упрощенные формулы для тензоров жесткости (13.2)

$$\begin{aligned}
 {}^4\mathbf{A}^* &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \left[\left((A_{\alpha\beta}^{\gamma} - D_{\alpha\beta}^{\gamma}) \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} + \frac{1}{2} (D_{\alpha\beta}^{\gamma} (a_{\alpha\beta}^{\gamma})^4) \right) (\mathbf{iEi} + \mathbf{jEj}) \right] \\
 {}^4\mathbf{C}^* &= \frac{1}{4V_*} \left(\sum_{\alpha, \beta, \gamma} C_{\alpha\beta}^{\gamma} (a_{\alpha\beta}^{\gamma})^2 \right) (\mathbf{ikki} + \mathbf{jkkj}) \\
 {}^3\mathbf{A}_{\beta}^{\gamma} &= \frac{1}{2V_*} \sum_{\alpha} (A_{\alpha\beta}^{\gamma} - D_{\alpha\beta}^{\gamma}) \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma} \mathbf{a}_{\alpha\beta}^{\gamma}, \quad {}^3\mathbf{C}_{\beta}^{\gamma} = 0, \quad \mathbf{A}_{\beta}^{\gamma} = \frac{1}{4V_*} \left(\sum_{\alpha} (A_{\alpha\beta}^{\gamma} + D_{\alpha\beta}^{\gamma}) (a_{\alpha\beta}^{\gamma})^2 \right) \mathbf{E}
 \end{aligned} \tag{13.4}$$

где $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ – векторы, образующие ортонормированный базис. При выводе формул (13.4) использовано тождество $\mathbf{A} = (\text{tr}\mathbf{A}/2)\mathbf{E}$, выполняющееся для любого шарового тензора, а

также тождество (13.3). С учетом полученных формул соотношения упругости (12.5) представим в виде

$${}^4\mathbf{A} = {}^4\mathbf{A}^* - \frac{4}{\text{tr}\mathbf{A}_2} ({}^3\mathbf{A}_2^1) \cdot ({}^3\mathbf{A}_2^1)^T, \quad {}^4\mathbf{C} = {}^4\mathbf{C}^*$$

Определение компонент тензора жесткости. Результирующие тензоры жесткости ${}^4\mathbf{A}$, ${}^4\mathbf{A}^*$ для шестиугольной решетки должны обладать симметрией 6-го порядка, а это возможно только в случае их изотропии. Произвольный изотропный тензор 4-го ранга может быть представлен в виде линейной комбинации трех тензоров [16]

$$\mathbf{A} \stackrel{\text{def}}{=} A_1 \mathbf{J}_1 + A_2 \mathbf{J}_2 + A_3 \mathbf{J}_3; \quad \mathbf{J}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n, \quad \mathbf{J}_2 \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k, \quad \mathbf{J}_3 \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n$$

где \mathbf{e}_k – векторы некоторого ортонормированного базиса; в формуле (13.6) используется суммирование по повторяющемуся индексу. Коэффициенты A_k в двумерном случае могут быть вычислены по формулам

$$A_k = \frac{1}{8} \left(4A^k - \sum_{n=1}^3 A^n \right), \quad A^k \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{A} \odot \mathbf{J}_k$$

где символ \odot означает свертку тензоров: $\mathbf{A} \odot \mathbf{B} = A_{knpq} B_{qpnk}$. Иными словами, величины A^k представляют собой свертки тензора \mathbf{A} по соответствующим парам векторов; например

$$A^1 = \sum_{k,n=1}^3 A_{kknn} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{E}$$

Перейдем к вычислению тензора ${}^4\mathbf{A}$ (см. формулу (13.5)). Имеем

$${}^4\mathbf{A} = {}^4\mathbf{A}^* - \frac{4}{\text{tr}\mathbf{A}_2} {}^4\mathbf{Q}, \quad {}^4\mathbf{Q} \stackrel{\text{def}}{=} ({}^3\mathbf{A}_2^1) \cdot ({}^3\mathbf{A}_2^1)^T \quad (13.8)$$

Вычисление компонент разложения тензора ${}^4\mathbf{A}^*$ (13.4) дает

$$A_1^* = A_3^* = \frac{1}{16V_*} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} (A_{\alpha\beta}^\gamma - D_{\alpha\beta}^\gamma) (\mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma)^4, \quad A_2^* = \frac{1}{16V_*} \sum_{\alpha, \beta, \gamma} (A_{\alpha\beta}^\gamma + 3D_{\alpha\beta}^\gamma) (\mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma)^4 \quad (13.9)$$

