

**РОЛЬ МОМЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ И
АТОМНЫХ СИСТЕМАХ. ДИСКРЕТНАЯ И КОНТИНУАЛЬНО-
МОМЕНТНАЯ МОДЕЛИ ЛИНЕЙНОЙ АТОМНОЙ ЦЕПОЧКИ**

Саркисян С. О.

Рассматриваются взаимодействия между молекулярными системами, показывается, что хотя между их атомами взаимодействия только силовые и центральные, но между молекулами взаимодействия – и силовые и моментные. Аналогичная ситуация имеется и в атомных системах для наноматериалов (графен, однослойные нанотрубки и др.).

Изучив линейную атомную цепочку, когда между ее атомами существуют и силовые и моментные взаимодействия, построена континуальная-стержневая моментная модель. Показывается, что эта модель идентична с одномерной моделью моментной теории упругости с независимыми полями перемещений и вращений.

Ключевые слова: молекулярные и атомные системы, линейная цепочка атомов, моментное взаимодействие, стержневая модель, моментная теория упругости, одномерная модель.

1. Введение.

Известно, что многие наноструктуры (фуллерены, углеродные нанотрубки, графен и др.) являются идеальными кристаллами, поэтому актуально развитие математического аппарата и механических моделей для описания деформирования кристаллических твердых тел. Обычно взаимодействие на микроуровне описывается в рамках классической механики, что оказывается достаточным для изучения упругого деформирования большинства кристаллических твердых тел.

Методом молекулярной динамики рассчитывается траектория движения совокупности атомов и молекул, каждая из которых подчиняется классическим законам движения. Моделирование методом

молекулярной динамики состоит в численном решении системы классических уравнений Ньютона [1,2]:

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i, \quad \vec{F}_i = -\frac{\partial E}{\partial \vec{r}_i}, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (1)$$

где m_i – масса атома (или молекулы); \vec{r}_i – радиус вектор i -го атома относительно неподвижного центра O ; \vec{F}_i – сила действующая на данный атом со стороны остальных атомов; $E = E(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ – потенциальная энергия системы атомов, которая обычно задается на основе опытов; функция потенциальной энергии зависит от полного набора $3N$ – координат, N – число атомов в рассматриваемой системе. Из формул (1), силы \vec{F}_i , действующие на атом, вычисляются по заданной потенциальной энергии $E = E(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$.

Таким образом, в методе молекулярной динамики атомы (или молекулы) представляются материальными точками, связанными парным силовым взаимодействием (имеется ввиду третий закон Ньютона). В конкретных задачах N – достаточно большое число, система дифференциальных уравнений (1) с начальными условиями, решается численным методом.

Метод молекулярной динамики, т.е. когда в атомных или молекулярных системах между частицами взаимодействия силовые и центральные, широко применяется для моделирования и изучения многих таких систем.

Ниже убедимся, что для атомных систем применение силового и центрального взаимодействия между атомами если и оправдано, то для молекулярных систем необходимо проявить большую осторожность. Следует сказать, что речь идет не только о молекулярных системах.

При изучении наноматериалов, например, графена или однослойной нанотрубки, учет только силового центрального взаимодействия между их атомами приводит к тому, что слой атомов, формирующий графен или нанотрубку не имел бы изгибной жесткости, а стало быть, они были бы неустойчивыми. Это говорит о том, что при изучении наноматериалов, следует учесть, что между их атомами, кроме силовых, существуют также моментные взаимодействия [3,4].

В данной статье, в первой части ее, рассматривается молекулярная система и показывается, что в молекулярных системах учет моментного взаимодействия между молекулами просто необходим и каждую

молекулу в таких системах необходимо рассматривать не как материальную точку, а тело, которое кроме массы, обладает также моментами инерции. В этой связи отметим, что еще Пуассон сказал [5] о том, что молекулы кристалла могут представлять собой не точки, а малые твердые тела, которые двигаются не только поступательно, но и вращаются.

Кроме того, в статье рассматривается линейная атомная цепочка, когда между ее атомами, кроме силовых взаимодействий, действуют также моментные взаимодействия. Построена дискретно-моментная модель линейной атомной цепочки и предельным переходом построена континуально-моментная ее модель. А последняя представляет собой фактически упругую стержневую модель. Показывается, что построенная стержневая модель представляет собой одномерную модель моментной теории упругости с независимыми полями перемещений и вращений, при этом, определены упругие постоянные моментной теории. Отметим, что такую стержневую-моментную модель можно использовать при изучении наноматериалов, при построении их дискретно-континуальных моделей, т.е. моделей стержневой системы, заменяющих атомные взаимодействия в этих материалах.

