

УДК 53:51 + 517.958

Бифуркационное поведение потенциальной энергии системы частиц

М.А. Гузов, А.А. Дмитриев

Институт прикладной математики ДВО РАН, Владивосток, 690041, Россия

Рассматривается одномерная модель кристалла, состоящая из попарно взаимодействующих частиц. Исследуются критические точки потенциальной энергии для такой системы при растяжении кристалла в предположении, что потенциал парного взаимодействия имеет единственный минимум. Показано, что процесс образования новых критических точек потенциальной энергии носит бифуркационный характер.

Ключевые слова: молекулярная динамика, потенциал леннарда-джонсовского типа, критические точки, бифуркация

Bifurcational behavior of potential energy in a particle system

M.A. Guzev and A.A. Dmitriev

Institute of Applied Mathematics, FEB RAS, Vladivostok, 690041, Russia

The paper considers a one-dimensional crystal model consisting of pairwise interacting particles. The critical points of potential energy for the crystal system under tension are studied on the assumption that the pair interaction potential has a single minimum. It is shown that new critical points of potential energy appear in a bifurcational manner.

Keywords: molecular dynamics, Lennard-Jones potential, critical points, bifurcation

1. Введение

Традиционное рассмотрение исследователями проблем пластического деформирования и разрушения было основано на методах механики сплошной среды. Однако проблема полного описания физико-механических свойств материалов обусловила возникновение потребности в разработке новых теоретических моделей их поведения в различных условиях. Появилось много работ, в которых вводились различные характеристики внутренней структуры материалов. Эта ситуация ускорила в середине прошлого века, когда экспериментальными методами были обнаружены в деформированных металлах основные носители пластического течения на микромасштабном уровне — дислокации, а затем и другие деформационные дефекты различного масштаба.

Тем не менее прямого перехода от микроскопического описания методами физики внутренней структуры материалов к макроскопическим результатам механики сплошной среды не было сделано. К началу 80-х годов XX века стало ясно [1], что с точки зрения физики основная проблема на этом пути состоит в необходи-

мости выяснения механизмов генерации деформационных дефектов различного масштабного уровня. Дело в том, что теоретические расчеты, выполненные после экспериментального обнаружения дислокаций, показали невозможность их зарождения в равновесном кристалле [1], что соответствует наличию единственного минимума у термодинамического потенциала. Данная проблема стимулировала изменение некоторых аксиоматических оснований в макроскопических подходах механики сплошной среды. Здесь следует указать на пионерскую работу [2], в которой для упругого материала энергия предполагалась невыпуклой функцией тензора деформации при описании фазового перехода, сопровождаемого изменением макроскопических характеристик материала.

С другой стороны, для решения указанной выше проблемы была предложена новая физическая концепция описания деформируемого твердого тела как многоуровневой иерархически организованной системы [3]. Согласно этому подходу пластические деформации и разрушение твердых тел могут происходить только в областях, содержащих сильнонеравновесные состоя-

ния. При этом сами области зарождаются в зонах концентраторов напряжений, которые характеризуются увеличением молярного объема при гидростатическом растяжении. В этих условиях термодинамический потенциал содержит локальные минимумы, соответствующие различным состояниям в деформируемом твердом теле, например равновесный кристалл, зоны зарождения ядер дислокаций, зоны формирования мезо- и макрополос и др. [4].

Для преодоления трудностей описания процессов пластической деформации и разрушения материалов представляют интерес работы, выполненные на стыке различных подходов. Здесь следует указать статью [5], в которой представлена одномерная модель разрушения в цепочке атомов, взаимодействующих с помощью потенциала Леннарда-Джонса. Главный результат, который следует из рассмотренной модели и не охватывается линейной механикой разрушения, состоит в том, что процесс разрушения имеет бифуркационный характер.

В данной работе мы используем одномерную дискретную модель атомов для обоснования идеи [3, 4] о формировании локальных минимумов потенциала при гидростатическом растяжении. На основе методов классического математического анализа доказывается следующее утверждение: локальные минимумы потенциала системы частиц образуются в результате процесса бифуркации, при этом потенциал парного взаимодействия между частицами имеет единственный минимум. Чтобы исследовать механизм поведения потенциала при изменении гидростатического растяжения, была рассмотрена задача для простейших случаев об одной и двух частицах в ячейке. Проведенный анализ минимумов потенциала для этих случаев допускает обобщение при решении проблемы описания критических точек многочастичного потенциала. В конце работы рассмотрен пример потенциала, для которого точно вычисляются точки бифуркации.

2. Основные соотношения

Потенциальная энергия $W_n(x_1, \dots, x_n)$ одномерной системы n частиц равна

$$W_n(x_1, \dots, x_n) = \Phi(x_1) + \sum_{i=1}^{n-1} \Phi(x_{i+1} - x_i) + \Phi(L - x_n), \quad (1)$$

где функция $\Phi(x_{i+1} - x_i)$ задает потенциал взаимодействия между частицами; координата x_i характеризует положение частицы. Движение системы ограничено неравенствами $0 < x_1 < \dots < x_n < L$. Предполагается, что потенциал $\Phi(x)$ содержит область притяжения и отталкивания, т.е. $\Phi(x) \rightarrow \infty$ при $x \rightarrow 0$ и $\Phi(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \infty$. Функция $\Phi(x)$ имеет единственную критическую точку минимума t_N и точку перегиба t_M ; $\Phi(x)$ является строго выпуклой на интервале $(0, t_M)$ и строго вогнутой на интервале (t_M, ∞) .