Второе слагаемое в первой формуле (13.8) пропорционально тензору 4-го ранга, представляющего собой произведение двух тензоров 3-го ранга. Для тензоров 3-го ранга симметрия третьего порядка не приводит к изотропии, однако их произведение, являющееся тензором 4-го ранга, обязано быть изотропным, что позволяет для тензора ${}^4\mathbf{Q}$ использовать разложение (13.6), (13.7). Видно, что $\mathbf{E} \cdot {}^3\mathbf{A}_2^1 \equiv 0$ (произведение является вектором, который в силу симметрии третьего порядка должен быть нулевым), а следовательно, выполняется равенство

$$\mathbf{Q}^1 = \mathbf{E} \cdot {}^4\mathbf{Q} \cdot \mathbf{E} = (\mathbf{E} \cdot {}^3\mathbf{A}_2^1)^2 = 0 \quad (13.10)$$

Для вычисления остальных коэффициентов воспользуемся представлением (13.4) для тензора ${}^3\mathbf{A}_2^1$, что позволяет записать тензор ${}^4\mathbf{Q}$ в виде

$${}^4\mathbf{Q} = \frac{1}{4V_{* \mu, \nu}^2} \sum (A_\mu - D_\mu) (A_\nu - D_\nu) \mathbf{a}_\mu \mathbf{a}_\mu \mathbf{a}_\mu \cdot \mathbf{a}_\nu \mathbf{a}_\nu \mathbf{a}_\nu \quad (13.11)$$

где обозначено

$$A_\mu = A_{\mu^2}^1, \quad D_\mu = D_{\mu^2}^1, \quad \mathbf{a}_\mu = \mathbf{a}_{\mu^2}^1$$

Тогда, используя формулы (13.7) для компонент тензора ${}^4\mathbf{Q}$, получим

$$-Q_1 = Q_2 = Q_3 = \frac{1}{16V_{*\mu, \nu}^2} \sum (A_\mu - D_\mu)(A_\nu - D_\nu)(\mathbf{a}_\mu \cdot \mathbf{a}_\nu)^3 \quad (13.12)$$

Подставляя выражения (13.9), (13.12) в соотношения упругости (13.5), заключаем, что тензор жесткости силового взаимодействия ${}^4\mathbf{A}$ имеет вид

$$\mathbf{A} = A_1 \mathbf{J}_1 + A_2 \mathbf{J}_2 + A_3 \mathbf{J}_3 \quad (13.13)$$

Коэффициенты A_k определяются формулами

$$A_{1,3} = \frac{1}{16V_{*\alpha, \beta, \gamma}} \left[\sum (A_{\alpha\beta}^\gamma - D_{\alpha\beta}^\gamma)(\mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma)^4 \pm 8R \right]$$

$$A_2 = \frac{1}{16V_{*\alpha, \beta, \gamma}} \left[\sum (A_{\alpha\beta}^\gamma + 3D_{\alpha\beta}^\gamma)(\mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma)^4 - 8R \right] \quad (13.14)$$

$$R = \frac{\sum_{\mu, \nu} (A_\mu - D_\mu)(A_\nu - D_\nu)(\mathbf{a}_\mu \cdot \mathbf{a}_\nu)^3}{\sum_{\alpha} (A_\alpha + D_\alpha)(\mathbf{a}_\alpha)^2}$$

Тензоры \mathbf{J}_k в двумерном случае имеют вид

$$\mathbf{J}_1 = \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n = \mathbf{i}i\mathbf{i}i + \mathbf{j}j\mathbf{j}j + \mathbf{i}j\mathbf{j}i + \mathbf{j}i\mathbf{i}j = \mathbf{E}\mathbf{E}$$

$$\mathbf{J}_2 = \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k = \mathbf{i}i\mathbf{i}i + \mathbf{j}j\mathbf{j}j + \mathbf{i}j\mathbf{j}i + \mathbf{j}i\mathbf{i}j = \mathbf{i}\mathbf{E}\mathbf{i} + \mathbf{j}\mathbf{E}\mathbf{j} \quad (13.15)$$

$$\mathbf{J}_3 = \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k \mathbf{e}_n = \mathbf{i}i\mathbf{i}i + \mathbf{j}j\mathbf{j}j + \mathbf{i}j\mathbf{j}i + \mathbf{j}i\mathbf{i}j$$

