ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ
НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК АРМЕНИИ
NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA
ДОКЛАДЫ ԶԵԿՈՒՅՑՆԵՐ REPORTS

Հատոր Том Volume 120 2020 № 2

МЕХАНИКА

УДК 539.3

Член-корреспондент НАН РА С. О. Саркисян

Дискретно-континуальная и континуально-моментная модели графена для общего случая его деформирования

(Представлено 19/III 2020)

Ключевые слова: *наноматериал; графен; дискретно-континуальная, континуально-моментная модели.*

Введение. Бурное развитие в последние десятилетия нанотехнологий привело к необходимости математического моделирования наноматериалов для изучения их упругих и прочностных свойств [1-3]. Наличие наноматериалов типа графена и углеродной нанотрубки привело при построении дискретной модели к необходимости учета силового нецентрального и моментного независимого взаимодействия между их атомами [4, 5].

Исходя из этого в [6] построены дискретно-моментная и континуально-моментная (стержневая) модели для линейной цепочки атомов. В [7-10] к структурам нанометрового масштаба применен подход построения стержневой системы (дискретно-континуальной модели), эквивалентной атомной модели, а в качестве стержневой модели выбрана классическая модель упругих тонких стержней без учета или с учетом изгибной деформации. В [11] для деформаций графена в своей плоскости (при построении дискретно-континуальной модели) в качестве стержневой модели для стержневой системы, заменяющей атомную, выбрана континуальная-микрополярная стержневая модель, построенная в [6].

В данной статье рассмотрен общий случай деформаций графена. Для построения дискретно-континуальной и континуальной моделей графена в этом общем случае необходимо:

1) построить дискретную модель атомной линейной цепочки в общем случае ее деформации (сжатие – растяжение вдоль оси цепочки, изгиб в двух перпендикулярных плоскостях и кручение вокруг оси цепочки);

2) построить общую континуально-стержневую модель предельным переходом из дискретной модели цепочки атомов;

3) построить стержневую систему, заменяющую атомную (дискретно-континуальную) модель графена при общей его деформации, используя конинуально-стержневую модель линейной цепочки атомов;

4) построить континуальную модель графена при общей его деформации предельным переходом из дискретно-континуальной модели (модели стержневой системы, заменяющей атомную);

5) определить упругие постоянные моментной (микрополярной) теории упругости для графена через параметры его атомной структуры.

1. Дискретная модель атомной линейной цепочки в общем случае ее деформирования. Рассмотрим простейшую одномерную модель – линейную цепочку одинаковых атомов, расположенных на одинаковом расстоянии друг от друга (a). Будем считать, что каждый атом представляет собой тело [12], в данном случае шар, массой m, с собственным осевым моментом инерции I. Предположим, что силы и моменты, действующие на атомы цепочки и обусловленные влиянием других атомов, являются упругими, т.е. пропорциональными линейным или угловым отклонениям расстояний между взаимодействующими атомами от равновесных. Примем, что сказываются взаимодействия только между ближайшими соседями. Ось цепочки обозначим через ξ, а декартовы оси η и z расположим в перпендикулярной к ξ плоскости. Предположим, что цепочка подвергается растяжению – сжатию вдоль оси ξ, изгибаниям в плоскостях $\xi\eta$ и ξz, а также кручению вокруг оси ξ.

Рассмотрим атом под номером k. Действующие на него усилия нецентральные (поэтому их будем разлагать по оси координат), и кроме усилий на этот атом действуют независимые моменты. Действующие на него продольные силы (слева и справа) обозначим через $N^{(k)}$ и $N^{(k+1)}$, действующие при изгибе в плоскости $\xi\eta$ перерезывающие силы – через $Q_2^{(k)}$ и $Q_2^{(k+1)}$, а моменты – через $L_2^{(k)}$ и $L_2^{(k+1)}$. Перерезывающие силы при изгибе в плоскости ξz обозначим через $Q_3^{(k)}$ и $Q_3^{(k+1)}$, а моменты – через $L_3^{(k)}$ и $L_3^{(k+1)}$. Крутящие моменты вокруг оси ξ обозначим через $L_1^{(k)}$ и $L_1^{(k+1)}$.

