

УДК 539.3

*ТОМАШЕВСКИЙ Игорь Львович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического анализа, алгебры и геометрии института математики, информационных и космических технологий Северного (Арктического) федерального университета им. М.В. Ломоносова. Автор 30 научных работ, в т. ч. 7 учебно-методических пособий*

## **О РАВНОВЕСНЫХ КОНФИГУРАЦИЯХ СПЛОШНЫХ СРЕД С НЕЛОКАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ**

Рассматривается модель бесконечной сплошной среды, взаимодействие между пространственно удаленными элементами которой характеризуется потенциальной энергией, пропорциональной массам элементов и потенциалу взаимодействия, зависящего от расстояния между элементами. Исследуются равновесные состояния такой среды с плотностью вещества, положительной всюду, за исключением, может быть, множества точек нулевой меры. Показывается, что геометрия рассматриваемых равновесных состояний определяется только корнями преобразования Фурье  $\tilde{\Phi}(p)$  потенциала взаимодействия и не все равновесные состояния с непрерывным распределением вещества являются устойчивыми, т. е. обладают минимальной потенциальной энергией по отношению к любым локальным перераспределениям вещества. Их устойчивость зависит от наличия и положения точек минимума преобразования Фурье  $\tilde{\Phi}(p)$ .

Выполнен анализ состояний равновесия в случае, когда преобразование Фурье  $\tilde{\Phi}(p)$  имеет единственную точку локального минимума  $p_0$  положительно всюду, за исключением, может быть, окрестности точки  $p_0$ . Рассмотрены три возможных случая. В первом ( $\tilde{\Phi}(p_0) < 0$ ) состояния равновесия с непрерывной почти всюду плотностью вещества является неустойчивыми. Во втором случае ( $\tilde{\Phi}(p_0) > 0$ ) среда имеет единственное состояние равновесия, причем оно устойчиво и однородно. В третьем ( $\tilde{\Phi}(p_0) = 0$ ) существует бесконечное множество различных состояний равновесия, все они устойчивы и имеют пространственно периодическую плотность вещества и одинаковую энергию. Среди этих состояний имеются однородные состояния с постоянной плотностью, а также состояния с 1D-периодическим (слоистым) и 2D-периодическим (цилиндрическим) распределением вещества. Необычная способность сплошных сред с нелокальным взаимодействием к образованию периодических кристаллоподобных конфигураций вещества может быть использована для моделирования пространственных конфигураций и физико-механических свойств реальных многоатомных кристаллических объектов.

**Ключевые слова:** *сплошная среда, нелокальное взаимодействие, периодические функции.*

**Введение.** В последние десятилетия появились физическо-математические модели материальных сред, которые в той или иной мере сочетают в себе феноменологию сплошной среды с возможностью учета микроструктуры среды и нелокального характера взаимодействия ее элементов [1–4]. Относительная простота математического аппарата теории сплошных сред делает такие модели удобными для расчета физико-механических свойств различных материалов, особенно в связи с открывающимися перспективами синтеза материалов с заданными свойствами и возможностями управления микроструктурой материала даже на уровне отдельных молекул и атомов [5–7].

Область применения таких моделей, однако, существенно сужена, во-первых, областью применимости самого приближения сплошной среды, а во-вторых, ограничениями на допустимую величину отклонений параметров среды от постоянных равновесных значений, связанными с линейным характером используемых в них приближенных уравнений движения. Последнее обстоятельство не позволяет использовать эти модели для расчета равновесных конфигураций материальных объектов на масштабах, для которых приближение сплошной среды является допустимым, но в то же время существенна значительная неоднородность в распределении вещества (средами, имеющими такой масштаб, возможно, являются некоторые многоатомные молекулярные кристаллы [5] и жидкие кристаллы [8, 9]). Эту трудность можно обойти, если ограничиться рассмотрением только равновесных состояний сплошной среды и вместо уравнений ее движения для поиска равновесных конфигураций применять точные нелинейные условия равновесия среды. Такой подход используется ниже для поиска равновесных конфигураций непрерывной сплошной среды с нелокальным взаимодействием, определяемым потенциальной энергией

$$dU = \varphi(r) dm dm', \quad (1)$$

зависящей от масс (или других количественных характеристик)  $dm, dm'$  элементов, рас-

стояния  $r$  между ними и потенциала взаимодействия  $\varphi(r)$ .