Критические точки потенциальной энергии $W_n(x_1, \dots, x_n)$ определяются как решения системы уравнений:

$$\begin{aligned} \Phi'(x_1) &= \Phi'(x_2 - x_1), \\ \Phi'(x_2 - x_1) &= \Phi'(x_3 - x_2), \dots, \\ \Phi'(x_n - x_{n-1}) &= \Phi'(L - x_n). \end{aligned} \quad (2)$$

С точки зрения механики эти соотношения означают, что молекулярная цепочка находится в состоянии равновесия. Набор равновесных состояний зависит от выбора внешнего параметра L . В случае когда

$$x_{i+1} - x_i = \frac{L}{n+1}, \quad x_1 = \frac{L}{n+1}, \quad x_n = \frac{nL}{n+1}, \quad (3)$$

система уравнений (2) удовлетворяется тождественно. Равновесие (3) является тривиальным (по терминологии [5]) и соответствует равномерному распределению частиц. В частности, при $L = (n+1)t_N$ все производные в (2) равны нулю, а соответствующая матрица вторых производных функции $W_n(x_1, \dots, x_n)$ является положительно определенной и состояние равновесия является минимумом. При других значениях L набор равновесий определяется конкуренцией входящих в правую часть (1) вкладов. Из сказанного выше следует, что общая постановка задачи состоит в описании критических точек потенциала $W_n(x_1, \dots, x_n)$ в зависимости от параметра L .

Заметим, что для рассматриваемой модели при фиксированном значении числа частиц n существует естественный безразмерный параметр α , характеризующий соотношение между внешним масштабом L и внутренним масштабом:

$$\alpha = t_M / [L / (n+1)]. \quad (4)$$

3. Одна частица в ячейке

Потенциальная энергия одной частицы в ячейке длины L определяется формулой $W_1(x_1) = \Phi(x_1) + \Phi(L - x_1)$. Критическая точка x_* функции $W_1(x_1)$ определяется из

$$f(x_*) = f(L - x_*) = \Lambda, \quad f(x) = \Phi'(x). \quad (5)$$

При сделанных выше предположениях о потенциале $\Phi(x)$ его производная $f(x) \rightarrow -\infty$, если $x \rightarrow 0$; она отрицательна при $x \in (0, t_N)$ и положительна при $x \in (t_N, \infty)$. Функция $f(x)$ имеет точку перегиба t_f , является строго вогнутой на интервале $(0, t_f)$ и строго выпуклой на интервале (t_f, ∞) , при этом качественное поведение $f' = \Phi''$ совпадает с поведением функции Φ (рис. 1).

При таких свойствах $f(x)$ уравнение (5) имеет единственное решение, если $\Lambda \leq 0$, и два решения, если $0 < \Lambda < f(t_M)$. Для $\Lambda \leq 0$ функция, обратная к $f(x)$, определена одной ветвью, поэтому единственное решение (5) находится из условия $x_* = L - x_*$. Отсюда следует, что $x_* = L/2$ и получаем решение, соответствующее тривиальному равновесию.

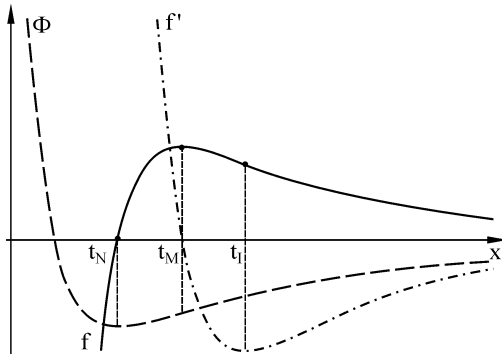


Рис. 1. Потенциал $\Phi(t)$, первая $f(t) = \Phi'(t)$ и вторая $f'(t) = \Phi''(t)$ производные

Если $0 < \Lambda < f(t_M)$, то функция, обратная к $f(x)$, определена двумя ветвями $g_1(\Lambda), g_2(\Lambda)$. Ветвь $g_1(\Lambda)$ является обратной к функции $f(x)$ при $x \in (0, t_M)$, монотонно возрастает на интервале $(-\infty, f(t_M))$ и выпукла. Если функция $f(x)$ рассматривается на интервале (t_M, ∞) , то обратной для нее является ветвь $g_2(\Lambda)$, которая монотонно убывает на интервале $(0, f(t_M))$ (рис. 2).