Потенциал межатомного взаимодействия V примем в виде:

$$V = \frac{1}{2}\sum_k c_1\left(d_1^{(k)}\right)^2 + \frac{1}{2}\sum_k c_2\left(d_{21}^{(k)}\right)^2 + \frac{1}{2}\sum_k c_3\left(\theta_3^{(k)}\right)^2 + \\ + \frac{1}{2}\sum_k c_2\left(d_{31}^{(k)}\right)^2 + \frac{1}{2}\sum_k c_3\left(\theta_2^{(k)}\right)^2 + \frac{1}{2}\sum_k c_3\left(\theta_1^{(k)}\right)^2, \tag{1.1}$$

где

$$d_1^{(k)}=u_1^{(k+1)}-u_1^{(k)},\qquad d_{21}^{(k)}=\left(u_2^{(k+1)}-u_2^{(k)}\right)-\frac{1}{2}a\left(\omega_3^{(k+1)}+\omega_3^{(k)}\right),$$

$$\Theta_3^{(\mathrm{k})}=\omega_3^{(k+1)}-\omega_3^{(k)},\;\; d_{31}^{(k)}=\left(u_3^{(k+1)}-u_3^{(k)}\right)-\frac{1}{2}a\left(\omega_2^{(k+1)}+\omega_2^{(k)}\right),\tag{1.2}$$

$$\Theta_2^{(\mathrm{k})}=\omega_2^{(k+1)}-\omega_2^{(k)},\qquad \Theta_1^{(\mathrm{k})}=\omega_1^{(k+1)}-\omega_1^{(k)},$$

$c_i\left(i=1,2,3\right)-$ упругие параметры цепочки для соответствующих деформаций.

На основе (1.1) имеет место следующий закон упругости для указанной атомной структуры:

$$\begin{aligned} &N^{(k)}=c_1ae_{\xi\xi}^{(k)},\quad Q_2^{(k)}=c_2a\gamma_{\xi\eta}^{(k)},\qquad Q_3^{(k)}=c_2a\gamma_{\xi z}^{(k)},\\ &L_3^{(k)}=c_3a\chi_{\xi\eta}^{(k)},\quad L_2^{(k)}=c_3a\chi_{\xi z}^{(k)},\qquad L_1^{(k)}=c_3a\tau_{\xi\xi}^{(k)},\end{aligned}\tag{1.3}$$

где

$$\begin{aligned} &e_{\xi\xi}^{(k)}=\frac{u_1^{(k)}-u_1^{(k-1)}}{a},\quad \gamma_{\xi\eta}^{(k)}=\frac{u_2^{(k)}-u_2^{(k-1)}}{a}-\frac{1}{2}\left(\omega_3^{(k)}+\omega_3^{(k-1)}\right),\\ &\gamma_{\xi z}^{(k)}=\frac{u_3^{(k)}-u_3^{(k-1)}}{a}-\frac{1}{2}\left(\omega_2^{(k)}+\omega_2^{(k-1)}\right),\quad \chi_{\xi\eta}^{(k)}=\frac{\omega_3^{(k)}-\omega_3^{(k-1)}}{a},\\ &\chi_{\xi z}^{(k)}=\frac{\omega_2^{(k)}-\omega_2^{(k-1)}}{a},\quad \tau_{11}^{(k)}=\frac{\omega_1^{(k)}-\omega_1^{(k-1)}}{a},\end{aligned}\tag{1.4}$$

которые определяют деформации, сдвиги и кривизны-кручения между атомами.

Кинетическая энергия движения линейной цепочки атомов

$$\begin{aligned} K=\frac{1}{2}\sum_k\Bigg[&m\left(\frac{du_1^{(k)}}{dt}\right)^2+m\left(\frac{du_2^{(k)}}{dt}\right)^2+m\left(\frac{du_3^{(k)}}{dt}\right)^2+\\ &+I\left(\frac{d\omega_3^{(k)}}{dt}\right)^2+I\left(\frac{d\omega_2^{(k)}}{dt}\right)^2+I\left(\frac{d\omega_1^{(k)}}{dt}\right)^2\Bigg].\end{aligned}\tag{1.5}$$

Имея в виду формулу (1.1) для потенциальной энергии деформации и (1.5) для кинетической энергии движения, представим лагранжиан для линейной цепочки атомов:

$$L=K-V.\tag{1.6}$$

Тогда принцип Гамильтона можно сформулировать обычным образом:

$$\delta\int_{t_1}^{t_2}Ldt=\delta\int_{t_1}^{t_2}\left(K-V\right)dt=0.\tag{1.7}$$

Из принципа Гамильтона (1.7) следуют уравнения движения дискретной модели линейной атомной цепочки.

2. Одномерно-стержневая континуальная модель линейной цепочки атомов в случае ее общего деформирования. Для построения континуальной модели линейной цепочки атомов при общем случае ее деформирования лагранжиан (1.7) дискретной модели представим в специальной форме и осуществим предельный переход, когда $a \to 0$.