2. Модель молекулярной системы.

Рассмотрим две молекулы A и B изображенные на рис. 1.

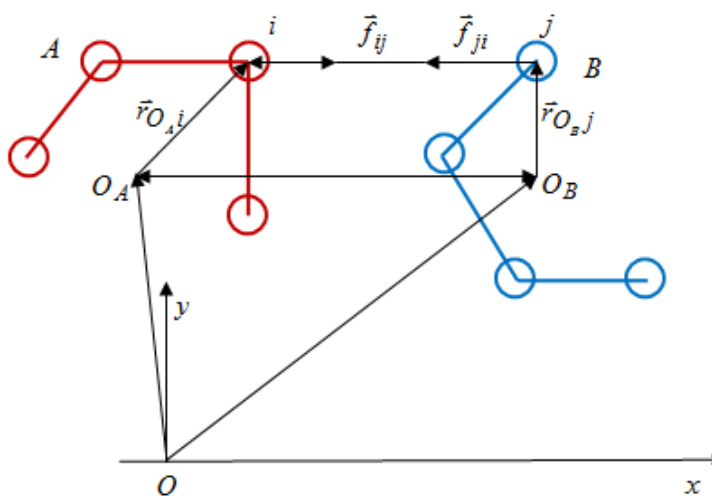


Рис. 1

Здесь O_A и O_B – центры масс молекул A и B соответственно, относительно неподвижного центра O ; $\vec{r}_{O_A i}$ – вектор, определяющий

положение атома i молекулы A относительно центра молекулы A (аналогично $\vec{r}_{O_B j}$). Будем считать, что между атомами молекул A и B взаимодействие силовое и центральное. Если взять атом под номером i в молекуле A и атом j в молекуле B , то эти атомы взаимодействуют между собой силами, направленными вдоль прямой соединяющие точки i и j (т.е. вдоль атом-атомного вектора \vec{r}_{ij}), в обратные стороны:

$$\vec{f}_{ij} = -\vec{f}_{ji}. \quad (2)$$

Итак, представим себе все силы, действующие на атомы молекулы A со стороны атомов молекулы B и, наоборот, все силы, действующие на атомы молекулы B со стороны атомов молекулы A .

В каждой молекуле действующие на их атомы силы перенесем в свои центры масс, получим главный вектор и главный момент этих сил. Через \vec{R}_{AB} и \vec{M}_{AB} – обозначим главный вектор и главный момент сил, которые приложены на атомы молекулы A со стороны атомов молекулы B и, наоборот, через \vec{R}_{BA} и \vec{M}_{BA} – главный вектор и главный момент сил, которые приложены на атомы молекулы B , со стороны атомов молекулы A .

Вычислим сначала главный вектор \vec{R}_{BA} , т.е. действующую силу на молекулу A со стороны молекулы B , а также, главный вектор \vec{R}_{AB} , т.е. действующую силу на молекулы B со стороны атомов молекулы A , находим:

$$\vec{R}_{AB} = \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} \vec{f}_{ij} = - \sum_{j \in B} \sum_{i \in A} \vec{f}_{ji} = -\vec{R}_{BA}, \text{ т.е. } \vec{R}_{AB} = -\vec{R}_{BA}. \quad (3)$$

Теперь вычислим главный момент \vec{M}_{AB} , т.е. момент, действующий на A со стороны B и, наоборот, главный момент \vec{M}_{BA} , т.е. момент, действующий со стороны A на B :

$$\vec{M}_{AB} = \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} \vec{r}_{O_{Ai}} \times \vec{f}_{ij}, \quad \vec{M}_{BA} = \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} \vec{r}_{O_{Bj}} \times \vec{f}_{ji}. \quad (4)$$

Имея ввиду, что

$$\vec{OO}_A + \vec{r}_{O_{Ai}} = \vec{OO}_B + \vec{r}_{O_{Bj}} + \vec{r}_{ji},$$

определим $\vec{r}_{O_{Bj}}$ и, подставив во вторую из формул (4), получим:

$$\begin{aligned}\vec{M}_{BA} &= \sum_{j \in Bi \in A} \sum (\vec{OO}_A + \vec{r}_{O_{Ai}} - \vec{OO}_B - \vec{r}_{ji}) \times \vec{f}_{ji} = \\ &= (\vec{OO}_A - \vec{OO}_B) \times \sum_{j \in Bi \in A} \vec{f}_{ji} + \sum_{j \in Bi \in A} \sum \vec{r}_{O_{Ai}} \times \vec{f}_{ji}.\end{aligned}$$

Здесь учтен тот факт, что векторное произведение между \vec{r}_{ji} и \vec{f}_{ji} равен нулю, т.к. они коллинеарные векторы.