что позволяет выразить проекции тензора ${}^4\mathbf{A}$ в ортонормированном базисе (коэффициенты жесткости упругой среды) через коэффициенты A_k следующим образом:

$$A_{1111} = A_{2222} = A_1 + A_2 + A_3, \quad A_{1122} = A_{2211} = A_1, \quad (13.16)$$

$$A_{1221} = A_{2112} = A_2, \quad A_{1212} = A_{2121} = A_3$$

Коэффициент объемного сжатия K , соответствующий тензору \mathbf{A} , в двумерном случае может быть определен по одной из следующих формул:

$$4K = \mathbf{E} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{E} = A^1 = 2(A_1 + A_2 + A_3) = A_{1111} + A_{2222} + A_{1122} + A_{2211} \quad (13.17)$$

что дает значение

$$K = \frac{1}{8V_{*\alpha, \beta, \gamma}} \sum A_{\alpha\beta}^\gamma (\mathbf{a}_{\alpha\beta}^\gamma)^4 \quad (13.18)$$

Как и следовало ожидать, коэффициент объемного сжатия зависит только от коэффициентов $A_{\alpha\beta}^\gamma$ (характеризующих продольную жесткость связи) и не зависит от коэффициентов $D_{\alpha\beta}^\gamma$ (характеризующих поперечную жесткость).

Взаимодействие ближайших соседей. Рассмотрим шестиугольную решетку с взаимодействием ближайших соседей. Тогда все ненулевые коэффициенты жесткости межатомных связей равны между собой, что позволяет обозначить

$$A_{\alpha\beta}^{\gamma} = A_{\alpha} = A, \quad D_{\alpha\beta}^{\gamma} = D_{\alpha} = D, \quad C_{\alpha\beta}^{\gamma} = C \quad (13.19)$$

Расстояние между ближайшими соседями обозначим a , тогда объем элементарной ячейки равен

$$V_* = \frac{3\sqrt{3}}{2}a^2 \quad (13.20)$$

Каждый атом имеет три ближайших соседа, а элементарная ячейка содержит два атома; следовательно, в формулах (13.14) суммы $\sum_{\alpha, \beta, \gamma}$ содержит по шесть слагаемых, а суммы

\sum_{α} – по три слагаемых. Тогда

$$\sum_{\mu, \nu} (\mathbf{a}_{\mu} \cdot \mathbf{a}_{\nu})^3 = \frac{9}{4}a^6 \quad (13.21)$$

Подстановка выражений (13.19)–(13.21) в формулы (13.14) дает

$$A_1 = \frac{\sqrt{3}}{6}a^2A\frac{A-D}{A+D}, \quad A_2 = \frac{\sqrt{3}}{6}a^2D\frac{3A+D}{A+D}, \quad A_3 = \frac{\sqrt{3}}{6}a^2D\frac{A-D}{A+D} \quad (13.22)$$

Коэффициент объемного сжатия, соответствующий тензору \mathbf{A} , равен

$$K = \frac{1}{2}(2A_1 + A_2 + A_3) = \frac{\sqrt{3}}{6}a^2A \quad (13.23)$$

Для моментного тензора жесткости ${}^4\mathbf{C}$ при взаимодействии ближайших соседей из соотношений (13.4), (13.5) получаем

$${}^4\mathbf{C} = \sqrt{3}C(\mathbf{ikki} + \mathbf{jkkj}) \quad (13.24)$$

В безмоментном случае ($D = 0$) формулы (13.22) принимают вид

$$A_1 = \frac{\sqrt{3}}{6}a^2A, \quad A_2 = A_3 = 0 \quad (13.25)$$

Таким образом, в безмоментном случае тензор жесткости шестиугольной решетки, в которой взаимодействуют только ближайшие соседи, имеет только шаровую часть:

$$\mathbf{A} = A_1\mathbf{EE} + K\mathbf{EE} \quad (13.26)$$

а следовательно, такая решетка не может сопротивляться сдвиговой нагрузке.

Переход к безмоментной теории упругости. В рамках безмоментной теории упругости тензоры напряжений и деформаций симметричны, что позволяет из соотношений упругости определить модуль A_1 и сумму модулей $A_2 + A_3$. Никакой физический эксперимент, обработка результатов которого проводится в рамках безмоментной теории упругости, не позволит найти по отдельности модули A_2 и A_3 . А так как подавляющее большинство экспериментов обрабатывается именно таким образом, то основной интерес представляют модули

$$A_1 = \frac{\sqrt{3}}{6}a^2A\frac{A-D}{A+D}, \quad A_2 + A_3 = 2\frac{\sqrt{3}}{3}a^2\frac{AD}{A+D} \quad (13.27)$$

Как известно, в безмоментной теории упругости может существовать только два независимых модуля упругости, в качестве которых могут быть выбраны модули (13.27). Если для рассматриваемого материала значения указанных модулей известны, то при известном межатомном расстоянии a формулы (13.27) позволяют определить микроскопические характеристики межатомных связей – коэффициенты A и D . Таким образом, безмоментные макроскопические характеристики материала позволяют определить не только чисто силовую характеристику межатомной связи A , но и коэффициент D , характеризующий поперечную жесткость межатомной связи и присутствующий только при наличии моментного взаимодействия на межатомном уровне.