В результате предельного перехода приходим к лагранжиану континуальной модели:

$$L = \frac{1}{2}\int_0^\ell \left\{\left[\widetilde{\rho}\left(\frac{\partial u_1}{\partial t}\right)^2 + \widetilde{\rho}\left(\frac{\partial u_2}{\partial t}\right)^2 + \widetilde{\rho}\left(\frac{\partial u_3}{\partial t}\right)^2 + \widetilde{I}\left(\frac{\partial \omega_3}{\partial t}\right)^2 + \widetilde{I}\left(\frac{\partial \omega_2}{\partial t}\right)^2 + \widetilde{I}\left(\frac{\partial \omega_1}{\partial t}\right)^2\right] - \right. \tag{2.1}$$
$$\left. - \left(\widetilde{c}_1 \varepsilon_{\xi\xi}^2 + \widetilde{c}_2 \gamma_{\xi\eta}^2 + \widetilde{c}_2 \gamma_{\xi z}^2 + \widetilde{c}_3 \chi_{\xi\eta}^2 + \widetilde{c}_3 \chi_{\xi z}^2 + \widetilde{c}_4 \tau_{\xi\xi}^2\right)\right\} d\xi.$$

Здесь

$$e_{\xi\xi} = \frac{\partial u_1}{\partial \xi} = \lim_{a\to 0}\frac{u_1^{(k)} - u_1^{(k-1)}}{a},$$
$$\gamma_{\xi\eta} = \frac{\partial u_2}{\partial \xi} - \omega_3 = \lim_{a\to 0}\left[\frac{u_2^{(k)} - u_2^{(k-1)}}{a} - \frac{1}{2}\left(\omega_3^{(k)} + \omega_3^{(k-1)}\right)\right], \tag{2.2}$$
$$\gamma_{\xi z} = \frac{\partial u_3}{\partial \xi} - \omega_2 = \lim_{a\to 0}\left[\frac{u_3^{(k)} - u_3^{(k-1)}}{a} - \frac{1}{2}\left(\omega_2^{(k)} + \omega_2^{(k-1)}\right)\right],$$
$$\chi_{\xi\eta} = \frac{\partial \omega_3}{\partial \xi} = \lim_{a\to 0}\frac{\omega_3^{(k)} - \omega_3^{(k-1)}}{a},\ \chi_{\xi z} = \frac{\partial \omega_2}{\partial \xi} = \lim_{a\to 0}\frac{\omega_2^{(k)} - \omega_2^{(k-1)}}{a},$$
$$\tau_{\xi\xi} = \frac{\partial \omega_1}{\partial \xi} = \lim_{a\to 0}\frac{\omega_1^{(k)} - \omega_1^{(k-1)}}{a},$$

$$\widetilde{\rho} = \lim_{a\to 0}\frac{m}{a},\quad \widetilde{I} = \lim_{a\to 0}\frac{I}{a},\quad \widetilde{I}_0 = \lim_{a\to 0}\frac{I_0}{a}, \tag{2.3}$$

$\widetilde{\rho}$ – линейная плотность массы цепочки; $\widetilde{I}$ – линейная плотность ее осевого момента инерции, $\varepsilon_{\xi\xi}$ – относительная продольная деформация; $\gamma_{\xi\eta}$ – сдвиговая деформация в плоскости $\xi\eta$; $\gamma_{\xi z}$ – сдвиговая деформация в плоскости ξz; $\chi_{\xi\eta}$ – кривизна оси цепочки в плоскости $\xi\eta$; $\chi_{\xi z}$ – кривизна оси цепочки в плоскости ξz; $\tau_{\xi\xi}$ – относительный угол закручивания.

На основе принципа Гамильтона (1.7), когда лагранжиан имеет вид (2.1), можем получить уравнения движения континуальной модели линейной атомной цепочки:

$$\frac{\partial N}{\partial x} = \widetilde{\rho}\,\frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2}, \tag{2.4}$$

$$\frac{\partial Q_2}{\partial \xi} = \tilde{\rho}\frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2}, \quad \frac{\partial L_3}{\partial \xi} + Q_2 = \tilde{I}\,\frac{\partial^2 \omega_3}{\partial t^2}, \tag{2.5}$$

$$\frac{\partial Q_3}{\partial \xi} = \tilde{\rho}\frac{\partial^2 u_3}{\partial t^2}, \quad \frac{\partial L_2}{\partial \xi} + Q_3 = \tilde{I}\,\frac{\partial^2 \omega_2}{\partial t^2}, \tag{2.6}$$

$$\frac{\partial L_1}{\partial \xi} = \tilde{I}\,\frac{\partial^2 \omega_1}{\partial t^2}. \tag{2.7}$$

Уравнение (2.4) представляет собой уравнение продольного колебания; уравнения (2.5) – уравнения изгибных колебаний в плоскости $\xi\eta$; уравнения (2.6) – уравнения изгибных колебаний в плоскости ξz; уравнение (2.7) – уравнение крутильных колебаний вокруг оси ξ.

