

**МОДЕЛЬ И РАСЧЁТ СОБСТВЕННЫХ КОЛЕБАНИЙ ГРАФЕНА НА ОСНОВЕ
МОМЕНТНО-МЕМБРАННОЙ ТЕОРИИ УПРУГОЙ ПЛАСТИНКИ**

Саркисян С.О., Саркисян Л.С., Жамакочян К.А.

Ключевые слова: лист графена, моментно-мембранная теория пластинки, метод конечных элементов, изгиб, собственные колебания.

Sargsyan S.H., Sargsyan L.S., Zhamakochyan K.A.
**Model and calculation of natural vibrations of graphene based on
the moment-membrane theory of an elastic plate**

Key words: graphene sheet, moment-membrane theory of a plate, finite element method, bending, natural vibrations.

In the present paper a moment-membrane linear dynamic theory of plane stress state and transverse bending of elastic plates is presented as continual theories of the deformation behavior of a graphene sheet. In solutions of these problems of a graphene sheet a finite element method is developed, based on the variational formulation of the corresponding problems. The theory and basic relations of a rectangular finite element are presented for calculating natural vibrations of a graphene sheet (rectangular plate). Based on this theory the problem of natural vibrations of transverse bending of a graphene sheet is specifically considered. The questions of practical convergence of the solution and assessment of the accuracy of the finite element method are discussed.

Սարգսյան Ս.Հ., Սարգսյան Լ.Ս., Շամակոչյան Կ.Ա.
**Գրաֆենի սեփական տատանումների մոդելը և հաշվարկը առաձգական սալի մոմենտա-
մեմբրանային տեսության հիման վրա**

Հիմնաբառեր: գրաֆենային շերտ, սալի մոմենտա-մեմբրանային տեսություն, վերջավոր տարրերի մեթոդ, ծռում, սեփական տատանումներ:

Աշխատանքում ներկայացվում է առաձգական սալի հարթ լարվածային վիճակի և լայնական ծռման դինամիկայի մոմենտա-մեմբրանային գծային տեսությունը՝ որպես գրաֆենային շերտի դեֆորմացիոն վարքագծի կոնտինուալ տեսություն: Գրաֆենային շերտի այդ խնդիրների լուծումներում մշակվել է վերջավոր տարրերի մեթոդը՝ հիմնված համապատասխան խնդիրների վարիացիոն ձևակերպման վրա: Գրաֆենային շերտի (ուղղանկյուն սալի) սեփական տատանումների հաշվարկման համար ներկայացվում է ուղղանկյուն վերջավոր տարրի տեսությունը և հիմնական առնչությունները: Այս տեսության հիմքի վրա դիտարկվում է մասնավորապես գրաֆենային շերտի լայնական ծռման սեփական տատանումների խնդիրը: Քննարկվում են լուծման գործնական զուգամիտության և վերջավոր տարրերի մեթոդի ճշտության գնահատման հարցերը:

В работе изложена моментно-мембранная линейная динамическая теория плоского напряжённого состояния и поперечного изгиба упругих пластин как континуальная теория деформационного поведения листа графена. В решении указанных задач листа графена развивается метод конечных элементов, основанного на вариационной постановке соответствующих задач. Изложены теория и основные соотношения прямоугольного конечного элемента для расчёта задач собственных колебаний листа графена (прямоугольной пластинки). На основе указанной теории конкретно рассмотрена задача о собственных

колебаниях поперечного изгиба листа графена. Обсуждены вопросы практической сходимости решения, оценки точности метода конечных элементов.

Введение. Анализ развития науки и техники (начиная с последней четверти XX века) свидетельствует о том, что наибольший прогресс связан с проникновением технологий на микро- и наноразмер. Важной составляющей нанотехнологии является разработка наноструктурных (нанокристаллических) материалов [1-2 и др.].

Следует констатировать, что кроме экспериментальных исследований, численное моделирование становится важным инструментом при изучении любых наноматериалов.

Если попытаться обозначить основные численные методы для многочастичных систем, то они главным образом сводятся к следующим: квантово-теоретические расчёты из первых принципов (*ab initio*), методы молекулярной динамики и методы молекулярной структурной механики.