Приведем формулы связи модулей (13.27) с коэффициентами жесткости упругой среды

$$A_{1111} = A_{2222} = A_1 + A_2 + A_3, \quad A_{1122} = A_{2211} = A_1 \quad (13.28)$$

модулем сдвига G , модулем Юнга E и коэффициентом Пуассона ν

$$G = A_{1212} = A_2 + A_3, \quad E = \frac{(A_1 + A_2 + A_3)^2 - A_1^2}{A_1 + A_2 + A_3}, \quad \nu = \frac{A_1}{A_1 + A_2 + A_3} \quad (13.29)$$

Из формул (13.27), (13.28) несложно получить формулы для коэффициентов межатомного взаимодействия

$$A = \frac{\sqrt{3}}{a^2}(A_{1111} + A_{1122}), \quad D = \frac{\sqrt{3}}{a^2} \frac{A_{1111} - A_{1122}}{A_{1111} + 3A_{1122}} \quad (13.30)$$

В качестве примера рассмотрим кристаллическую решетку графита. Для нее [17, 18]

$$A_{1111}/h = 1060 \text{ ГПа}, \quad A_{1122}/h = 180 \text{ ГПа}; \quad a = 0.142 \text{ нм}, \quad h = 0.34 \text{ нм} \quad (13.31)$$

где h – расстояние между графеновыми плоскостями в кристаллах графита. Напомним, что коэффициенты жесткости (13.29)–(13.31) соответствуют двумерной теории, т.е. измеряются в Н/м, в то время как экспериментально определенные значения жесткостей графита соответствуют трехмерной теории, а следовательно, измеряются в Па = Н/м². Расстояние h – коэффициент пропорциональности между двумерными и трехмерными модулями упругости (так как объем трехмерной элементарной ячейки кристалла графита равен произведению h на объем двумерной элементарной ячейки графенового слоя).

Из формул (13.28) получаем значения модулей упругости для графита

$$A_1 = 61.2 \text{ Н/м}, \quad A_2 + A_3 = 299 \text{ Н/м} \quad (13.32)$$

а из формул (13.30) следуют значения жесткостей межатомных связей в кристаллах графита

$$Aa^2 = 730 \text{ Н/м}, \quad Da^2 = 402 \text{ Н/м} \quad (13.33)$$

Отметим, что именно величины Aa^2 и Da^2 , а не коэффициенты A и D , имеют физический смысл и являются жесткостями межатомных связей. Согласно полученным значениям (13.33) отношение поперечной жесткости к продольной для связи атомов углерода в кристаллах графита равно

$$D/A = 0.55$$

Таким образом, поперечная жесткость ковалентной связи сравнима с продольной жесткостью и учет ее необходим для расчета ковалентных кристаллов.

14. Основные результаты и выводы. Предложена дискретная механическая модель сложной кристаллической решетки, атомы которой отождествляются с частицами общего вида, обладающими как поступательными, так и вращательными степенями свободы, и взаимодействующими между собой посредством сил и моментов. В рамках линейной теории характеристиками межатомных связей являются тензоры жесткости второго ранга, структура которых определяется геометрией решетки, а упругие модули должны находиться экспериментально.

С использованием длинноволнового приближения осуществлен переход к континуальной модели сложной кристаллической решетки. Уравнения, описывающие динамику континуальной модели, совпали с уравнениями макроскопической моментной теории упругости. Упругие свойства решетки характеризуются макроскопическими тензорами жесткости четвертого ранга. Получены выражения для макроскопических тензоров жесткости, зависящие от тензоров жесткости межатомных связей и векторов, определяющих геометрию решетки. Таким образом, если из каких-либо физических экспериментов найдены микроскопические характеристики межатомных связей, формулы (8.3), (8.5), (9.4), (9.6) позволяют определить все упругие модули моментной теории упругости.