Имея ввиду, что

$$\vec{OO}_A - \vec{OO}_B = \vec{O}_B \vec{O}_A,$$

из предыдущего векторного равенства получим

$$\vec{M}_{BA} = \vec{O}_B \vec{O}_A \times \vec{R}_{BA} - \vec{M}_{AB}. \quad (5)$$

Из полученного векторного равенства (5) следует, что

$$\vec{M}_{BA} \neq \vec{M}_{AB}, \quad (6)$$

И имеет место следующее векторное равенство:

$$\vec{M}_{AB} + \vec{M}_{BA} + \vec{O}_A \vec{O}_B \times \vec{R}_{BA} = 0, \quad (7)$$

которое представляет собой закон сохранения локального углового момента.

Итак, объединяя (3) и (6), можем утверждать, что

$$\vec{R}_{AB} = -\vec{R}_{BA}, \quad \vec{M}_{AB} \neq -\vec{M}_{BA}. \quad (8)$$

Это означает, что необходимо вычислять внутримолекулярные моменты вращения, а в систему уравнений движения или равновесия обязательно включить классические уравнения вращательного движения. Итак, при изучении взаимодействия молекул, молекулы A и B необходимо рассматривать не как материальные точки, а как тело-точки [6]. Обобщая вышесказанное в [7], можем отметить, что при изучении деформационных задач с молекулами, необходимо использовать не механику Ньютона, а механику Эйлера.

3. Колебания линейной цепочки атомов (дискретная постановка задачи [8]).

Рассмотрим цепочку одинаковых атомов на одинаковых расстояниях друг от друга (a). Пусть на этой прямой расположена ось x . Будем учитывать взаимодействие каждого атома только с его ближайшими соседями. Действующие силы и моменты на атом с номером k от соседних атомов с номерами $k-1$ и $k+1$ отметим следующим образом. Так как указанные силы имеют нецентральный характер, составляющие по оси x отметим буквой N , составляющие по оси y отметим буквой Q ,

моменты-буквой L . Движение цепочки происходит в плоскости xu (по оси x – продольная деформация, по оси y – изгибная деформация, которая осуществляется по схеме- “сдвиг плюс поворот”).

Уравнения движения атома с номером k , как тела-точки, будут выражаться так:

$$N^{(k+1)} - N^{(k)} = m \frac{\partial^2 u_1^{(k)}}{\partial t^2}, \quad (9)$$

$$Q^{(k+1)} - Q^{(k)} = m \frac{\partial^2 u_2^{(k)}}{\partial t^2}, \quad (10)$$

$$L_3^{(k+1)} - L_3^{(k)} + Q^{(k)} \frac{1}{2} a + Q^{(k+1)} \frac{1}{2} a = I_3 \frac{\partial^2 \omega_3^{(k)}}{\partial t^2}.$$

Здесь m и I_3 – масса и собственный момент инерции каждого атома (которая принимается в виде шара, с некоторым радиусом R); $N^{(k)}$ – продольная сила, $Q^{(k)}$ – перерезывающая сила, $L_3^{(k)}$ – изгибающий момент, $(u_1^{(k)}, u_2^{(k)})$ – компоненты вектора перемещения атома с номером k , а $\omega_3^{(k)}$ – свободный поворот k -го атома вокруг собственной оси z .