Распространённые пакеты программ *ab initio* активно используются в квантовой физике, химии, биологии [3, 4 и др.]. В настоящее время появление мощных (терафлопсных) параллельных вычислительных машин делает возможным осуществлять новый шаг в развитии пакетов программ *ab initio*.

При атомистическом (молекулярном) моделировании (т.е. при применении метода молекулярной динамики [5, 6 и др.]) электронные степени свободы исчезают, а атомы представляются в виде твёрдых шариков, взаимодействующих друг с другом посредством эффективных потенциалов. Силовые поля при этом (в классическом понимании) являются парными (двухчастичными) и силы взаимодействия между двумя атомами - центральными. Если приближение двухчастичного взаимодействия даёт разумное описание свойств многоатомной системы, то расчёт методом молекулярной динамики будет представлять собой компьютерный эксперимент, при этом на каждом временном шаге будет доступна полная информация о системе (положение и скорость всех частиц).

Среди распространённых наноматериалов особо выделяются углеродные двумерные наноматериалы: однослойная нанотрубка и графен [7-9 и др.]. Общим термином их называют углеродные каркасные структуры [7] - это новые аллотропические формы углерода.

Существенно отметить (в этом легко убедиться), что парное силовое моделирование неприменимо в случае двумерных наноматериалов (т.е. для графена и однослойной углеродной нанотрубки). В связи с этим обстоятельством, в работах [10-12] было осуществлено весьма существенное заключение о том, что только существование двумерных наноматериалов свидетельствует, что в соответствующей кристаллической решётке взаимодействие между атомами и силовое и моментное, кроме того, в этих же работах, трёхмерная моментная теория упругости с независимыми полями перемещений и вращений установлена как континуальная теория деформационного поведения двумерных наноматериалов.

Следует констатировать ещё одно весьма важное обстоятельство о том, что для двумерных наноматериалов понятие толщины (либо объёма) - неоднозначное понятие [13].

Традиционно для моделирования ковалентных связей (ковалентные связи характерны также для двумерных наноматериалов) используются многочастичные потенциалы взаимодействия. Многочастичные потенциалы, учитывающие углы между

связями, для моделирования углеродных соединений были предложены в [14, 15], а затем в [16-19 и др.].

Структура каркасного типа для двумерных наноматериалов при малых деформациях даёт возможность моделировать их как на дискретном (атомном) - на низшем масштабе, так и континуальном - на высшем масштабе. Это так называемая модель многостержневой системы (дискретно-континуальное моделирование, либо, моделирование на основе метода молекулярной структурной механики) [20-26 и др.]. Таким образом, регулярность атомной структуры двумерных наноматериалов даёт возможность заменить систему атомов эквивалентной моделью упругих стержней (можно предполагать, что эту стержневую систему в макромасштабе можно заменить сплошной средой), переходя к континуальной модели двумерного наноматериала.

В настоящее время при помощи экспериментов для нанообразований [27, 28 и др.], в основном для двумерных наноматериалов, определяются модуль Юнга, коэффициент Пуассона и другие параметры и коэффициенты, характерные для континуальной среды. Аналогично имеет место и при теоретических исследованиях. При теоретических исследованиях применяется подход Коши-Борна [29] с привлечением потенциалов межатомного взаимодействия конкретной структуры (например потенциал Терзоффа-Бреннера [14, 15]). При таком подходе проводится как-бы усреднение свойств и дискретная среда заменяется континуальной средой, о чём свидетельствует полученная информация о модуле Юнга, коэффициенте Пуассона, плотности материала и т.д. - параметрах и коэффициентах, характерных для континуальной среды. Такие исследования свидетельствуют также о важности построения самой континуальной модели для двумерного наноматериала с определением всех параметров, соответствующих континуальному представлению.

При применении для двумерного наноматериала модели многостержневой системы и, в дальнейшем, переходе к континуальной модели, необходимо иметь ввиду заранее известные следующие проблематичные обстоятельства: 1) только существование такого материала свидетельствует о необходимости, кроме силового, учёта также моментного взаимодействия между атомами в соответствующей атомной кристаллической решётке [10, 12], 2) для двумерного наноматериала понятие толщины - неоднозначное понятие [13] (т.е. при моделировании не следует использовать понятие толщины). Последнее обстоятельство также означает, что как упругие стержневые модели, классические модели Кирхгофа либо Тимошенко неприменимы.