Показано, что конфигурации равновесных состояний в среде с таким взаимодействием определяются только корнями преобразования Фурье

$$\tilde{\varphi}(p) = (2\pi)^{-3/2} \int_{R_3} \varphi(r) \exp(i\vec{p}\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (2)$$

потенциала  $\varphi(r)$ , а их устойчивость зависит только от наличия и положения точек максимума и минимума этого преобразования. Найден также класс потенциалов, обеспечивающих существование устойчивых квазикристаллических конфигураций вещества среды.

**Состояния равновесия сплошной среды.** В состоянии равновесия суммарная сила, действующая на любой элемент  $dm$  среды со стороны остальных ее элементов, должна быть равна нулю, т. е. должно выполняться условие

$$-dm \int_{R_3} \vec{\nabla} \varphi(|\vec{r} - \vec{r}'|) dm' = 0 \quad \forall \vec{r} \in R_3.$$

Если обозначить через  $\mu(\vec{r})$  плотность среды в точке  $\vec{r}$ , то это условие можно переписать в виде

$$\mu(\vec{r}) \int_{R_3} \vec{\nabla} \varphi(|\vec{r} - \vec{r}'|) \mu(\vec{r}') d^3\vec{r}' = 0 \quad \forall \vec{r} \in R_3.$$

Оно упрощается, если  $\mu(\vec{r}) > 0$  во всех точках, за исключением, может быть, множества точек нулевой меры (такое распределение среды будем называть непрерывным). В этом случае для равновесной плотности  $\mu(\vec{r})$  получаем следующее уравнение:

$$\int_{R_3} \vec{\nabla} \varphi(|\vec{r} - \vec{r}'|) \mu(\vec{r}') d^3\vec{r}' = 0 \quad \forall \vec{r} \in R_3.$$

Будем считать далее, что  $\mu(\vec{r})$  – ограниченная непрерывная функция,  $\varphi(r)$  – функция, абсолютно интегрируемая вместе со своими первыми производными (этому условию удовлетворяют все межмолекулярные силы). Тогда к левой и правой частям полученного равенства можно применить преобразование Фурье. Оно приводит к уравнению

$$\vec{p} \tilde{\varphi}(p) \tilde{\mu}(\vec{p}) = 0 \quad \forall \vec{p} \in R_3,$$

в которое входят преобразованные функции  $\tilde{\Phi}(p)$  (2) и

$$\tilde{\mu}(\vec{p}) = (2\pi)^{-3/2} \int_{R_3} \mu(\vec{r}) \exp(i\vec{p}\vec{r}) d^3\vec{r}.$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$\tilde{\mu}(\vec{p}) = \mu_0 \delta^3(\vec{p}) + \sum_{p_N \neq 0} \mu_N(\vec{p}) \delta(p - p_N),$$

где  $\mu_0$  – константа,  $\delta(p)$  – дельта функция Дирака,  $\mu_N(\vec{p})$  – произвольные интегрируемые функции, а суммирование ведется по всем отличным от нуля корням  $p_N$  функции  $\tilde{\Phi}(p)$ . Применяя обратное преобразование Фурье, находим искомую равновесную плотность

$$\mu(\vec{r}) = \mu_0 + (2\pi)^{-3/2} \sum_{p_N \neq 0} \int_{\sigma_N} \mu_N(\vec{p}) \exp(-i\vec{p}\vec{r}) d\sigma \quad (3)$$

(здесь интегрирование ведется по  $\vec{p}$  по сферам  $\sigma_N$  с радиусами  $p_N$ ), представляющую собой суперпозицию постоянной плотности и плоских волн с волновыми векторами  $\vec{p}$  строго определенной длины. Среди всевозможных конфигураций (3) имеются и периодические. Если обозначить через  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  соответствующие им базисные векторы трансляций, для которых  $\mu(\vec{r} + \vec{a}_j) = \mu(\vec{r})$ , через  $\vec{c}_1, \vec{c}_2, \vec{c}_3$  сопряженный базис, удовлетворяющий условию:  $(\vec{c}_j, \vec{a}_i) = \delta_{ji}$ , то плотности, соответствующие этим конфигурациям, могут быть записаны в виде сумм

$$\mu(\vec{r}) = \mu_0 + \sum_{p_N \neq 0} \sum_{p_{nmk} = p_N} \mu_{nmk} \exp(-i\vec{p}_{nmk}\vec{r}), \quad (4)$$

где  $\vec{p}_{nmk} = n\vec{c}_1 + m\vec{c}_2 + k\vec{c}_3$ , а суммирование ведется по таким  $n, m, k \in Z$ , для которых  $p_{nmk} = p_N$ . Среди таких периодических конфигураций имеются слоистые, цилиндрические и пространственные. Некоторые из них представлены на рис. 1.