Будем считать, что упругие силы и моменты линейно зависят от перемещений и поворотов. Это означает, что потенциальную энергию цепочки можем взять в виде:

$$V = \frac{1}{2} \sum_k C_1 (d_1^{(k)})^2 + \frac{1}{2} \sum_k C_2 (d_2^{(k)})^2 + \frac{1}{2} \sum_k C_3 (\theta^{(k)})^2, \quad (11)$$

где C_i , $i = 1, 2, 3$ – упругие постоянные для соответствующих деформаций (продольных или изгибных), $d_1^{(k)}$ – продольные относительные перемещения, $d_2^{(k)}$ – перемещения связанные со сдвиговой деформацией, $\theta^{(k)}$ – относительные свободные угловые перемещения:

$$d_1^{(k)} = u_1^{(k+1)} - u_1^{(k)}, \quad d_2^{(k)} = u_2^{(k+1)} - u_2^{(k)} - \frac{1}{2} a (\omega_3^{(k+1)} + \omega_3^{(k)}), \quad (12)$$

$$\theta^{(k)} = \omega_3^{(k+1)} - \omega_3^{(k)}.$$

Принимая (11) как потенциал внутренних сил и моментов, потребовав равенства

$$N^{(k+1)} - N^{(k)} = -\frac{\partial V}{\partial u_1^{(k)}}, \quad Q^{(k+1)} - Q^{(k)} = -\frac{\partial V}{\partial u_2^{(k)}}, \quad (13)$$

$$L_3^{(k+1)} - L_3^{(k)} = -\frac{\partial V}{\partial \omega_3^{(k)}}.$$

можем написать закон упругости для атомной цепочки:

$$N^{(k)} = C_1(u_1^{(k)} - u_1^{(k-1)}), \quad (14)$$

$$Q^{(k)} = C_2\left[u_2^{(k)} - u_2^{(k-1)} - \frac{1}{2}a(\omega_3^{(k)} + \omega_3^{(k-1)})\right], \quad (15)$$

$$L_3^{(k)} = C_3(\omega_3^{(k)} - \omega_3^{(k-1)})$$

Таким образом, для рассматриваемой цепочки атомов построена дискретная модель (в случае продольных колебаний- это уравнение движения (9) и закон упругости (14); в случае изгибных колебаний (которые подчиняются принципу “сдвиг плюс поворот”)-уравнения движения (10) и закон упругости (15).

Кинетическая энергия движения линейной цепочки атомов будет выражаться формулой:

$$K = \frac{1}{2} \sum_k \left[m \left(\frac{du_1^{(k)}}{dt} \right)^2 + m \left(\frac{du_2^{(k)}}{dt} \right)^2 + I_3 \left(\frac{d\omega_3^{(k)}}{dt} \right)^2 \right]. \quad (16)$$

Имея ввиду формулу (11) для потенциальной энергии деформации и (16) для кинетической энергии движения атомной цепочки, можем составить ее лангранжеан:

$$L = K - V.$$

$$L = K - V = \frac{1}{2} \sum_k \left\langle \left[m \left(\frac{du_1^{(k)}}{dt} \right)^2 + m \left(\frac{du_2^{(k)}}{dt} \right)^2 + I_3 \left(\frac{d\omega_3^{(k)}}{dt} \right)^2 \right] - \right. \\ \left. - \left\{ C_1 \left(u_1^{(k+1)} - u_1^{(k)} \right)^2 + C_2 \left[\left(u_2^{(k+1)} - u_2^{(k)} \right) - \frac{1}{2} a \left(\omega_3^{(k+1)} + \omega_3^{(k)} \right) \right]^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + C_3 \left(\omega_3^{(k+1)} - \omega_3^{(k)} \right)^2 \right\} \right\rangle. \quad (17)$$

Если рассматривать вариационное уравнение Гамильтона

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} (K - V) dt = 0, \quad (18)$$

для функционала (17), то из этого вариационного уравнения будут следовать уравнения движения атомов цепочки (9), (10).

4. Стержневая (одномерная) континуальная модель линейной цепочки атомов. Принцип Гамильтона для континуальной (стержневой) модели.

Для построения континуальной модели линейной цепочки атомов, представим лагранжиан дискретной ее модели (17), в следующем виде:

$$L = \frac{1}{2} \sum_k a \left\langle \left[\frac{m}{a} \left(\frac{du_1^{(k)}}{dt} \right)^2 + \frac{m}{a} \left(\frac{du_2^{(k)}}{dt} \right)^2 + \frac{I_3}{a} \left(\frac{d\omega_3^{(k)}}{dt} \right)^2 \right] - \left\{ C_1 a \left(\frac{u_1^{(k+1)} - u_1^{(k)}}{a} \right)^2 + C_2 a \left[\frac{u_2^{(k+1)} - u_2^{(k)}}{a} - \frac{1}{2} (\omega_3^{(k+1)} + \omega_3^{(k)}) \right]^2 \right\} \right\rangle. \quad (19)$$

Специальная форма, в которой записан лагранжиан дискретной модели выбран для удобства предельного перехода к случаю континуальной (непрерывной) модели, т.е. когда $a \rightarrow 0$ [9].