Осуществлен переход к безмоментной теории упругости и на примере двухатомных кристаллических решеток показано, что макроскопические модули упругости безмоментной теории зависят как от силовых, так и от моментных характеристик межатомного взаимодействия. Эта зависимость позволяет определить микроскопические характеристики межатомных связей – коэффициенты A и D . Таким образом, модули упругости безмоментной макроскопической теории позволяют определить не только чисто силовую характеристику межатомной связи A , но и коэффициент D , характеризующий поперечную жесткость межатомной связи и присутствующий только при наличии моментного взаимодействия на межатомном уровне. В свою очередь, коэффициенты A и D позволяют определить параметры парных моментных потенциалов взаимодействия. Последние могут использоваться в качестве альтернативы многочастичных потенциалов в задачах компьютерного моделирования термомеханических процессов методами молекулярной динамики.

Вычислены жесткости межатомных связей в слое графита и показано, что поперечная жесткость межатомной связи составляет 55% от продольной. Данный результат показывает, что ковалентная связь является существенно нецентральной, что возможно только при наличии моментных взаимодействий на микроуровне.

Данная работа является развитием идей П.А. Жилина, которому авторы выражают искреннюю благодарность.

Работа выполнена при поддержке Федеральной целевой научно-технической программы (02.442.11.7398), гранта Президента РФ для молодых докторов наук (МД-4829.2007.1) и Российского фонда фундаментальных исследований (05-01-00094а).

ЛИТЕРАТУРА

1. Tersoff J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. p 12. P. 6991–7000.
2. Brenner D.W. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. № 15. P. 9458–9471.
3. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Фирсова А.Д. Описание кристаллической упаковки частиц с учетом моментных взаимодействий // Изв. РАН. МТТ. 2003. № 4. С. 110–127.
4. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Фирсова А.Д. Теоретическая механика. Описание механических свойств кристаллических твердых тел на микро- и макроуровне. СПб: Изд-во СПбГПУ. 2003. 32 с.

5. Аэро Э.Л., Кувшинский Е.В. Основные уравнения теории упругости сред с вращательным взаимодействием частиц // Физика твердого тела. 1960. Т. 2. № 7. С. 1399–1409.
6. Драгунов Т.Н., Павлов И.С., Потапов А.И. Ангармонические взаимодействия упругих и ориентационных волн в одномерных кристаллах // Физика твердого тела. 1997. Т. 39. № 1. С. 137–143.
7. Born M., Huang K. Dynamics Theory of Crystal Lattices. Oxford: Clarendon Press, 1954 = Борн М., Хуан Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. М., 1958. 488 с.
8. Кривцов А.М. К теории сред с микроструктурой // Тр. СПбГТУ. 1992. № 443. С. 9–17.
9. Krivtsov A.M. Constitutive equations of the nonlinear crystal lattice // ZAMM. 1999. V. 79. Suppl. 2. P. 419, 420.
10. Морозов Н.Ф., Паукито М.В. Дискретные и гибридные модели механики разрушения. СПб: Изд-во Санкт-Петербург. ун-та. 1995. 157 с.
11. Жилин П.А. Основные уравнения неклассической теории упругих оболочек. Тр. Ленингр. политехн. ин-та. 1982. Т. 386. С. 29–46.
12. Альтенбах Х., Жилин П.А. Общая теория упругих простых оболочек // Успехи механики. 1988. Т. 11. № 4. С. 107–148.
13. Жилин П.А., Сергеев А.Д., Товстик Т.П. Нелинейная теория стержней: статика, динамика, устойчивость // Тр. 24-й Всес. школы-семинара “Анализ и синтез нелинейных механических колебательных систем” 1996. СПб., 1997. С. 313–337.
14. Жилин П. А. Математическая теория неупругих сред // Успехи механики. 2003. Т. 2. № 4. С. 3–36.
15. Жилин П.А. Теоретическая механика. Фундаментальные законы механики. С.Пб: Изд-во СПбГПУ, 2003. 340 с.
16. Лурье А.И. Нелинейная теория упругости. М.: Наука, 1980. 512 с.
17. Городцов В.А., Лисовенко Д.С. Упругие свойства графитовых стержней и многослойных углеродных нанотрубок (кручение и растяжение) // Изв. РАН. МТТ. 2005. № 4. С. 42–56.
18. Гольдштейн Р.В., Ченцов А.В. Дискретно-континуальная модель нанотрубки // Изв. РАН. МТТ. 2005. № 4. С. 57–74.

Санкт-Петербург
e-mail: ivanova ei5@63.spb.edu
krivtsov nm.ru
morozov nm1016.apb.edu

Поступила в редакцию
16.I.2006