Заметим, что возможность существования в модельной среде таких периодических (квазикристаллических) равновесных конфигураций напрямую связана с наличием ненулевых корней у соответствующей этой среде функции

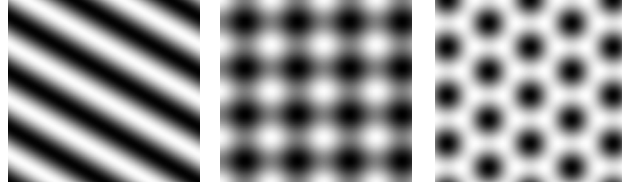


Рис. 1. Примеры равновесных периодических конфигураций

$\tilde{\Phi}(p)$ . Сама по себе необходимость наличия таких корней не накладывает жестких ограничений на возможный вид взаимодействия элементов среды, поскольку выполняется для широкого класса потенциалов, представленных на рис. 2 и характерных для межмолекулярных и межатомных сил взаимодействия [10]. Однако, как будет показано ниже, дополнительное ограничение на потенциал взаимодействия возникает из требования устойчивости таких квазикристаллических конфигураций.

Устойчивость равновесных периодических конфигураций. Будем рассматривать сплошные среды с потенциалами  $\Phi(r)$ , характерными для межмолекулярных и межатомных сил взаимодействия, и условно разобьем все такие среды на типы А, В, С и D, в зависимости от наличия и положения точек минимума и максимума функции  $\tilde{\Phi}(p)$  (рис. 2): среду типа А со строго положительной функцией  $\tilde{\Phi}(p)$ , среду типа В, функция  $\tilde{\Phi}(p)$  которой неотрицательна и имеет один корень, и среды типа С и D, функции  $\tilde{\Phi}(p)$  которых могут принимать отрицательные значения.

Оказывается, что не все равновесные состояния с непрерывным распределением вещества являются устойчивыми, т. е. обладают минимальной потенциальной энергией по отношению к любым локальным перераспределениям вещества. Как будет показано далее, устойчивость этих состояний зависит от типа среды.

Для исследования на устойчивость равновесного периодического (квазикристаллического) состояния с плотностью (4) выделим в