Что касается множителя a , который стоит перед большими скобками под суммой в формуле (19), то его следует заменить на $\Delta x = dx$, а суммирование по k заменить интегралом по x . Далее индекс k , характеризующий номер атома, должен при переходе к континуальной модели превратиться в непрерывную координату x . Поэтому вместо переменных $u_i^{(k)}(t)$, $\omega_3^{(k)}(t)$ ($i=1,2$) будем теперь иметь переменные $u_i(x,t)$, $\omega_3(x,t)$ ($i=1,2$). Поступая указанным выше образом в результате предельного перехода, при $a \rightarrow 0$ (при этом $C_i \cdot a = \tilde{C}_i$, $i=1,2,3$, ведут себя как построенные), формула (17) переходит в лагранжиан континуальной модели, для которого будем иметь:

$$L = \frac{1}{2} \int_0^\ell \left\{ \left[\tilde{\rho} \left(\frac{\partial u_1}{\partial t} \right)^2 + \tilde{\rho} \left(\frac{\partial u_2}{\partial t} \right)^2 + \tilde{I} \left(\frac{\partial \omega_3}{\partial t} \right)^2 \right] - \left(\tilde{C}_1 \varepsilon_{\xi\xi}^2 + \tilde{C}_2 \gamma_{\xi\eta}^2 + \tilde{C}_3 \chi_{\xi\eta}^2 \right) \right\} d\xi. \quad (20)$$

Здесь

$$\varepsilon_{\xi\xi} = \frac{\partial u}{\partial \xi} = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{u_1^{(k)} - u_1^{(k-1)}}{a}, \quad (21)$$

$$\gamma_{\xi\eta} = \frac{\partial u_2}{\partial \xi} - \omega_3 = \lim_{a \rightarrow 0} \left[\frac{u_2^{(k)} - u_2^{(k-1)}}{a} - \frac{1}{2} (\omega_3^{(k)} + \omega_3^{(k-1)}) \right],$$

$$\chi_{\xi\eta} = \frac{\partial \omega_3}{\partial \xi} = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{\omega_3^{(k)} - \omega_3^{(k-1)}}{a}, \quad (22)$$

$$\tilde{\rho} = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{m}{a}, \quad \tilde{I} = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{I}{a},$$

где $\tilde{\rho}$ - линейная плотность массы цепочки, \tilde{I} - линейная плотность её осевого момента инерции; $\varepsilon_{\xi\xi}$ - относительная продольная деформация; $\gamma_{\xi\eta}$ - сдвиговая деформация в плоскости $\xi\eta$; $\chi_{\xi\eta}$ - кривизна оси цепочки в плоскости $\xi\eta$.

Следует сказать, что формула (20) представляет собой лагранжиан континуальной модели (стержневой модели) линейной атомной цепочки и, на основе принципа Гамильтона (18), когда лагранжиан имеет вид (20), будут следовать уравнения движения этой стержневой-моментной модели, а также естественные граничные условия:

Уравнения движения

$$\frac{\partial N}{\partial \xi} = \tilde{\rho} \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2}, \quad (23)$$

$$\frac{\partial Q_2}{\partial \xi} = \tilde{\rho} \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2}, \quad \frac{\partial L_3}{\partial \xi} + Q_2 = \tilde{I} \frac{\partial^2 \omega_3}{\partial t^2}. \quad (24)$$

Здесь, уравнение (23)-это уравнение продольного колебания; уравнения (24)-уравнения изгибных колебаний (которые происходят по схеме “сдвиг плюс свободный поворот” [10]) в плоскости $\xi\eta$.