Таким образом, при $0 < \Lambda < f(t_M)$ решения t, s уравнения $f(x) = \Lambda$ можно записать в виде: $t = g_1(\Lambda)$, $s = g_2(\Lambda)$. Из рис. 2 видно, что знание одного из решений позволяет найти второе. Это соотношение можно представить аналитически для всех $t \in (t_N, +\infty)$ в виде:

$$\begin{aligned} s(t) &= g_1(f(t)) \text{ при } t_N < t < t_M, \\ s(t) &= g_2(f(t)) \text{ при } t > t_M. \end{aligned} \quad (6)$$

Решения t, s соответствуют соотношению (5), если удовлетворяют уравнению связи

$$t + s(t) = L. \quad (7)$$

Отсюда видно, что задача исследования критических точек потенциала $W_1(x_1)$ редуцировалась к нахождению корней уравнения (7).

Наглядное представление о разрешимости (7) дает применение графического метода. Введем плоскость (β, t) и рассмотрим линию, определяемую уравнением $\beta_1(t) = t + s(t)$ (рис. 3).

Если зафиксировать какое-то значение $\beta = \beta_*$, то отсюда и из (7) следует, что мы рассматриваем ячейку

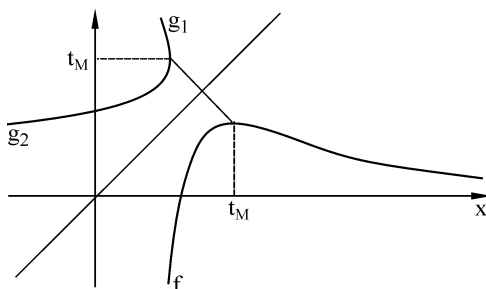


Рис. 2. Производная потенциала $f(t)$ и функции $g_1(\Lambda), g_2(\Lambda)$

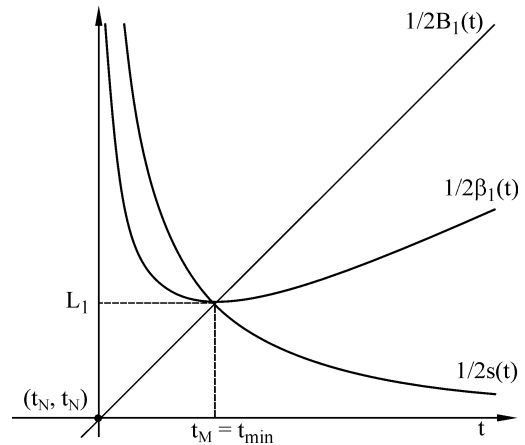


Рис. 3. Функции $s(t)$, $\beta_1(t) = t + s(t)$ и $B_1(t) = 2t$

длиной $L = \beta_*$. Тогда ответ на вопрос о существовании корней уравнения (7), соответствующих наличию нетривиальных равновесий частицы при заданном L , легко получить графически: фиксируем $\beta = L$ и проводим прямую, параллельную оси t . Существование точки пересечения с кривой $\beta = \beta_1(t)$ означает наличие нетривиального равновесия. В противном случае нетривиальное равновесие отсутствует. Поэтому кривую $\beta = \beta_1(t)$ естественно называть линией нетривиальных равновесий.

Применение указанного выше метода для исследования корней уравнения (7) предполагает знание качественного поведения $\beta(t)$. Последнее определяется свойствами функции $s(t)$. Во-первых, функция $s(t)$ является инволюцией, т.е. ее обратная совпадает с ней самой (доказательство следует из определения $s(t)$), поэтому $s(t)$ симметрична относительно главной диагонали. Во-вторых, функция $s(t)$ монотонно убывает, поскольку (рис. 1)

$$f(t) = f(s(t)) \text{ и } s'(t) = f'(t)/f'(s) < 0. \quad (8)$$

В-третьих, она имеет вертикальную асимптоту, т.к. при $s(t) \rightarrow +\infty$ $t \rightarrow t_N - 0$ (рис. 3). Поскольку $s(t)$ является инволюцией, то она обладает также горизонтальной асимптотой. Значит, качественное поведение функции $\beta_1(t)$ имеет вид, представленный на рис. 3. Отсюда видно, что прямая $\beta = L$ может пересечь линию нетривиальных равновесий $\beta = \beta_1(t)$ в одной точке — точке минимума, или двух точках, либо вообще не будет иметь точек пересечения.

На плоскости (β, t) построим линию тривиальных равновесий. Рассмотрим прямую $B_1(t) = 2t$ (рис. 3), зафиксируем $\beta = L$ и построим прямую, параллельную оси t . Эти прямые всегда пересекаются в точке, координата которой равна $t = L/2$, соответствующей тривиальному равновесию частицы (3), всегда существующему для заданного параметра L .

Из сказанного выше следует, что нетривиальные равновесия могут сначала отсутствовать, если значение

L не превосходит некоторой критической величины L_1 . Затем они появляются, если значение $L > L_1$, т.е. появление нетривиальных равновесий является бифуркацией для функции $W_1(x_1)$ при изменении параметра L .