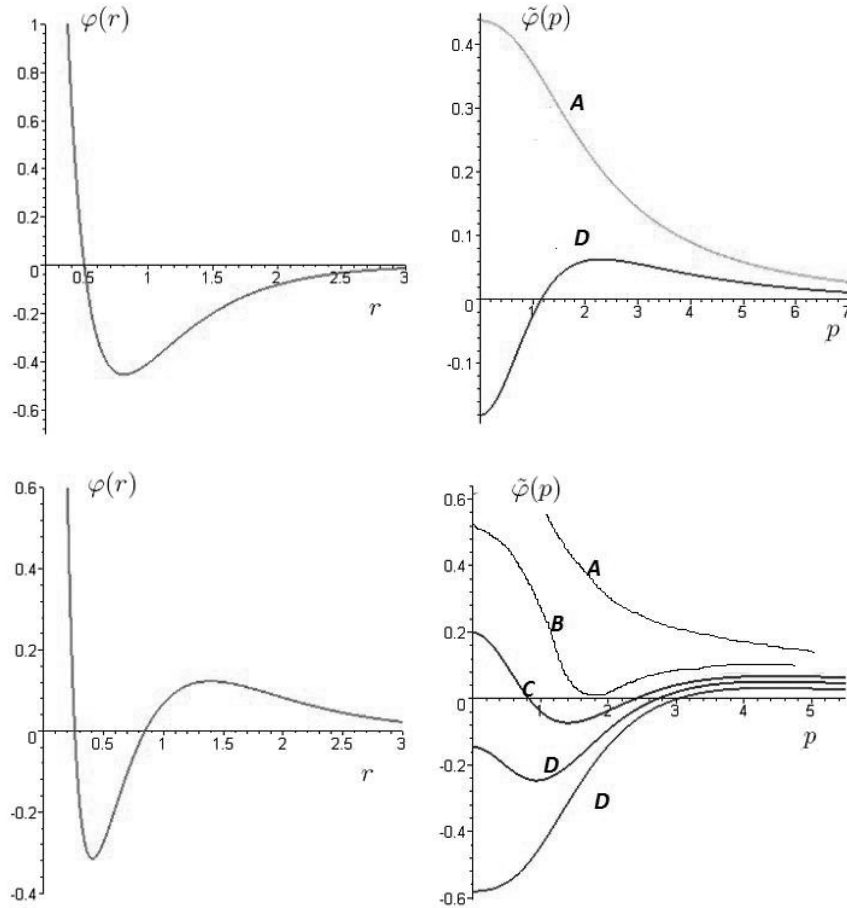


Рис. 2. Потенциалы (слева) и возможные типы  $A, B, C, D$  их преобразований Фурье (справа)

пространстве произвольно большую область  $\Omega$  в виде параллелепипеда, построенного на векторах  $\vec{a}'_1, \vec{a}'_2, \vec{a}'_3$ , кратных соответствующим этой конфигурации векторам трансляций  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ . Масса среды, заключенной в этой области, будет равна  $M = \mu_0 V$ , где  $V$  – объем области  $\Omega$ , а ее потенциальная энергия будет в соответствии с (1), (2), (4) иметь значение

$$U = \int_{\Omega} \int_{R_3} \mu(\vec{r}) \varphi(|\vec{r} - \vec{r}'|) \mu(\vec{r}') d^3\vec{r} d^3\vec{r}' = (2\pi)^{3/2} \mu_0^2 V \tilde{\varphi}(0). \quad (5)$$

Выделим теперь внутри области  $\Omega$  произвольную область  $\Omega_0$  такую, что минимальное расстояния от ее границы до границы области

$\Omega$  намного превосходит эффективный радиус взаимодействия элементов среды. Перераспределим произвольно вещество внутри области  $\Omega_0$ . В результате получим в области  $\Omega$  новую плотность  $\mu'(\vec{r})$ . В силу геометрического расположения области  $\Omega_0$  можно считать, что такое перераспределение не приведет к изменению потенциальной энергии вещества за пределами области  $\Omega$ . Для того чтобы найти потенциальную энергию вещества в самой области  $\Omega$ , разложим полученную после перераспределения вещества плотность  $\mu'(\vec{r})$  в тригонометрический ряд по функциям с базисными векторами трансляций  $\vec{a}'_1, \vec{a}'_2, \vec{a}'_3$ :

$$\mu'(\vec{r}) = \sum_{p'_{nmk} \neq 0} \mu'_{nmk} \exp(-i\vec{p}'_{nmk} \vec{r}) \quad (6)$$

где  $\vec{p}'_{nmk} = n\vec{c}'_1 + m\vec{c}'_2 + k\vec{c}'_3$ ,  $n, m, k \in Z$ ,  $\vec{c}'_1, \vec{c}'_2, \vec{c}'_3$  – соответствующий векторам  $\vec{a}'_1, \vec{a}'_2, \vec{a}'_3$  сопряженный базис. В «приграничной» области  $\Omega \setminus \Omega_0$  эта плотность будет совпадать с исходной периодической равновесной плотностью  $\mu(\vec{r})$  (4). Поэтому, если продолжить плотность  $\mu'(\vec{r})$  по правилу (6) за пределы области  $\Omega$  на все пространство, ее величина окажется совпадающей с действительной плотностью  $\mu(\vec{r})$  за пределами области  $\Omega$  в некоторой внешней «приграничной» области, которая, в силу геометрического расположения области  $\Omega \setminus \Omega_0$ , будет включать в себя все внешнее вещество, взаимодействующее с веществом области  $\Omega$ . Отсюда следует, что во всей области, оказывающей влияние на энергию вещества в области  $\Omega$ , плотность можно считать равной  $\mu'(\vec{r})$ . И тогда потенциальную энергию вещества в области  $\Omega$  можно записать в виде

$$U' = \int_{\Omega} \int_{R_3} \mu'(\vec{r}) \varphi(|\vec{r} - \vec{r}'|) \mu'(\vec{r}') d^3\vec{r} d^3\vec{r}'.$$

Вычисляя интеграл, получим

$$U' = (2\pi)^{3/2} \mu_0^2 V \left( \tilde{\varphi}(0) + \sum_{p'_{nmk} \neq 0} |\mu'_{nmk} / \mu_0|^2 \tilde{\varphi}(p'_{nmk}) \right). \quad (7)$$

Имея в распоряжении выражения (5), (7) для энергий среды в области  $\Omega$  до и после перераспределения вещества, можем перейти к анализу устойчивости квазикристаллических состояний в средах различных типов.