Предельным переходом от уравнений закона упругости (1.3) дискретной модели получим соотношения упругости для континуальной модели:

$$\begin{aligned} &N = \tilde{c}_1 e_{\xi\xi}, \quad Q_2 = \tilde{c}_2 \gamma_{\xi\eta}, \quad Q_3 = \tilde{c}_2 \gamma_{\xi z}, \\ &L_3 = \tilde{c}_3 \chi_{\xi\eta}, \quad L_2 = \tilde{c}_3 \chi_{\xi z}, \quad L_1 = \tilde{c}_4 \tau_{\xi\xi}, \end{aligned} \tag{2.8}$$

где

$$\begin{aligned} &e_{\xi\xi} = \frac{\partial u_1}{\partial \xi}, \quad \gamma_{\chi\eta} = \frac{\partial u_2}{\partial \xi} - \omega_3, \quad \gamma_{\xi z} = \frac{\partial u_3}{\partial \xi} - \omega_2, \\ &\chi_{\xi\eta} = \frac{\partial \omega_3}{\partial \xi}, \quad \chi_{\xi z} = \frac{\partial \omega_2}{\partial \xi}, \quad \tau_{11} = \frac{\partial \omega_1}{\partial \xi}, \end{aligned} \tag{2.9}$$

последние получаются предельным переходом от уравнений (1.4)

Система уравнений движения (2.4)-(2.7), соотношения упругости (2.8) и геометрические соотношения (2.9) представляют собой основные уравнения континуальной модели линейной атомной цепочки при общем случае ее деформирования. Все функции в этих уравнениях представляют собой функции двух переменных (ξ, t).

К указанной системе уравнений следует присоединить начальные и краевые условия. При начальных условиях следует задавать значения $u_i, \dfrac{\partial u_i}{\partial t}, \omega_i, \dfrac{\partial \omega_i}{\partial t} \left(i = 1,2,3\right)$ при $t = 0$.

Граничные условия вытекают из принципа Гамильтона.

Если край континуально-стержневой модели защемлен, то будут иметь место следующие граничные условия:

$$u_i = 0, \quad \omega_i = 0 \quad (i = 1,2,3); \tag{2.10}$$

если же край свободен, то $N = 0, \quad Q_i = 0 \quad (i = 2,3), \quad L_i = 0 \quad (i = 1,2,3).$ (2.11)

Могут иметь место граничные условия смешанного типа.

Следует отметить, что уравнения (2.4)-(2.9) представляют континуальные уравнения моментной теории упругости с независимыми полями перемещений и вращений в одномерном случае (т.е. для стержня). Частный вид этих уравнений (при изгибаниях в одной плоскости) приведен в [13].

3. Построение дискретно-континуальной модели (стержневой системы, заменяющей атомную) и континуальной модели для общего случая деформирования графена. Рассмотрим графен (двумерный материал, рис. 1), считая, что каждый атом взаимодействует лишь с ближайшими соседними атомами.

Предлагаемая конкретная механическая модель упругой связи между атомами графена – модель упругого стержня, работающая на сжатие – растяжение, сдвиг и изгиб в двух перпендикулярных плоскостях и кручение, которая построена в разделе 2 данной работы (уравнения (2.4)-(2.9)).

Потенциальная энергия деформации и кинетическая энергия движения указанной модели упругого стержня имеют вид (см. формулу (2.1)):

$$U = \frac{1}{2}\int_0^a \left(\tilde{c}_1 e_{\xi\xi}^2 + \tilde{c}_2 \gamma_{\xi\eta}^2 + \tilde{c}_3 \gamma_{\xi z}^2 + \tilde{c}_3 \chi_{\xi\eta}^2 + \tilde{c}_3 \chi_{\xi z}^2 + \tilde{c}_4 \tau_{\xi\xi}^2\right) d\xi, \quad (3.1)$$

$$K = \frac{1}{2}\int_0^a \left[\tilde{\rho}\left(\frac{\partial u_1}{\partial t}\right)^2 + \tilde{\rho}\left(\frac{\partial u_2}{\partial t}\right)^2 + \tilde{\rho}\left(\frac{\partial u_3}{\partial t}\right)^2 + \tilde{I}\left(\frac{\partial \omega_3}{\partial t}\right)^2 + \tilde{I}\left(\frac{\partial \omega_2}{\partial t}\right)^2 + \tilde{I}\left(\frac{\partial \omega_1}{\partial t}\right)^2\right] d\xi, \quad (3.2)$$

где $e_{\xi\xi}, \gamma_{\xi\eta}, \gamma_{\xi z}, \chi_{\xi\eta}, \chi_{\xi z}$ и $\tau_{\xi\xi}$ – выражаются формулами (2.3). Отметим, что ось ξ – это ось стержня (вдоль которой имеем растяжение-сжатие), в плоскостях $\xi\eta$ и ξz происходят сдвиговые и изгибные деформации, а вокруг оси ξ происходит кручение. В этом случае для коэффициентов $c_i (i = 1,2,3,4)$ в формуле (3.1) будем считать, что они представляют собой упругие параметры именно для атомной структуры графена.