Координата t_1 точки бифуркации определяется из условия пересечения кривых $\beta_1(t)$ и $B_1(t)$: $t_1 + s(t_1) = 2t_1$, которое эквивалентно соотношению

$$s(t_1) = t_1. \quad (9)$$

В силу свойств потенциала $\Phi(x)$ для него справедливо условие $s(t_M) = t_M$ (рис. 3), следовательно,

$$t_1 = t_M. \quad (10)$$

Более того, t_M совпадает с координатой $t_{\min}$ минимума кривой $\beta_1(t)$. Действительно, величина $t_{\min}$ определяется из уравнения

$$\beta_1'(t_{\min}) = 1 + s'(t_{\min}) = 0. \quad (11)$$

Поскольку функция $s(t)$ является инволюцией, то $s(s(t)) = t$, откуда следует соотношение $s'(s)s'(t) = 1$. Полагая $t = t_M$, получим $[s'(t_M)]^2 = 1$. Учитывая неравенство (8), приходим к выводу, что

$$s'(t_M) = -1, \quad (12)$$

т.е. $t_{\min} = t_M$. Тогда критическое значение параметра L , при котором происходит бифуркация, равно $L_1 = t_1 + s(t_1) = 2t_M$, а бифуркационный параметр (4) равен $\alpha = 1$. Асимптотическое поведение потенциала $W_1(x_1)$ при $L > L_1 = 2t_M$ было проанализировано в статье [6].

Следует заметить, что бифуркационные характеристики можно рассматривать как решения уравнения, определяемого кривизной потенциала $\Phi(x)$. По определению, кривизна $\kappa(x)$ плоской кривой равна $\kappa(x) = \Phi''(x)/[1 + (\Phi'(x))^2]^{3/2}$. Для точек (6) условие (11) записывается в терминах кривизны, если воспользоваться соотношениями (5), (7) и (8):

$$\frac{\kappa(t_{\min})}{\kappa(L - t_{\min})} = -1. \quad (13)$$

Возможные решения этого уравнения относительно $t_{\min}$, L определяют значения параметров бифуркации. Для $L = t_{\min}$ условие (13) приводит к $\kappa(t_{\min}) = -\kappa(t_{\min})$, что эквивалентно обращению в нуль кривизны потенциала $\Phi(x)$ в точке $t_{\min}$: $\kappa(t_{\min}) = 0$. Таким образом, $t_{\min}$ совпадает с точкой перегиба t_M потенциала.

Для иллюстрации полученных результатов приведем численный анализ поведения потенциала W_1 при условии, что парный потенциал Φ совпадает с потенциалом Леннарда-Джонса:

$$\Phi(x) = [1/x^{12} - 2/x^6], \quad (14)$$

где координата x нормирована на t_N — равновесное расстояние между частицами в отсутствии сил. Параметр L был выбран в виде $L = 2(1 + \epsilon) \geq 2$. Численные расчеты показывают, что W_1 имеет единственный минимум вплоть до значений $L \approx 2(1 + 0.10868)$ (рис. 4). При монотонном изменении параметра L положение минимума монотонно смещается вправо, оставаясь в центре

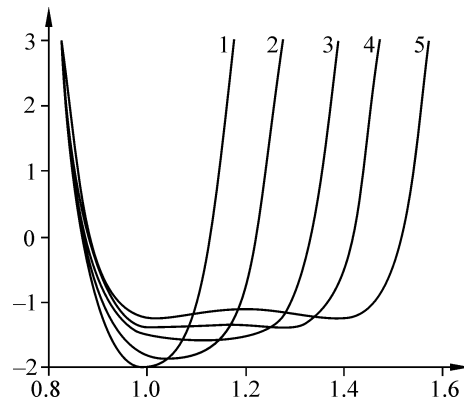


Рис. 4. Поведение потенциала W_1 при разных значениях параметра $\epsilon = 0.0$ (1), 0.5 (2), 0.10868 (3), 0.15 (4), 1.2 (5)

ячейки $\bar{x}_1 \approx (1 + 0.10868)$, вплоть до достижения критического значения растяжения. В области $2 < L \leq 2(1 + 0.10868)$ наблюдается формирование «плато» у функции W_1 , а значение второй производной W_1'' близко к нулю. Дальнейший численный анализ показывает, что существует критическое значение растяжения $L_1 \approx 2(1 + 0.10868)$, т.к. при $L > L_1$ вторая производная W_1'' меняет знак и потенциал перестраивается: вместо минимума появляется максимум, окруженный двумя дополнительными минимумами.