В работах [30, 31] обсуждаются основные этапы построения континуальной теории деформационного поведения листа графена, начиная изучение с его дискретной атомной кристаллической структуры.

- Построение стержневой модели.
Рассматривая линейную атомную цепочку, когда взаимодействие между атомами и силовое и моментное, построена сначала её дискретная модель, далее, предельным переходом, также и континуально-стержневая её модель.
- С помощью этой стержневой модели построена стержневая системная модель для кристаллической решётки графена и предельным переходом – континуальная модель деформации графена с установлением выражений поверхностных плотностей потенциальной энергии деформации и кинетической энергии движения.
- Основываясь на энергетическом подходе, проведено сравнение этой континуальной модели графена с ранее построенной моментно-мембранной теорией упругой пластинки [32, 33], численно определяются упруго-жесткостные

характеристики указанной теории пластин при помощи физических параметров потенциала межатомных взаимодействий для углерода (которые в литературе известны). Таким образом, моментно-мембранная теория упругой пластинки с численно определёнными упруго-жесткостными характеристиками устанавливается как континуальная теория деформационного поведения графена.

- Аналогично, в работе [34], моментно-мембранная теория упругих цилиндрических оболочек установлена как континуальная теория деформационного поведения однослойной углеродной нанотрубки.

1. Моментно-мембранная линейная теория динамики упругих тонких пластин. Следует отметить, что моментно-мембранная линейная теория оболочек [32,33] построены на основе трёхмерной моментной теории упругости с независимыми полями перемещений и вращений принятием определённых гипотез (основная кинематическая гипотеза означает, что все компоненты вектора перемещения и вектора свободного поворота не зависят от координаты, т.е. все они равномерно-распределены по толщине оболочки), которые созвучны со свойствами асимптотического решения трёхмерной граничной задачи в тонких областях. При переходе к пластинке $\left(\frac{1}{R_1} \rightarrow 0, \frac{1}{R_2} \rightarrow 0 \right)$ получим две отдельные моментно-мембранные модели: 1) модель плоского напряжённого состояния пластинки, 2) модель поперечного изгиба пластинки.

1.1. Основные уравнения, граничные и начальные условия задачи динамики плоского напряжённого состояния для листа графена по моментно-мембранной динамической теории упругих пластин. Изложим основные уравнения и граничные условия в декартовой системе координат x, y плоского напряжённого состояния для листа графена по моментно-мембранной теории упругих пластин: (рис 1.)

Уравнения движения

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_{11}}{\partial x} + \frac{\partial S_{21}}{\partial y} &= \rho_0 \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2}, \\ \frac{\partial S_{12}}{\partial x} + \frac{\partial T_{22}}{\partial y} &= \rho_0 \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2}, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\frac{\partial L_{13}}{\partial x} + \frac{\partial L_{23}}{\partial y} + (S_{12} - S_{21}) = J_0 \frac{\partial^2 \Omega_3}{\partial t^2};$$

Соотношения упругости

$$\begin{aligned} T_{11} &= \tilde{E}_* (\Gamma_{11} + \nu \Gamma_{22}), & T_{22} &= \tilde{E}_* (\Gamma_{22} + \nu \Gamma_{11}), \\ S_{12} &= C_* [\Gamma_{12} + \eta_1 \Gamma_{21}], & S_{21} &= C_* [\Gamma_{21} + \eta_1 \Gamma_{12}], \end{aligned} \quad (2)$$

$$L_{13} = B_* k_{13}, \quad L_{23} = B_* k_{23}, \quad \eta_1 = \frac{\mu - \alpha}{\mu + \alpha};$$

Геометрические соотношения

$$\begin{aligned} \Gamma_{11} &= \frac{\partial u_1}{\partial x}, \quad \Gamma_{22} = \frac{\partial u_2}{\partial y}, \quad \Gamma_{12} = \frac{\partial u_2}{\partial x} - \Omega_3, \\ \Gamma_{21} &= \frac{\partial u_1}{\partial y} + \Omega_3, \quad k_{13} = \frac{\partial \Omega_3}{\partial x}, \quad k_{23} = \frac{\partial \Omega_3}{\partial y}; \end{aligned} \quad (3)$$