Для дальнейшего изучения общей деформации графена можно развить два подхода:

а) дискретно-континуальный. В этом случае в ячейке периодичности представим выходящие из рассматриваемой точки к наиболее близким атомам три стержня, которые обладают потенциальной энергией деформации вида (3.1) и кинетической энергией движения вида (3.2). Далее представим, что рассматриваемая область графена покрыта такой стержневой системой, которая и будет дискретно-континуальной моделью графена. Для изучения деформаций графена необходимо разработать соответствующий подход к применению метода конечных элементов для одного стержня, потом для ячейки периодичности и, далее, для рассматриваемой области графена в целом с учётом соответствующих граничных условий;

б) континуальный. В этом случае необходимо исходя из построенной задачи построить на ячейке предельным переходом континуальную модель для деформаций графена, и, далее, конкретные деформационные задачи для графена изучать на основе решения соответствующих граничных задач этой континуальной модели.

Отметим, что основной целью данной работы являются, во-первых, построение континуальной модели для изучения общих деформационных задач графена и, во-вторых, сравнение построенной континуальной модели деформаций графена с прикладной моделью тонких пластин по моментной (микрополярной) теории упругости и определение всех упругих постоянных моментной теории упругости. Подходу а) будет посвящена отдельная работа.

Потенциальная энергия деформаций и кинетическая энергия движения для ячейки периодичности (рис. 2) выражаются формулами

$$U=\sum_{k=1}^{3}U_k, \qquad K=\sum_{k=1}^{3}K_k, \tag{3.3}$$

где U_k и K_k – потенциальная и кинематическая энергии k-го стержня $(k=1,2,3)$, которые определяются формулами (3.1), (3.2):

$$U_k=\frac{1}{2}\int_0^a\left(\tilde{c}_1 e^2_{\xi_k\xi_k}+\tilde{c}_2\gamma^2_{\xi_k\eta_k}+\tilde{c}_2\gamma^2_{\xi_k z}+\tilde{c}_3\chi^2_{\xi_k\eta_k}+\tilde{c}_3\chi^2_{\xi_k z}+\tilde{c}_4\tau^2_{\xi_k\xi_k}\right)d\xi_k, \tag{3.4}$$

$$K_k=\frac{1}{2}\int_0^a\left[\tilde{\rho}\left(\frac{\partial u_1}{\partial t}\right)^2_k+\tilde{\rho}\left(\frac{\partial u_2}{\partial t}\right)^2_k+\tilde{\rho}\left(\frac{\partial u_3}{\partial t}\right)^2_k+\tilde{I}\left(\frac{\partial \omega_3}{\partial t}\right)^2_k+\tilde{I}\left(\frac{\partial \omega_2}{\partial t}\right)^2_k\tilde{I}\left(\frac{\partial \omega_1}{\partial t}\right)^2_k\right]d\xi_k. \tag{3.5}$$

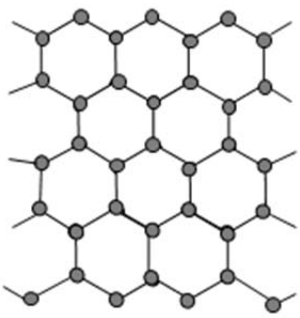

Рис. 1. Графен.

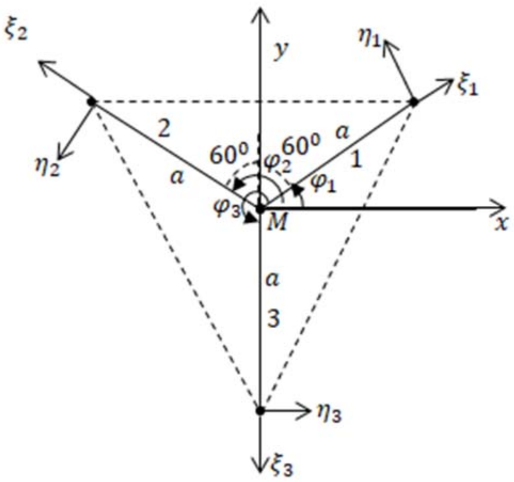

Рис. 2. Ячейка периодичности графена. *M* – рассматриваемая точка.