**Утверждение 1.** *В среде типа А существует только одна равновесная конфигурация, соответствующая постоянной плотности вещества, причем она является устойчивой.*

Действительно, в случае среды типа А функция  $\tilde{\varphi}(p)$  не имеет корней, и поэтому равновесная плотность (4) в такой среде постоянна, т. е.  $\mu(\vec{r}) = \mu_0$ . Кроме того, функция  $\tilde{\varphi}(p)$  является строго положительной. Поэтому  $U' > U$

для любого распределения вещества с плотностью, отличной от постоянного значения  $\mu_0$ .

**Утверждение 2.** *В среде типа В все равновесные периодические конфигурации вещества имеют одинаковую энергию и являются устойчивыми. Среди этих конфигураций имеется и однородная конфигурация с постоянной плотностью вещества.*

Для доказательства этого утверждения учтем, что при перераспределении вещества из равновесного периодического состояния с плотностью (4) в состояние с плотностью (6) ряд (6) неизбежно будет содержать слагаемые с  $p'_{nmk} \neq p_N$  (действительно, поскольку  $\mu'(\vec{r}) = \mu(\vec{r})$  в области  $\Omega \setminus \Omega_0$ , то при отсутствии таких слагаемых совпадение плотностей имело бы место во всей области  $\Omega$ ). Тогда, учитывая, что  $\tilde{\varphi}(p) > 0$  для любых  $p \neq p_N$ , получим  $U' > U$ . И, следовательно, любое равновесное периодическое распределение в среде В устойчиво. Энергия любого такого распределения имеет одну и ту же величину (5). Случай, когда все  $\mu_{nmk}$  в (4) равны нулю, соответствует конфигурации с постоянной плотностью вещества  $\mu_0$ .

**Утверждение 3.** *В средах типа С и D все равновесные периодические конфигурации с непрерывным распределением вещества являются неустойчивыми.*

Действительно, в средах типа С и D имеется область, в которой  $\tilde{\varphi}(p) < 0$ . Поэтому путем соответствующего перераспределения вещества (т. е. выбора коэффициентов  $\mu'_{nmk}$  в (6) и (7)) можно сделать энергию  $U'$  меньшей, чем  $U$ . И, следовательно, в этих средах все конфигурации с непрерывным распределением вещества неустойчивы.

**Закключение.** Как следует из проведенного выше анализа непрерывных сплошных сред с потенциальным взаимодействием вида (1), их способность образовывать непрерывные устойчивые конфигурации тесным образом связана со свойствами преобразования Фурье  $\tilde{\varphi}(p)$  потенциала взаимодействия  $\varphi(r)$ . Среди всевозможных типов сплошных сред особым

образом выделяются среды типа В, которые способны находиться как в устойчивом состоянии с постоянной плотностью, так и в устойчивых квазикристаллических состояниях с переменной периодической плотностью вещества.

Такая необычная способность сред типа В может быть использована для моделирования пространственных конфигураций и физико-механических свойств реальных многоатомных кристаллических объектов.

### Список литературы

1. Кунин И.А. Теория упругих сред с микроструктурой. М., 1975.
2. Ильюшин А.А., Ломакин В.А. Моментные теории в механике твердых деформируемых тел // Прочность и пластичность. М., 1971. С. 54–61.
3. Седов Л.И. Модели сплошных сред с внутренними степенями свободы // Приклад. математика и механика. 1968. Т. 32, вып. 5. С. 771–785.
4. Пальмов В.А. Основные уравнения теории несимметричной упругости // Приклад. математика и механика. 1964. Т. 28, вып. 3. С. 401–408.
5. Китаigorodskiy A.I. Смешанные кристаллы. М., 1983.
6. Марихин В.А., Мясникова Л.П. Надмолекулярная структура полимеров. Л., 1977.
7. Гусев А.И., Ремпель А.А. Нанокристаллические материалы. М., 2001.
8. Браун Г., Уолкен Дж. Жидкие кристаллы и биологические структуры. М., 1982.
9. Burducea G. Lyotropic Liquid Crystals I. Specific Structures // Romanian Reports in Physics. 2004. Vol. 56, № 1. P. 66–86.
10. Каплан И.Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. М., 1982.