Граничные условия

$$\begin{aligned} T_{11} &= \bar{T}_{11}, \quad S_{12} = \bar{S}_{12}, \quad L_{13} = \bar{L}_{13}, \quad \text{при } x = \text{const}; \\ S_{21} &= \bar{S}_{21}, \quad T_{22} = \bar{T}_{22}, \quad L_{23} = \bar{L}_{23}, \quad \text{при } y = \text{const}, \end{aligned} \quad (4)$$

или

$$\begin{aligned} u_1 &= \bar{u}_1, \quad u_2 = \bar{u}_2, \quad \Omega_3 = \bar{\Omega}_3, \quad \text{при } x = \text{const}; \\ u_1 &= \bar{u}_1, \quad u_2 = \bar{u}_2, \quad \Omega_3 = \bar{\Omega}_3, \quad \text{при } y = \text{const}; \end{aligned} \quad (5)$$

Могут иметь место также граничные условия смешанного типа.

Кроме того к полученным уравнениям необходимо присоединить ещё и начальные

условия для $u_1, u_2, \Omega_3, \frac{\partial u_1}{\partial t}, \frac{\partial u_2}{\partial t}, \frac{\partial \Omega_3}{\partial t}$, при $t = t_0$.

Здесь, u_1, u_2 - тангенциальные перемещения, Ω_3 - свободный поворот точек пластинки вокруг оси z ; $\Gamma_{11}, \Gamma_{22}, \Gamma_{12}, \Gamma_{21}$ - тангенциальные деформации; k_{13}, k_{23} - изменения кривизн; $T_{11}, T_{22}, S_{12}, S_{21}$ - тангенциальные усилия; L_{13}, L_{23} - моменты. В

физических соотношениях упругости (2), $\tilde{E}_* = \frac{E_*}{1-\nu^2}$, $C_* = \mu_* + \alpha_*$, $\eta_1 = \frac{\mu_* - \alpha_*}{\mu_* + \alpha_*}$, B_*

- упругие жесткостные характеристики графена, численные значения которых определены в работе [30] (а это означает, что в этой континуальной теории деформационного поведения графена не используется понятие толщины графена), ρ_0 - поверхностная плотность массы, а J_0 - поверхностная плотность инерции вращения графена.

Приведем числовые значения упругих жесткостных характеристик для графена [30]:

$$E_* = 287 \frac{\text{нН}}{\text{нм}}; \quad \nu = 0.26; \quad \mu_* = 116 \frac{\text{нН}}{\text{нм}}; \quad \alpha_* = 42 \frac{\text{нН}}{\text{нм}}; \quad (6)$$

$$B_* = 0,505 \text{нН} \cdot \text{нм}, \quad \eta_1 = 0.468 \text{ (нм - нанометр, нН - наноНьютон)}$$

Подставив геометрические соотношения (3) в соотношения упругости (2) и полученные в уравнения движения (1), получим уравнения плоских колебаний листа графена в перемещениях u_i , $i = 1, 2$ и свободном повороте Ω_3 :

$$\begin{aligned}
\tilde{E}_* \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + C_* \frac{\partial^2 u_1}{\partial y^2} + (\tilde{E}_* \nu + C_* \eta_1) \frac{\partial^2 u_2}{\partial x \partial y} + C_* (1 - \eta_1) \frac{\partial \Omega_3}{\partial y} &= \rho_0 \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2}, \\
\tilde{E}_* \frac{\partial^2 u_2}{\partial y^2} + C_* \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} + (\tilde{E}_* \nu + C_* \eta_1) \frac{\partial^2 u_1}{\partial x \partial y} - C_* (1 - \eta_1) \frac{\partial \Omega_3}{\partial x} &= \rho_0 \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2}, \\
B_* \Delta \Omega_3 + C_* (1 - \eta_1) \left(\frac{\partial u_2}{\partial x} - \frac{\partial u_1}{\partial y} - 2\Omega_3 \right) &= J_0 \frac{\partial^2 \Omega_3}{\partial t^2}.
\end{aligned} \tag{7}$$