Предельным переходом от уравнений закона упругости (14), (15) дискретной модели (предварительно обе части этих уравнений разделяя на a) получим соотношения упругости для стержневой модели:

$$N = \tilde{c}_1 \varepsilon_{\xi\xi}, \quad (25)$$

$$Q_2 = \tilde{c}_2 \gamma_{\xi\eta}, \quad L_3 = \tilde{c}_3 \chi_{\xi\eta}, \quad (26)$$

$$\varepsilon_{\xi\xi} = \frac{\partial u_1}{\partial \xi}, \quad (27)$$

$$\gamma_{\xi\eta} = \frac{\partial u_2}{\partial \xi} - \omega_3, \quad \chi_{\xi\eta} = \frac{\partial \omega_3}{\partial \xi}. \quad (28)$$

Как отметили выше, из вариационного уравнения Гамильтона следуют также граничные условия (для системы уравнений (23)-(28)):

$$u_1 = 0, \quad (29)$$

$$u_2 = 0, \quad \omega_3 = 0, \quad (30)$$

когда край стержня жестко зашпемлен или

$$N = 0, \quad (31)$$

$$Q_2 = 0, \quad L_3 = 0, \quad (32)$$

когда край стержня-свободен.

Могут иметь место также граничные условия смешанного типа (например, шарнирное опирание).

Ниже убедимся, что стержневая-моментная модель (континуальная модель линейной атомной цепочки) (23)-(32) из себя представляет одномерную модель моментной теории упругости с независимыми полями перемещений и вращений.

5. Одномерная (стержневая) модель моментной теории упругости с независимыми полями перемещений и вращений.

Рассмотрим призматическое тело с размерами $a \times 2h \times b$. Срединную плоскость (xy) этого тела будем считать плоскостью, которая разделяет тело на две симметричные части. Будем считать, что размер b настолько мал, что в теле возникает плоское напряженное состояние. Поэтому будем рассматривать двумерные уравнения моментной теории упругости с независимыми полями перемещений и вращений, которые должны будут удовлетворены в плоскости xy [11] в прямоугольной области: $0 \leq x \leq a, -h \leq y \leq h$:

Уравнения движения

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{21}}{\partial y} &= \rho \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2}, \\ \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial y} &= \rho \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2}, \end{aligned} \quad (33)$$

$$\frac{\partial \mu_{13}}{\partial x} + \frac{\partial \mu_{23}}{\partial y} + \sigma_{12} - \sigma_{21} = I \frac{\partial^2 \omega_3}{\partial t^2};$$

Соотношения упругости

$$\gamma_{11} = \frac{1}{E}(\sigma_{11} - \nu \sigma_{22}), \quad \gamma_{22} = \frac{1}{E}(\sigma_{22} - \nu \sigma_{11}),$$

$$\begin{aligned} \gamma_{12} &= \frac{\mu + \alpha}{4\mu\alpha} \sigma_{12} - \frac{\mu - \alpha}{4\mu\alpha} \sigma_{21}, & \gamma_{21} &= \frac{\mu + \alpha}{4\mu\alpha} \sigma_{21} - \frac{\mu - \alpha}{4\mu\alpha} \sigma_{12}, \\ \chi_{13} &= \frac{1}{B} \mu_{13}, & \chi_{23} &= \frac{1}{B} \mu_{23}. \end{aligned} \quad (34)$$

Геометрические соотношения

$$\begin{aligned} \gamma_{11} &= \frac{\partial u_1}{\partial x}, & \gamma_{22} &= \frac{\partial u_2}{\partial y}, \\ \gamma_{12} &= \frac{\partial u_2}{\partial x} - \omega_3, & \gamma_{21} &= \frac{\partial u_1}{\partial y} + \omega_3, \\ \chi_{13} &= \frac{\partial \omega_3}{\partial x}, & \chi_{23} &= \frac{\partial \omega_3}{\partial y}. \end{aligned} \quad (35)$$

Здесь, u_1, u_2 – перемещения; ω_3 – свободный поворот; $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{12}, \sigma_{21}$ – напряжения; μ_{13}, μ_{23} – моментные напряжения; $\gamma_{11}, \gamma_{22}, \gamma_{12}, \gamma_{21}$ – деформации; χ_{13}, χ_{23} – изгибы-кручения; ρ – плотность, I – мера инерции при вращении; $E, \mu = \frac{E}{2(1+\nu)}, \nu, \alpha, B$ – упругие постоянные моментной теории упругости.

К системе уравнений (33)-(35) следует присоединить граничные условия и начальные условия.