Здесь следует иметь в виду (рис.2), что система координат (ξ_κ,η_k), связанная с k-м стержнем, расположена в плоскости графена (x,y).

Подход при осуществлении предельного перехода к континуальной модели деформирований графена состоит в следующем.

Сначала определим приближенные выражения для общей потенциальной и кинетической энергии ячейки периодичности суммированием по индексу k средних значений интегралов (3.4), (3.5). Приближенное значение поверхностной интенсивности каждой из указанных энергий получим делением среднего значения соответствующей суммарной энергии на площадь ячейки периодичности $s\left(s=\dfrac{3\sqrt{3}a^2}{4}\right)$. После предельного перехода $(a\to 0)$ для континуальной теории получим выражения поверхностных интенсивностей потенциальной и кинетической энергии в данной точке плоскости графена $M\,(x,\,y)$.

В результате указанных преобразований для поверхностных плотностей потенциальной энергии деформации и кинематической энергии движения континуальной модели графена (при общем случае его деформирования) получим:

$$
\begin{aligned}
U_0 = \frac{1}{2}\frac{4\sqrt{3}}{9}\Bigg\{&\left(\frac{9}{8}c_1+\frac{3}{8}c_2\right)e_{xx}^2+\left(\frac{9}{8}c_1+\frac{3}{8}c_2\right)e_{yy}^2+\left(\frac{3}{4}c_1-\frac{3}{4}c_2\right)e_{xx}e_{yy}+\\
&+\left(\frac{3}{8}c_1+\frac{9}{8}c_2\right)\gamma_{xy}^2+\left(\frac{3}{8}c_1+\frac{9}{8}c_2\right)\gamma_{yx}^2+\left(\frac{3}{4}c_1-\frac{3}{4}c_2\right)\gamma_{xy}\gamma_{yx}+\\
&+\frac{3}{2}c_3\chi_{xz}^2+\frac{3}{2}c_3\chi_{yz}^2+\frac{3}{2}c_2\gamma_{xz}^2+\frac{3}{2}c_2\gamma_{yz}^2+\left(\frac{3}{8}c_3+\frac{9}{8}c_4\right)\chi_{xx}^2+\left(\frac{3}{8}c_3+\frac{9}{8}c_4\right)\chi_{yy}^2+\\
&+\left(-\frac{3}{4}c_3+\frac{3}{4}c_4\right)\chi_{xx}\chi_{yy}+\left(\frac{9}{8}c_3+\frac{3}{8}c_4\right)\chi_{xy}^2+\left(\frac{9}{8}c_3+\frac{3}{8}c_4\right)\chi_{yx}^2+\\
&\left(-\frac{3}{4}c_3+\frac{3}{4}c_4\right)\chi_{xy}\chi_{yx}\Bigg\},
\end{aligned}
\tag{3.6}
$$

$$
\begin{aligned}
K_0=\frac{1}{2}\Bigg\{&\left[\rho_0\left(\frac{\partial u_x}{\partial t}\right)^2+\rho_0\left(\frac{\partial u_y}{\partial t}\right)^2+\rho_0\left(\frac{\partial u_z}{\partial t}\right)^2\right]+\\
&+\left[I_0\left(\frac{\partial \omega_x}{\partial t}\right)^2+I_0\left(\frac{\partial \omega_y}{\partial t}\right)^2+I_0\left(\frac{\partial \omega z}{\partial t}\right)^2\right]\Bigg\},
\end{aligned}
\tag{3.7}
$$

где ρ_0 – поверхностная плотность массы, I_0 – поверхностная плотность осевого момента инерции графена.

Отметим, что все функции, участвующие в выражениях (3.6) и (3.7), являются функциями от $(x,\,y,\,t)$.

Таким образом, выражения (3.6) и (3.7) представляют собой поверхностные плотности потенциальной энергии деформации и кинетической энергии движения графена в рамках континуальной модели (в общем случае его деформирования). Вариационное уравнение Гамильтона для графена в рамках построенной континуальной модели можем представить так: $\delta\iint\limits_{(S)}(K_0-U_0)dxdy=0,$ где $(S)-$ область, занятая графеном.

Отметим, что из указанного вариационного уравнения Гамильтона следуют отдельные уравнения движения и граничные условия для двух моделей:

а) плоское напряжённое состояние графена в своей области деформирования;

б) изгиб графена от своей плоскости.