4. Случай двух частиц

Потенциальная энергия двух частиц, как следует из (1), имеет следующий вид:

$$W_2(x_1, x_2) = \Phi(x_1) + \Phi(x_2 - x_1) + \Phi(L - x_2). \quad (15)$$

Перейдем к новым переменным, вводя относительные смещения $u_1 = x_1$, $u_2 = x_2 - x_1$, $u_3 = L - x_2$. Они удовлетворяют условию

$$u_1 + u_2 + u_3 = L. \quad (16)$$

Тогда задача на условный экстремум для функции (13) редуцируется к задаче нахождения абсолютного экстремума для функции

$$F(u_1, u_2, u_3) = \Phi(u_1) + \Phi(u_2) + \Phi(u_3) + \Lambda(L - u_1 - u_2 - u_3), \quad (17)$$

где Λ — множитель Лагранжа. Критические точки функции $F(u_1, u_2, u_3)$ удовлетворяют уравнениям

$$\Phi'(u_k) = \Lambda, \quad k = 1, 2, 3. \quad (18)$$

Для исследования решений системы (18) воспользуемся результатами п. 3. Из них следует, что единственное (тривиальное) решение (3) существует при $\Lambda < 0$. Вводя вектор смещения $\mathbf{U} = \mathbf{e}_1 u_1 + \mathbf{e}_2 u_2 + \mathbf{e}_3 u_3$, получаем в случае тривиального решения $\mathbf{U}_{0,1} = L/3(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3)$. Решение, отличное от тривиального, конструируется при $\Lambda > 0$ и определяется формулами:

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{1,1} &= \mathbf{e}_1 t + \mathbf{e}_2 t + \mathbf{e}_3 s, & \mathbf{U}_{1,2} &= \mathbf{e}_1 t + \mathbf{e}_2 s + \mathbf{e}_3 t, \\ \mathbf{U}_{1,3} &= \mathbf{e}_1 s + \mathbf{e}_2 t + \mathbf{e}_3 t, & t &= g_1(\Lambda), \quad s = g_2(\Lambda). \end{aligned} \quad (19)$$

Уравнение связи (16) принимает вид:

$$2t + s(t) = L. \quad (20)$$

Для изучения корней уравнений (20) и их бифуркационного поведения используем метод анализа, представленный в п. 3. С этой целью на плоскости (β, t) строим кривую, определяемую уравнением $\beta_2(t) = t + 2s(t)$ (рис. 5), и прямую $B_2(t) = 3t$, соответствующие тривиальным решениям. Качественное поведение функции $\beta_2(t)$ совпадает с качественным поведением $\beta_1(t)$ (рис. 5). Введем два индекса у координаты точки бифуркации $t_{p,q}$: первый индекс p соответствует порядковому номеру точки, а второй индекс q — числу рассматриваемых частиц. Для рассматриваемого нами случая двух частиц координата $t_{2,2}$ определяется из условия пересечения кривых $\beta_2(t)$ и $B_2(t)$, а $t_{1,2}$ совпадает с минимумом кривой $\beta_2(t)$. Первое требование приводит к соотношению $s(t_{2,2}) = t_{2,2}$, которое эквивалентно (9), и, учитывая (10), получаем $t_1 = t_{2,2} = t_M$. Координата $t_{1,2}$ удовлетворяет уравнению

$$\beta'_2(t_{1,2}) = 2 + s'(t_{1,2}) = 0. \quad (21)$$

Поскольку функция $s(t)$ является монотонной и справедливо условие (11), то $t_{1,2} < t_{2,2} = t_M$. Заметим, что аналогично случаю одной частицы уравнение (13) можно записать в терминах кривизны потенциала $\Phi(x)$. Используя (5) и (8), получаем:

$$\frac{\kappa(t_{1,2})}{\kappa(L - 2t_{1,2})} = -2. \quad (22)$$

Таким образом, существуют две координаты $t_{1,2}, t_M$, которым соответствуют бифуркационные значения параметра α :

$$\alpha_{12} \equiv \frac{t_M}{L_{12}/3} \equiv \frac{t_M}{[2t_{1,2} + s(t_{1,2})]/3} > 1,$$

$$\alpha_{22} \equiv \frac{t_M}{L_{22}/3} \equiv \frac{t_M}{[2t_{2,2} + s(t_{2,2})]/3} = 1.$$

Если $L < L_{12}$, то существует единственная критическая точка потенциала

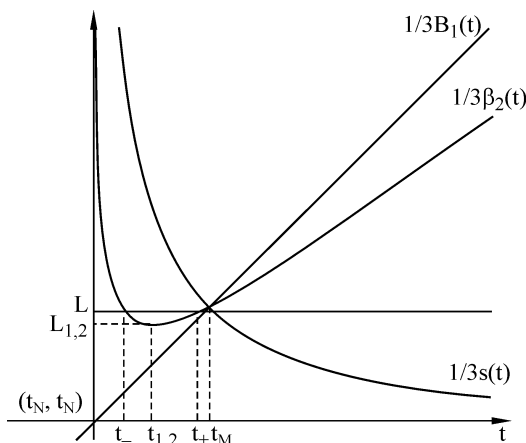


Рис. 5. Функции $s(t)$, $\beta_2(t) = 2t + s(t)$ и $B_2(t) = 3t$

$$\mathbf{x}_L = 1/3(L, 2L), \quad (23)$$

которая является точкой минимума. При $L = L_{12}$ потенциал $W_2(x_1, x_2)$ испытывает бифуркацию: на плоскости (β, t) прямая $\beta = L_{12}$ касается линии нетривиального решения $\beta = \beta_2(t)$.