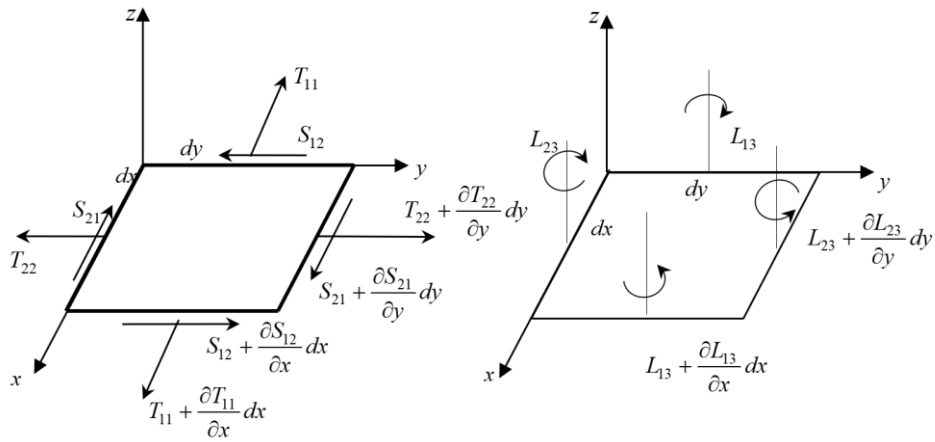


Рис. 1. Усилия и моменты при плоском напряженном состоянии пластинки

В задаче динамики упругих пластин важнейшей её частью является нахождение частот собственных колебаний и собственных функций.

Опишем кратко ход решения задачи о свободных плоских колебаниях листа графена.

Ищем решение системы уравнений (7) в виде произведений

$$u_i = u_i^*(x, y)e^{-i\omega t}, \quad i = 1, 2, \quad \Omega_3 = \Omega_3^*(x, y)e^{-i\omega t}, \tag{8}$$

где ω -круговая частота собственных плоских колебаний пластинки, связанная с периодом колебания T зависимостью

$$\omega = \frac{2\pi}{T}. \tag{9}$$

Тогда относительно функций $u_i^*(x, y)$, ($i = 1, 2$), $\Omega_3^*(x, y)$ приходим к решению следующей однородной системы дифференциальных уравнений:

$$\tilde{E}_* \frac{\partial^2 u_1^*}{\partial x^2} + C_* \frac{\partial^2 u_1^*}{\partial y^2} + (\tilde{E}_* \nu + C_* \eta_1) \frac{\partial^2 u_2^*}{\partial x \partial y} + C_* (1 - \eta_1) \frac{\partial \Omega_3^*}{\partial y} = -\rho_0 \omega^2 u_1^*,$$

$$\tilde{E}_* \frac{\partial^2 u_2^*}{\partial y^2} + C_* \frac{\partial^2 u_2^*}{\partial x^2} + (\tilde{E}_* \nu + C_* \eta_1) \frac{\partial^2 u_1^*}{\partial x \partial y} - C_* (1 - \eta_1) \frac{\partial \Omega_3^*}{\partial x} = -\rho_0 \omega^2 u_2^*, \quad (10)$$

$$B_* \Delta \Omega_3^* + C_* (1 - \eta_1) \left(\frac{\partial u_2^*}{\partial x} - \frac{\partial u_1^*}{\partial y} - 2\Omega_3^* \right) = -J_0 \omega^2 \Omega_3^*.$$

К этой системе уравнений присоединим однородные граничные условия типа (4) или (5). При решении граничной задачи (10), (4) или (5) (однородные), определяются частоты собственных плоских колебаний и формы собственных колебаний листа графена.

Эта задача эквивалентна [33] задаче о минимуме следующего функционала (функционал получен с помощью выражения для потенциальной энергии деформации пластин и кинетической энергии ее колебания):

$$\min(U^* - K^*), \quad (11)$$

где

$$U^* = \frac{1}{2} \iint_{(s)} \left[\tilde{E}_* (\Gamma_{11}^2 + \Gamma_{22}^2 + 2\nu \Gamma_{11} \Gamma_{22}) + C_* (\Gamma_{12}^2 + \Gamma_{21}^2 + 2\eta_1 \Gamma_{12} \Gamma_{21}) + B_* (k_{13}^2 + k_{23}^2) \right] dx dy \quad (12)$$

$$K^* = \frac{1}{2} \omega^2 \iint_{(s)} \left[\rho_0 (u_1^2 + u_2^2) + J_0 \Omega_3^2 \right] dx dy. \quad (13)$$

1.2. Основные уравнения, граничные и начальные условия задачи динамики поперечного изгиба для листа графена по моментно-мембранной динамической теории упругих пластин.