4. Модели плоского напряженного состояния и изгибной деформации моментной теории упругости с независимыми полями перемещений и вращений для тонкой пластинки. Определение упругих постоянных моментной теории упругости через параметры атомной структуры графена. Рассмотрим случаи а) и б) по отдельности. Отметим, что в [14] построены прикладные теории обобщенного плоского напряженного состояния и изгибной деформации пластин на основе моментной теории упругости.

Расмотрим случай а). Сравнивая формулы (3.6), (3.7) с аналогичными формулами из [14] для обобщенного плоского напряженного состояния, получим следующие равенства:

$$\begin{gathered}\frac{4\sqrt{3}}{9a}\left(\frac{9}{8}c_1+\frac{3}{8}c_2\right)=\frac{E}{1-\nu^2},\ \frac{4\sqrt{3}}{9a}\left(\frac{3}{4}c_1-\frac{3}{4}c_2\right)=\frac{2E\nu}{1-\nu^2},\\ \frac{4\sqrt{3}}{9a}\left(\frac{3}{8}c_1+\frac{9}{8}c_2\right)=\mu+\alpha,\\ \frac{4\sqrt{3}}{9a}\left(\frac{3}{4}c_1-\frac{3}{4}c_2\right)=2(\mu-\alpha),\qquad \frac{4\sqrt{3}}{9a}\cdot\frac{3}{2}c_3=B.\end{gathered} \tag{4.1}$$

Разрешив систему уравнений (4.1) относительно E,ν,μ,α и $B,$ имеем:

$$\begin{gathered}E=\frac{4\sqrt{3}}{3a}\cdot\frac{c_1(c_1+c_2)}{3c_1+c_2},\ \ \mu=\frac{\sqrt{3}}{6a}\cdot(c_1+c_2),\ \ \alpha=\frac{\sqrt{3}}{3a}\cdot c_2,\\ \nu=\frac{c_1-c_2}{3c_1+c_2},\ \ B=\frac{2\sqrt{3}}{3a}\cdot c_3.\end{gathered} \tag{4.2}$$

Равенства (4.2) определяют упругие постоянные плоского напряженного состояния моментной теории упругости через постоянные атомной структуры графена. Отметим, что соответствующие равенства из (4.2) обеспечивают известное равенство $\mu=\dfrac{E}{2(1+\nu)}$. Случай деформации графена в своей плоскости отдельно рассмотрен в [11].

Рассмотрим случай б). Сравнивая формулы (3.6) (в случае изгиба) и (3.7) с аналогичными формулами из [14], для изгибной деформации получим следующие равенства:

$$\frac{4\sqrt{3}}{9a}\left(\frac{3}{8}c_3+\frac{9}{8}c_4\right)=\frac{4\gamma(\beta+\gamma)}{\beta+2\gamma},$$

$$\frac{4\sqrt{3}}{9a}\left(-\frac{3}{4}c_3+\frac{3}{4}c_4\right)=\frac{4\beta\gamma}{\beta+2\gamma}, \tag{4.3}$$

$$\frac{4\sqrt{3}}{9a}\left(\frac{9}{8}c_3+\frac{3}{8}c_4\right)=\gamma+\varepsilon,\quad \frac{4\sqrt{3}}{9a}\left(-\frac{3}{4}c_3+\frac{3}{4}c_4\right)=2(\gamma-\varepsilon),\quad \frac{4\sqrt{3}}{9a}\cdot\frac{3}{2}c_2=C.$$

Из системы уравнений (4.3) определяются значения упругих постоянных γ,ε,β и C:

$$\gamma=\frac{\sqrt{3}}{6a}(c_3+c_4),\quad \varepsilon=\frac{\sqrt{3}}{3a}c_3,\quad \beta=\frac{\sqrt{3}}{3a}\frac{c_4^2-c_3^2}{3c_3+c_4},\quad \mathrm{C}=\frac{2\sqrt{3}}{3a}c_2. \tag{4.4}$$

Отметим, что при изучении моментной теории упругости с независимыми полями перемещений и вращений всегда подразумевалось, что между γ,ε и β должна быть определенная связь, как между $\mu,E,\nu\left(\mu=\dfrac{E}{2(1+\nu)}\right)$, но в литературе определения такой связи мы не встречали. В данной работе приводится выражение этой связи для структуры графена:

$$\beta=\frac{\gamma-\varepsilon}{\gamma+\varepsilon}2\gamma. \tag{4.5}$$

Ширакский государственный университет им М. Налбандяна
e-mail: s_sargsyan@yahoo.com

Член-корреспондент НАН РА С. О. Саркисян

Дискретно-континуальная и континуально-моментная модели графена для общего случая его деформирования

Построены дискретная и континуальная (стержневая) модели линейной атомной цепочки, при этом считается, что силовое взаимодействие между атомами нецентральное и, кроме того, существует также независимое моментное взаимодействие. С помощью континуально-стержневой (микрополярной) модели линейной атомной цепочки взаимодействие между атомами в графене заменено взаимодействием со стержневой системой. Таким образом, получена дискретно-континуальная модель графена. На основе такой модели предельным переходом построена континуально-моментная модель графена, которая представляет собой модель плоского напряжённого состояния пластинки и модель изгиба пластинки по микрополярной теории упругости с независимыми полями перемещений и вращений. Определены упругие постоянные для этих континуально-моментных моделей.