Дальнейшее увеличение L приводит к появлению дополнительных критических точек. На рис. 5 этому соответствует наличие точек t_+, t_- , образующихся при пересечении прямой $\beta = L > L_{12}$ и кривой $\beta = \beta_2(t)$. Для координат (x_1, x_2) критических точек потенциала существуют три различных набора, которые определяются вектором смещения (19): $(t, 2t)$, $(t, t + s(t))$, $(s(t), s(t) + t)$, где $t, s(t)$ связаны соотношением (20). Вычисляя детерминант матрицы Якоби $\|\partial^2 W_2(x_1, x_2)/\partial x_i \partial x_j\|$, нетрудно убедиться, что набор

$$\mathbf{x}_1^- = (t_-, 2t_-), \quad \mathbf{x}_2^- = (t_-, t_- + s(t_-)),$$

$$\mathbf{x}_3^- = (s(t_-), s(t_-) + t_-) \quad (24)$$

соответствует минимуму потенциала $W_2(x_1, x_2)$, а набор

$$\mathbf{x}_1^+ = (t_+, 2t_+), \quad \mathbf{x}_2^+ = (t_+, t_+ + s(t_+)),$$

$$\mathbf{x}_3^+ = (s(t_+), s(t_+) + t_+) \quad (25)$$

определяет седловые точки потенциала $W_2(x_1, x_2)$.

При $L = L_M$ линии нетривиального $\beta = \beta_2(t)$ и тривиального решений $\beta = B_2(t)$ пересекаются, тогда происходит вторая бифуркация потенциала $W_2(x_1, x_2)$. Из рис. 5 видно, что пересечение имеет место при $t_+ = t_M$, в результате точка $\mathbf{x}_L$ (23) сливается с точками $\mathbf{x}_k^+$. При $L > L_M$ меняется тип точки $\mathbf{x}_L$ — она становится точкой максимума. Тип остальных критических точек (24), (25) не изменяется.

5. Случай n частиц

Исследование проблемы поведения критических точек потенциала (1) для n частиц осуществляется в рамках методов и подходов, представленных в предыдущем разделе. Введем относительные смещения частиц в качестве новых переменных, полагая $u_1 = x_1$, $u_k = x_k - x_{k-1}$, $k = 2, \dots, n$; $u_{n+1} = L - x_n$, для которых справедливо соотношение

$$\sum_{k=1}^{n+1} u_k = L. \quad (26)$$

Функция $W_n(x_1, \dots, x_n)$ (1) приобретает вид:

$$W_n(x_1, \dots, x_n) = \sum_{k=1}^{n+1} \Phi(u_k), \quad (27)$$

тогда задача исследования ее критических точек при условии (26) сводится к задаче нахождения критических точек соответствующей функции Лагранжа

$$F(u_1, \dots, u_{n+1}) = \sum_{k=1}^{n+1} \Phi(u_k) + \Lambda(L - \sum_{k=1}^{n+1} u_k). \quad (28)$$

Критические точки этой функции определяются из системы уравнений:

$$\Phi'(u_k) = \Lambda, \quad k = 1, \dots, n+1, \quad (29)$$

при выполнении соотношений связи (26).

При $\Lambda < 0$ существует единственное решение системы (29), которое определяет тривиальный вектор смещения

$$\mathbf{U}_0 = \frac{L}{n+1} \sum_{k=1}^{n+1} \mathbf{e}_k.$$

Другие решения можно записать для $\Lambda > 0$, при этом величины u_k принимают лишь два значения t, s , для которых $\Phi'(t) = \Phi'(s) = \Lambda$. Пусть m компонент u_k равны t (6), а остальные совпадают с $s = s(t)$ ($m = 1, \dots, n$). Тогда нетривиальный вектор смещения $\mathbf{U}_m$ равен

$$\mathbf{U}_m = t \sum_{k=1}^m \mathbf{e}_k + s \sum_{k=m+1}^{n+1} \mathbf{e}_k. \quad (30)$$

Предложенная редукция позволяет свести задачу поиска критических точек функции $W_n(x_1, \dots, x_n)$ к параметрическому произволу относительно t . Действительно, запишем (26) и (27) для полей (30):

$$\begin{aligned} mt + (n+1-m)s(t) &= L, \\ W_n(x_1, \dots, x_n)|_{\mathbf{U}_m} &\equiv W_{n,m}(t) = \\ &= m\Phi(t) + (n+1-m)\Phi(s(t)). \end{aligned} \quad (31)$$

Отсюда следует, что критические точки потенциала удовлетворяют уравнению

$$\begin{aligned} \frac{\partial W_{n,m}(t)}{\partial t} &= 0 \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow f(t) &= f(s(t)) = f((L-mt)/(n+1-m)), \end{aligned} \quad (32)$$

где функция $f(t)$ определена в (5). Число точек пересечения графиков функций в (32) равно числу критических точек. Точки бифуркации $t_{n,m}$ являются решениями уравнения

$$\left. \frac{\partial [mt + (n+1-m)s(t)]}{\partial t} \right|_{t=t_{n,m}} = 0. \quad (33)$$