### References

1. Kunin I.A. *Teorija uprugih sred s mikrostrukturaj* [The theory of Elastic Media with Microstructure]. Moscow, 1975.
2. Plyushin A.A., Lomakin V.A. Momentnye teorii v mehanike tverdyh deformiruemyh tel [Bending Theory in Solid Mechanics]. *Prochnost' i plastichnost'*, 1971, pp. 54–61.
3. Sedov L.I. Modeli sploshnyh sred s vnutrennimi stepenjami svobody [Models of Continuous Medium with Internal Degrees of Freedom]. *Prikladnaya matematika i mehanika*, 1968, vol. 32, ed. 5, pp. 771–785.
4. Palmov V.A. Osnovnye uravnenija teorii nesimmetrichnoj uprugosti [Basic Equations of the Theory of Asymmetric Elasticity]. *Prikladnaya matematika i mehanika*, 1964, vol. 28, ed. 3, pp. 401–408.
5. Kitaigorodsky A.I. *Smeshannye kristally* [Mixed Crystals]. Moscow, 1983.
6. Marikhin V.A., Myasnikova L.P. *Nadmolekuljarnaja struktura polimerov* [Supramolecular Structure of Polymers]. L., 1977.
7. Gusev A.I., Rempel A.A. *Nanokristallicheskie materialy* [Nanocrystalline Materials]. Moscow, 2001.
8. Braun G.H., Wolken J.J. *Liquid Crystals and Biological Structures*. New-York, 1979.
9. Burducea G. Lyotropic Liquid Crystals I. Specific Structures. *Romanian Reports in Physics*, 2004, vol. 56, no. 1, pp. 66–86.
10. Kaplan I.G. *Vvedenie v teoriju mezhmolekuljarnyh vzaimodejstvij* [Introduction to the Theory of Intermolecular Interactions]. Moscow, 1982.

***Tomashevsky Igor Lyudvigovich,***

Institute of Mathematics, Information and Space Technologies,  
Northern (Arctic) Federal University named after M.V. Lomonosov (Arkhangelsk, Russia)

## **EQUILIBRIUM CONFIGURATIONS OF THE CONTINUOUS MEDIUM WITH NONLOCAL INTERACTION**

The model of an infinite continuous medium is considered. The interaction between spatially distant elements is characterized by the potential energy proportional to the masses of the elements and interaction potential depending on the distance between the elements. The paper investigates the state of equilibrium of such a medium with a density of material substance, positive everywhere except, perhaps, the set of points of measure zero. The geometry of the states of equilibrium is identified only by the roots of the Fourier transformation  $\tilde{\varphi}(p)$  of the interaction potential. Not all the states of equilibrium with a continuous distribution of material substance are stable, as they possess minimal potential energy with respect to any local redistribution of material substance. Their stability depends on the presence and position of minimum points of the Fourier transformation  $\tilde{\varphi}(p)$ .

The analysis of the states of equilibrium in the case of the Fourier transformation  $\tilde{\varphi}(p)$  has a single point of local minimum  $p_0$  which is positive everywhere except maybe neighborhood of  $p_0$ .

Three possible cases are considered. In the first case ( $\tilde{\varphi}(p_0) < 0$ ), if the density of material substance is positive quasi everywhere then the states of equilibrium are not stable. In the second case ( $\tilde{\varphi}(p_0) > 0$ ) the medium has the unique state of equilibrium, which is stable and simple. In the third case ( $\tilde{\varphi}(p_0) = 0$ ) the medium has infinitely many states of equilibrium, which are stable and have space periodic density of material substance and the same energy. Among these states, there are simple states with constant density, as well as the states with 1D-periodical (laminal) and 2D-periodical (cylindrical) distribution of material substance. Unusual ability of the continuous medium with nonlocal interaction to create periodical crystal-like configurations of material substance can be used for a simulation and an analogue of spatial configurations and physical and mechanical properties of real polyatomic crystals.

**Keywords:** *continuous medium, nonlocal interaction, periodic functions.*

*Контактная информация:*

*адрес:* 163060, г. Архангельск, ул. Урицкого, 68, корп. 3;  
*e-mail:* tomashevil@gmail.com

Рецензент – *Андреев П.Д.*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического анализа, алгебры и геометрии института математики, информационных и космических технологий Северного (Арктического) федерального университета имени М.В. Ломоносова