На сторонах прямоугольника $y = \pm h$ считаются заданными силовые и моментные граничные условия:

$$\sigma_{21} = \pm q_1^\pm, \quad \sigma_{22} = \pm q_2^\pm, \quad \mu_{23} = \pm m^\pm. \quad (36)$$

На боковых кромках прямоугольника $x = 0$ и $x = a$ примем следующие варианты граничных условий моментной теории упругости

$$\sigma_{11} = 0, \quad \sigma_{12} = 0, \quad \mu_{13} = 0 \quad (37)$$

или

$$u_1 = 0, \quad u_2 = 0, \quad \omega_3 = 0. \quad (38)$$

При $t = 0$ начальными условиями задаются значения $u_1, u_2, \omega_3, \frac{\partial u_1}{\partial t}, \frac{\partial u_2}{\partial t}, \frac{\partial \omega_3}{\partial t}$.

Отметим, что начально-граничная задача (33)-(38) представляет собой сумму двух задач-симметричной по y и антисимметричной по y задач в прямоугольной области.

Будем считать, что прямоугольник тонкий, т.е. $2h \ll a$. В этом случае, для решения указанной начально-граничной задачи можем

применять либо асимптотический метод [12], либо метод гипотез (оригинален такой метод гипотез, который имеет асимптотическое обоснование).

В случае симметрической по y задачи примем

$$u_1(x, y, t) = u(x, t), \quad u_2(x, y, t) = y u_2^1(x, t), \quad \omega_3(x, y, t) = y \omega_3^1(x, t). \quad (39)$$

На основе кинематических гипотез (39), начально-граничная задача (33)-(38) приводится к решению следующей одномерной задачи растяжения-сжатия тонкого стержня:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N}{\partial x} &= -\tilde{q}_1 + 2\rho h \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \\ N &= 2Eh\Gamma_{11}, \\ \Gamma_{11} &= \frac{\partial u}{\partial x}, \quad u = u(x, t). \end{aligned} \quad (40)$$

К этой системе основных уравнений следует присоединить граничные и начальные условия.

В случае антисимметричной по y задаче имеем

$$u_2(x, y, t) = w(x, t), \quad u_1(x, y, t) = y u_1^1(x, t), \quad \omega_3(x, y, t) = \Omega_3(x, t). \quad (41)$$

На основе кинематических гипотез (41), начально-граничная задача (33)-(38) приводится к решению следующей одномерной задачи изгиба тонкого стержня:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q_{12}}{\partial x} &= -q_2 + 2\rho h \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}, \\ \frac{\partial L_{13}}{\partial x} + Q_{12} &= -m_3 + 2Ih \frac{\partial^2 \Omega_3}{\partial t^2}, \\ Q_{12} &= 2h \frac{4\mu\alpha}{\mu + \alpha} \Gamma_{12}, \quad L_{13} = 2Bhk_{13}, \\ \Gamma_{12} &= \frac{\partial w}{\partial x} - \Omega_3, \quad k_{13} = \frac{\partial \Omega_3}{\partial x}. \end{aligned} \quad (42)$$

К этой системе основных уравнений следует присоединить граничные и начальные условия.

Если сравнить уравнения (23), (25), (27) с уравнениями (40), а также (24), (26), (28) с уравнениями (42) (при этом будем отождествлять ξ и x , η и y), легко можно убедиться, что указанные системы уравнений вполне идентичны. Континуальная модель изгибной деформации линейной

атомной цепочки представляет собой одномерно-стержневую модель моментной теории упругости с независимыми полями перемещений и вращений. Построенные континуально-моментные (стержневые) модели можем использовать:

- 1) при моделировании наностержней,
- 2) для построения дискретно-континуальных моделей таких наноматериалов, как графен [13], углеродные нанотрубки, фуллерены и др.

ՄՈԼԵԿՈՒԼՅԱՐ ԵՎ ԱՏՈՄԱՅԻՆ ՀԱՄԱԿԱՐԳԵՐՈՒՄ ՄՈՄԵՆՏԱՅԻՆ ՓՈՒԱԶԴԵՑՈՒԹՅԱՆ ԴԵՐԸ: ԱՏՈՄԱՅԻՆ ԳԾԱՅԻՆ ՇՂԹԱՅԻ ԴԻՄԿՐԵՏ ԵՎ ԿՈՆՏԻՆՈՒԱԼ ՄՈՄԵՆՏԱՅԻՆ ՄՈԴԵԼԼԵՐԸ

Սարգսյան Ս. Հ.