Уравнения движения листа графена по моментно-мембранной динамической теории упругих пластин для модели поперечного изгиба имеют вид (рис 2):

Уравнения движения

$$\frac{\partial N_{13}}{\partial x} + \frac{\partial N_{23}}{\partial y} = -q + \rho_0 \frac{\partial^2 w}{\partial t^2},$$

$$\frac{\partial L_{11}}{\partial x} + \frac{\partial L_{21}}{\partial y} + N_{23} = -m_1 + J_0 \frac{\partial^2 \Omega_1}{\partial t^2}, \quad (14)$$

$$\frac{\partial L_{12}}{\partial x} + \frac{\partial L_{22}}{\partial y} - N_{13} = -m_2 + J_0 \frac{\partial^2 \Omega_2}{\partial t^2};$$

Соотношения упругости

$$N_{13} = D_* \Gamma_{13}, N_{23} = D_* \Gamma_{23}, L_{12} = D' [k_{12} + \eta_2 k_{21}], L_{21} = D' [k_{21} + \eta_2 k_{12}], \quad (15)$$

$$L_{11} = D' [(1 + 2\eta_2) k_{11} + \eta_2 k_{22}], L_{22} = D' [(1 + 2\eta_2) k_{22} + \eta_2 k_{11}];$$

Геометрические соотношения

$$\Gamma_{13} = \frac{\partial w}{\partial x} + \Omega_2, \Gamma_{23} = \frac{\partial w}{\partial y} - \Omega_1, k_{11} = \frac{\partial \Omega_1}{\partial x}, k_{22} = \frac{\partial \Omega_2}{\partial y}, k_{12} = \frac{\partial \Omega_2}{\partial x}, k_{21} = \frac{\partial \Omega_1}{\partial y}; \quad (16)$$

Граничные условия

$$1) N_{13} = \bar{N}_{13}, \quad L_{11} = \bar{L}_{11}, \quad L_{12} = \bar{L}_{12}, \quad \text{при } x = \text{const}, \text{ или} \\ w = \bar{w}, \quad \Omega_1 = \bar{\Omega}_1, \quad \Omega_2 = \bar{\Omega}_2, \quad \text{при } x = \text{const}. \quad (17)$$

$$2) N_{23} = \bar{N}_{23}, \quad L_{21} = \bar{L}_{21}, \quad L_{22} = \bar{L}_{22}, \quad \text{при } y = \text{const}, \text{ или} \\ w = \bar{w}, \quad \Omega_1 = \bar{\Omega}_1, \quad \Omega_2 = \bar{\Omega}_2, \quad \text{при } y = \text{const}. \quad (18)$$

3) шарнирное-опирание:

$$w = 0, \quad \frac{\partial \Omega_2}{\partial x} = 0, \quad \Omega_1 = 0, \quad \text{при } x = 0, a; \\ w = 0, \quad \Omega_2 = 0, \quad \frac{\partial \Omega_1}{\partial y} = 0, \quad \text{при } y = 0, b. \quad (19)$$

К уравнениям движения следует присоединить ещё начальные условия при $t = t_0$

$$\text{для } w, \frac{\partial w}{\partial t}, \Omega_1, \frac{\partial \Omega_1}{\partial t}, \Omega_2, \frac{\partial \Omega_2}{\partial t}.$$

Здесь w – прогиб срединной плоскости пластинки; Ω_1, Ω_2 – свободные повороты точек пластинки вокруг осей x и y соответственно; Γ_{13}, Γ_{23} – поперечные сдвиговые деформации в плоскостях xz и yz ; $k_{11}, k_{22}, k_{12}, k_{21}$ – компоненты тензора изгиба-кручений; N_{13}, N_{23} – перерезывающие усилия; L_{12}, L_{21} – изгибающие моменты, L_{11}, L_{22} – крутящие моменты от моментных напряжений. В физических