Аналогично случаям одной и двух частиц уравнение (33) можно записать через кривизну потенциала в виде:

$$\frac{\kappa(t_{n,m})}{\kappa((L-mt_{n,m})/(n+1-m))} = -\frac{m}{n+1-m}. \quad (34)$$

6. Пример аналитического решения

Конструктивные результаты, которые следуют из выше представленных формул, можно получить для точно решаемой модели. С этой целью рассмотрим потенциал

$$\Phi(x) = \frac{1}{(2p-1)x^{2p-1}} - \frac{2}{(p-1)x^{p-1}}, \quad (35)$$

где $p > 1$. Потенциал (35) топологически совпадает с классическим потенциалом Леннарда-Джонса (14). Точки минимума t_N и перегиба t_M находятся из условий

$$\Phi'(t_N) = -\frac{1}{t_N^{2p}} + \frac{2}{t_N^p} = 0, \quad \Phi''(t_M) = \frac{2p}{t_M^{2p+1}} - \frac{2p}{t_M^{p+1}} = 0,$$

которые дают $t_N = 2^{-1/p}$ и $t_M = 1$. На плоскости (β, t) линия нетривиального решения определяется формулой $\beta_m(t) = mt + (n+1-m)s(t)$. Общая формула (6) для $s(t)$ предполагает знание двух ветвей $g_1(\Lambda)$, $g_2(\Lambda)$ функции обратной к $f(x)$. Поскольку

$$f(x) = \frac{2}{x^p} - \frac{1}{x^{2p}}, \quad (36)$$

то отсюда получаем:

$$\begin{aligned} g_1(\Lambda) &= (1 + \sqrt{1-\Lambda})^{-1/p}, \\ g_2(\Lambda) &= (1 - \sqrt{1-\Lambda})^{-1/p}. \end{aligned} \quad (37)$$

Подстановка (36), (37) в (6) дает

$$s(t) = \frac{t}{(2t^p - 1)^{1/p}}. \quad (38)$$

Представление (38) можно получить из (32), если подставить (35) в (32), что приводит к соотношению

$$\left(\frac{1}{t^p} + \frac{1}{s^p} - 2 \right) \left(\frac{1}{t^p} - \frac{1}{s^p} \right) = 0. \quad (39)$$

Отсюда сразу получаем возможные функциональные зависимости $s = s(t)$:

$$s(t) = t, \quad s(t) = \frac{t}{(2t^p - 1)^{1/p}}.$$

Первое соотношение выполняется только в точке $t_M = 1$, но оно не противоречит второму соотношению, которое совпадает с (38). Проверим, что функция $s(t)$ является инволюцией. Действительно,

$$\begin{aligned} s(s(t)) &= \frac{s(t)}{(2[s(t)]^p - 1)^{1/p}} = \\ &= \frac{t}{(2t^p - 1)^{1/p}} \frac{1}{(2[t^p/(2t^p - 1)] - 1)^{1/p}} = t. \end{aligned}$$

На плоскости (β, t) точки бифуркации $t_{n,m}$ определяются из условия

$$\frac{\partial \beta_m}{\partial t} = m + (n+1-m)s'(t) = 0. \quad (40)$$

Производная $s'(t)$ вычисляется из (38):

$$s'(t) = -\frac{1}{(2t^p - 1)^{(1+p)/p}}. \quad (41)$$

Комбинируя (40) и (41), получаем

$$t_{n,m} = \left\{ \frac{1}{2} \left[1 + \left(\frac{n+1}{m} - 1 \right)^{p/(p+1)} \right] \right\}^{1/p}. \quad (42)$$

Не все элементы в последовательности $\{t_{n,m}\}$ соответствуют физически различным состояниям, для которых $t_{n,m} < s_{n,m} \equiv s(t_{n,m})$. Чтобы найти эти значения m , рассмотрим $t_{n,m} - s_{n,m}$. Из (38) следует, что

$$t_{n,m} - s_{n,m} = t_{n,m} \left[1 - \frac{1}{(2t_{n,m}^p - 1)^{1/p}} \right]. \quad (43)$$

Отсюда видно, что $t_{n,m} - s_{n,m} < 0$ при $t_{n,m} < 1$. Используя (43), получаем

$$m > (n+1)/2.$$

Для остальных значений m точка бифуркации $t_{n,m}$ совпадает с $s_{n,n+1-m}$ для потенциала $W_{n,n+1-m}(t) = (n+1-m)\Phi(t) + m\Phi(s(t))$ при условии $(n+1-m)t + ms(t) = L$.

Другим свойством последовательности $\{t_{n,m}\}$ является ее упорядоченность, т.е. $t_{n,m} < t_{n,m+1}$. Это непосредственно вытекает из (42). Свойство упорядоченности точек бифуркации справедливо для любого потенциала типа Леннарда-Джонса.