Դիտարկվում են մոլեկուլյար համակարգերի միջև փոխազդեցությունները, ցույց են տրվում, որ չնայած նրանց ատոմների միջև փոխազդեցությունները միայն ուժային են և կենտրոնական, այնուամենայնիվ, մոլեկուլների միջև փոխազդեցությունները և՛ ուժային են, և՛ մոմենտային: Անալոգ իրադրությունն ունենք նաև նանոկյութերի (գրաֆեն, միաշերտ նանոխողովակ և այլն) ատոմային համակարգերում:

Ուսումնասիրելով ատոմային գծային շղթան, երբ նրա ատոմների միջև գոյություն ունեն և՛ ուժային, և՛ մոմենտային փոխազդեցություններ, կառուցվում է կոնտինուալ-ձողային մոմենտային մոդել, ցույց է տրվում, որ այդ մոդելը նույնական է տեղափոխությունների և պտույտների անկախ դաշտերով մոմենտային առաձգականության տեսության միաչափ մոդելի հետ:

Բանալի բառեր. մոլեկուլյար և ատոմային համակարգեր, ատոմային գծային շղթա, մոմենտային փոխազդեցություն, ձողային մոդել, մոմենտային առաձգականության տեսություն, միաչափ մոդել:

THE ROLE OF MOMENT INTERACTION IN MOLECULAR AND ATOMIC SYSTEMS. DISCRETE AND CONTINUAL-MOMENT MODELS OF THE ATOMIC LINEAR CHAIN

Sargsyan S. H.

In the paper the interactions between molecular systems are considered, it is shown that although the interactions between their atoms are only force and central, the interactions between molecules are both force and moment. A

similar situation takes place in atomic systems for nanomaterials (graphene, single-walled nanotubes, etc.).

Studying a linear atomic chain, when both force and moment interactions exist between its atoms, a continual-beam moment model is constructed. It is shown that this model is identical with the one-dimensional model of the moment theory of elasticity with independent fields of displacement and rotation.

Keywords: molecular and atomic systems, linear chain of atoms, moment interaction, beam model, moment theory of elasticity, one-dimensional model.

ЛИТЕРАТУРА

1. Allen M. P. Tildesley D. J. Computer Simulation of Liquids. Oxford: Clarendon Press. 1987. 385 p.
2. Галимзянов Б. Н., Мокшин А. В. Основы моделирования молекулярной динамики. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований. 2018. 106 с.
3. Иванова Е. А., Кривцов А. М., Морозов Н. Ф., Фирсова А. Д. Учет моментного взаимодействия при расчете изгибной жесткости наноструктур//Доклады АН России. 2003. Т. 391. № 6. С. 764-768.
4. Кривцов А. М. Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов. СПб.: Изд-во Политехнического университета. 2009. 127с.
5. Ляв А. Е. Математическая теория упругости. М.: ОНТИ. 1935. 674 с.
6. Жилин П. А. Теоретическая механика. Фундаментальные законы механики. СПб.: Изд-во СПб.: Изд-во Политехнического университета. 2003. 340с.
7. Ерофеев В. И. Братья Коссера и механика обобщенных континуумов//Вычислительная механика сплошных сред. 2009. Т. 2. №.4. С. 5-10.
8. Sargsyan S. H. Structural and Micropolar Beam Models of Nanocrystalline Materials (One-Dimensional Case)//Advanced Structured Materials. Springer . Vol. 122. 2020. P. 399-411.
9. Голдстейн Г. Классическая механика. М.: Изд-во "Наука". 1975. 416 с.
10. Панин В. Е. Основы физической мезомеханики //Физическая мезомеханика. 1998. Т. 1. № 1. С. 5-22.

11. Nowacki W. Theory of Asymmetric Elasticity. Oxford: Pergamon. 1986. 383 p.
12. Саркисян С. О. Прикладные одномерные теории балок на основе несимметричной теории упругости// Физическая мезомеханика. 2008. Т. 11. № 5. С. 41-54.
13. Sargsyan S. H. Discrete-Continuons and Continuous-Moment Models of Grapheme under in Plane Deformation//Phys. Mesomech. 2020. Vol. 23. № 4. P. 309-315.

Сведения об авторе

Саркисян С. О. - член-корр. НАН Армении, доктор физ.-мат. наук, профессор

Ширакский государственный университет

Эл. почта: s_sargsyan@yahoo.com

Поступила в редакцию 07.09.2020

Прошла рецензию 21.10.2020