соотношениях упругости (15), $D_*, D' = \gamma_* + \varepsilon_*$, $\eta_2 = \frac{\gamma_* - \varepsilon_*}{\gamma_* + \varepsilon_*}$, $\beta_* = \frac{\gamma_* - \varepsilon_*}{\gamma_* + \varepsilon_*} 2\gamma_*$ -

упругие жёсткостные характеристики графена, численные значения которых определены в работе [30] (это означает, что и в этой континуальной теории деформационного поведения графена не используется понятие толщины пластинки):

$$D_* = 86 \frac{нН}{нм}; \quad D' = 0,415 нН \cdot нм; \quad \eta_2 = -0,219; \quad \beta_* = -0,071 нН \cdot нм. \quad (20)$$

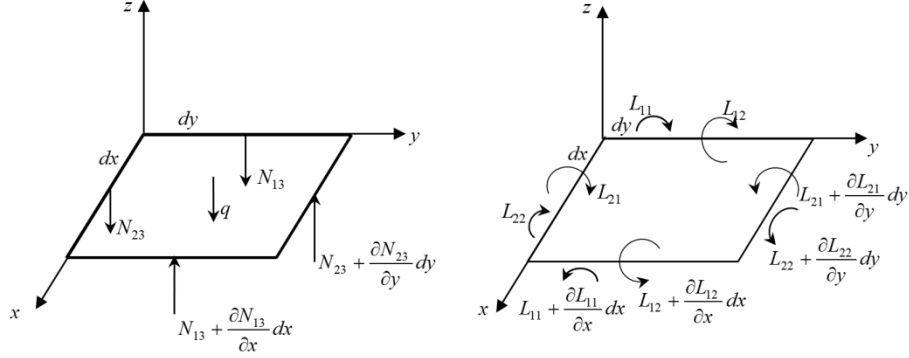


Рис. 2. Усилия и моменты при поперечном изгибе пластинки

Подставив геометрические соотношения (16) в соотношения упругости (15) и полученные в уравнения движения (14), получим уравнения динамики листа графена относительно прогиба w и свободных поворотов $\Omega_i, i = 1, 2$:

$$\begin{aligned}
 D_* \Delta w + D_* \left(\frac{\partial \Omega_2}{\partial x} - \frac{\partial \Omega_1}{\partial y} \right) &= -q + \rho_0 \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}, \\
 D' \Delta \Omega_1 + 2D' \eta_2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Omega_1}{\partial x} + \frac{\partial \Omega_2}{\partial y} \right) + D_* \left(\frac{\partial w}{\partial y} - \Omega_1 \right) &= -m_1 + J_0 \frac{\partial^2 \Omega_1}{\partial t^2}, \\
 D' \Delta \Omega_2 + 2D' \eta_2 \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \Omega_1}{\partial x} + \frac{\partial \Omega_2}{\partial y} \right) - D_* \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \Omega_2 \right) &= -m_2 + J_0 \frac{\partial^2 \Omega_2}{\partial t^2},
 \end{aligned} \quad (21)$$

В задаче динамики упругих пластин важнейшей её частью является нахождение частот собственных колебаний и собственных функций.

Опишем кратко ход решения задачи о свободных изгибных колебаниях листа графена.

Ищем решение системы уравнений (21) в виде произведений

$$w = w^*(x, y)e^{-i\omega t}, \quad \Omega_i = \Omega_i^*(x, y)e^{-i\omega t}, \quad i = 1, 2, \quad (22)$$

Тогда относительно функций $w^*(x, y), \Omega_i^*(x, y), i = 1, 2$, приходим к решению следующей однородной системы дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}
 D_* \Delta w^* + D_* \left(\frac{\partial \Omega_2^*}{\partial x} - \frac{\partial \Omega_1^*}{\partial y} \right) &= -\rho_0 \omega^2 w^*, \\
 D' \Delta \Omega_1^* + 2D' \eta_2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \Omega_1^*}{\partial x} + \frac{\partial \Omega_2^*}{\partial y} \right) + D_* \left(\frac{\partial w^*}{\partial y} - \Omega_1^* \right) &= -J_0 \omega^2 \Omega_1^*, \\
 D' \Delta \Omega_2^* + 2D' \eta_2 \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \Omega_1^*}{\partial x} + \frac{\partial \Omega_2^*}{\partial y} \right) - D_* \left(\frac{\partial w^*}{\partial x} + \Omega_2^* \right) &= -J_0 \omega^2 \Omega_2^*.
 \end{aligned} \quad (23)$$

К этой системе уравнений присоединим однородные граничные условия типа (17) или (18). При решении граничной задачи (23), (17) или (18) (однородные), определяются частоты собственных изгибных колебаний и формы колебаний листа графена.