ՀՀ ԳԱԱ թղթակից անդամ Ս. Հ. Սարգսյան

Գրաֆենի ընդհանուր դեֆորմացիայի դեպքում նրա դիսկրետ-կոնտինուալ և կոնտինուալ-մոմենտային մոդելները

Կառուցված է ատոմների գծային շղթայի և՛ դիսկրետ, և՛ կոնտինուալ (ձողային) մոդելները՝ համարելով, որ ատոմների միջև փոխազդեցությունը ուժային տեսակետից ոչ կենտրոնական է, և բացի այդ առկա է նաև անկախ մոմենտային փոխազդեցություն: Օգտագործելով ատոմային գծային շղթայի կոնտինուալ ձողային մոդելը (միկրոպոլյար)՝ գրաֆենի ատոմների միջև փոխազդեցությունները փոխարինվում են նման ձողերից բաղկացած ձողային համակարգով, որը գրաֆենի դիսկրետ-կոնտինուալ մոդելն է: Սահմանային անցման միջոցով այս բնույթի մոդելի հիման վրա կառուցվում է գրաֆենի կոնտինուալ մոդելը, որը սալի ազատ պտույտներով միկրոպոլյար առաձգականության հարթ լարվածային վիճակի և ծռման դեֆորմացիայի մոդել է: Որոշվում են կոնտինուալ-մոմենտային այս մոդելների առաձգական հաստատունները:

Corresponding member of NAS RA S. H. Sargsyan

Discrete-Continual and Continual-Moment Models of Graphene for the General Case of Its Deformation

In this paper, at first, discrete and continual (beam) models of linear atomic chain are constructed, assuming that the force interaction between the atoms is non central and, in addition, there is also an independent moment interaction. Using the continual-beam (micropolar) model of the linear atomic chain, the interaction between the atoms in graphene is replaced by the interaction of the beam system. Thus, discrete-continual graphene model is obtained. Based on this model, the continual – moment model of graphene is constructed by the limit transition, which is a model of a plane stress state of a plate and a model of plate bending according to the micropolar theory of elasticity with independent fields of displacements and rotations. The elastic constants for these continual-moment models are determined.

Литература

1. *Панин В. Е.* (ред.) Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов. В 2-х томах. Новосибирск. Наука. Т. 1.1995. 298 с.; Т. 2. 1995. 320 с.
2. *Морозов Н. Ф.* – Механика твердого тела. 2005. № 4. С. 188-189.
3. *Кривцов А. М.* Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М. Физматлит. 2007. 304 с.

4. *Иванова Е. А., Кривцов А. М., Морозов Н. Ф.* – Прикладная математика и механика. 2007. Т. 71. Вып. 4. С. 595-615.
5. *Кривцов А. М.* Теоретическая механика. Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов. СПб. Изд-во Политехн. ун-та. 2009. 127 с.
6. *Саркисян С. О.* – Доклады НАН РА. 2019. Т. 119. № 1. С. 40-50.
7. *Odegard G. M., Gates T. S., Nicholson L. M. et al.* – NASA Langley Research Center: Technical Memorandum NASA/TM-2001-210863. 2001.
8. *Гольдштейн Р. В., Ченцов А. В.* – Изв. РАН. Механика твердого тела. 2005. № 4. С. 57-74.
9. *Li C. A., Chou T. W.* – Int. J. Solids Struct. 2003. V. 40. P. 2487-2499.
10. *Беринский И. Е.* – Научно-техн. ведомости СПбГПУ. 2010. № 104. С. 13-20.
11. *Саркисян С. О.* – Физическая мезомеханика. 2019. Т. 22. № 5. С. 28-33.
12. *Жилин П. А.* Теоретическая механика. Фундаментальные законы механики. Изд-во СПбГПУ. 2003. 340 с.
13. *Саркисян С. О.* – Физическая мезомеханика. 2008. Т. 11. № 5. С. 41-54.
14. *Саркисян С. О.* – Прикладная математика и механика. 2008. Т. 72. № 1. С. 129-147.