Выясним, как упорядочены значения энергии (31) для $t = t_{n,m}$. Ясно, что

$$\frac{\partial W(t_{n,m})}{\partial m} = \Phi(t_{n,m}) - \Phi(s_{n,m}) + mf(t_{n,m}) \frac{\partial t_{n,m}}{\partial m} + (n+1-m)f(s_{n,m}) \frac{\partial s_{n,m}}{\partial m} \frac{\partial t_{n,m}}{\partial m}. \quad (44)$$

Учитывая (8), представим (44) в виде:

$$\frac{\partial W(t_{n,m})}{\partial m} = \Phi(t_{n,m}) - \Phi(s_{n,m}) + \frac{\partial t_{n,m}}{\partial m} f(t_{n,m}) [m + (n+1-m)s'(t_{n,m})]. \quad (45)$$

Выражение в квадратных скобках в (45) равно нулю в силу соотношения (40), тогда

$$\frac{\partial W(t_{n,m})}{\partial m} = \Phi(t_{n,m}) - \Phi(s_{n,m}). \quad (46)$$

Поскольку $t_N < t_{n,m} < t_M < s_{n,m}$, то из свойств потенциала $\Phi(x)$ (рис. 1) вытекает, что $\Phi(t_{n,m}) - \Phi(s_{n,m}) < 0$.

Таким образом, правая часть (46) отрицательна, т.е. значения энергии $W_{n,m}$ системы частиц, соответствующие точкам бифуркации, упорядочены: $W_{n,m} > W_{n,m+1}$.

7. Заключение

Первоначально мотивацией для выполнения данной работы было желание понять механизм формирования локальных минимумов потенциала модельной системы при гидростатическом растяжении. Механизм оказался довольно необычным: в нем существенно наличие линии точек тривиального решения, когда частицы равномерно распределены на отрезке, и линии точек, соответствующих нетривиальному решению. Но полученные в работе результаты о бифуркационном поведении потенциала системы взаимодействующих частиц можно использовать при рассмотрении поведения материала на разных масштабах. Обычно переход от одного масштаба рассмотрения к другому осуществляется с помощью некоторой процедуры усреднения [7–9]. Но принципиальный характер полученного в данной работе результата состоит в том, что бифуркационное поведение

потенциала не зависит от абсолютного значения масштабов задачи, а определяется лишь отношением значений внутреннего и внешнего масштабов модели. Как раз это отношение определяет значения управляющего параметра (4), при достижении которых происходит бифуркация. Если при усреднении потенциала взаимодействия его топология не изменяется, то бифуркационное поведение заведомо остается на следующем масштабе рассмотрения модели. Этот вывод служит косвенным подтверждением предположения [4] о существовании локальных минимумов термодинамического потенциала на разных масштабах.

Полученный результат также важен для компьютерных вычислений, в частности при использовании метода молекулярной динамики. В соответствии с общей идеей метода материал рассматривается как совокупность взаимодействующих частиц. Опыт реализации этого метода показал, что локальные характеристики парного взаимодействия частиц существенно влияют на структуру их многочастичного потенциала, значит, на структуру фазовых траекторий. Однако результат данной работы позволяет выделить потенциалы с указанными в п. 2 свойствами как класс эквивалентных.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 11-01-00357 и ДВО РАН № 12-П-СО-01М-001.

Литература

1. Панин В.Е., Гриняев Ю.В., Данилов В.И. и др. Структурные уровни пластической деформации и разрушения. – Новосибирск: Наука, 1990. – 255 с.
2. Ericksen J.L. Equilibrium of bars // J. Elasticity. – 1975. – V. 5. – P. 191–202.
3. Панин В.Е., Егорушкин В.Е. Деформируемое твердое тело как нелинейная иерархическая организованная система // Физ. мезомех. – 2011. – Т. 14. – № 3. – С. 7–26.
4. Панин В.Е., Егорушкин В.Е., Панин А.В. Эффект каналирования пластических сдвигов и нелинейные волны локализованной пластической деформации и разрушения // Физ. мезомех. – 2010. – Т. 13. – № 5. – С. 7–26.
5. Truskinovsky L. Fracture as a Phase Transition // Contemporary Research in the Mechanics and Mathematics of Materials / Ed. by R.S. Batra, M.S. Beatty. – Barselona: CIMNE, 1996. – P. 321–332.
6. Гузев М.А. Перестройка потенциала системы частиц при внешнем механическом воздействии // Дальневосточный математический журнал. – 2009. – Т. 9. – № 1–2. – С. 74–83.
7. Маслов В.П. Учет взаимодействия между частицами в новой теории нуклеации, квазичастицы, квантование вихрей и двухчастичная функция распределения // Математические заметки. – 2008. – Т. 83. – № 6. – С. 864–879.
8. Маслов В.П. Сравнение новой теории нуклеации с экспериментальными данными // Математические заметки. – 2008. – Т. 84. – № 1. – С. 149–152.
9. Маслов В.П. Термодинамика наноструктур // Математические заметки. – 2008. – Т. 84. – № 1. – С. 634–637.

Поступила в редакцию
01.03.2013 г.

Сведения об авторах

Гузев Михаил Александрович, д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН, дир. ИПМ ДВО РАН, guzev@iam.dvo.ru
Дмитриев Александр Алексеевич, к.ф.-м.н., гл. спец. ИПМ ДВО РАН, dmitriev@iam.dvo.ru