Эта задача эквивалентна задаче минимума для функционала (11), полученного с помощью выражения потенциальной энергии деформации пластины и кинетической энергии ее изгибных колебаний, где [33]

$$U^* = \frac{1}{2} \iint_{(S)} \left\{ D_* (\Gamma_{13}^2 + \Gamma_{23}^2) + D' \left[(1 + 2\eta_2) (k_{11}^2 + k_{22}^2) + 2\eta_2 \cdot k_{11} k_{22} \right] + \right. \\ \left. + D' (k_{12}^2 + k_{21}^2 + 2\eta_2 \cdot k_{12} k_{21}) \right\} dx dy, \quad (24)$$

$$K^* = \frac{1}{2} \omega^2 \iint_{(S)} \left[\rho_0 w^2 + J_0 (\Omega_1^2 + \Omega_2^2) \right] dx dy, \quad (25)$$

2. Метод конечных элементов (МКЭ) для численного решения краевых задач статики и собственных колебаний моментно-мембранной линейной теории упругих пластин (прямоугольного листа графена), при плоском напряжённом состоянии и при поперечном изгибе.

На основании принципа минимума полной потенциальной энергии системы в моментно-мембранной теории упругих пластин: А) при плоском напряжённом состоянии, Б) при поперечном изгибе, была установлена теорема: поле перемещений и свободного поворота, удовлетворяющее уравнениям равновесия (и совместности деформаций) минимизируют функционал: в случае А)[33]:

$$\Pi = \iint_{(S)} W dx dy - \int_0^a \left(\bar{S}_{21} \cdot u_1 + \bar{T}_{22} \cdot u_2 + \bar{L}_{23} \cdot \Omega_3 \right) \Big|_{y=0}^{y=b} dx - \\ - \int_0^b \left(\bar{T}_{11} \cdot u_1 + \bar{S}_{12} \cdot u_2 + \bar{L}_{13} \cdot \Omega_3 \right) \Big|_{x=0}^{x=a} dy, \quad (26)$$

где W - поверхностная плотность потенциальной энергии деформации пластинки:

$$W = \frac{1}{2} \left[\tilde{E}_* (\Gamma_{11}^2 + \Gamma_{22}^2 + 2\nu \Gamma_{11} \Gamma_{22}) + C_* (\Gamma_{12}^2 + \Gamma_{21}^2 + 2\eta_1 \Gamma_{12} \Gamma_{21}) + \right. \\ \left. + B_* (k_{13}^2 + k_{23}^2) \right]. \quad (27)$$

В случае Б):

$$\begin{aligned}
\Pi = & \iint_{(S)} W_0 dx dy - \iint_{(S)} q w dx dy - \int_0^a \left(\bar{N}_{23} \cdot w + \bar{L}_{22} \cdot \Omega_2 + \bar{L}_{21} \cdot \Omega_1 \right) \Big|_{y=0}^{y=b} dx - \\
& - \int_0^b \left(\bar{N}_{13} \cdot w + \bar{L}_{11} \cdot \Omega_1 + \bar{L}_{12} \cdot \Omega_2 \right) \Big|_{x=0}^{x=a} dy,
\end{aligned} \tag{28}$$

где W_0 - поверхностная плотность потенциальной энергии деформации изгиба пластинки:

$$\begin{aligned}
W_0 = & \frac{1}{2} \left\{ D_* (\Gamma_{13}^2 + \Gamma_{23}^2) + D' \left[(1 + 2\eta_2) (k_{11}^2 + k_{22}^2) + \right. \right. \\
& \left. \left. + 2\eta_2 k_{11} k_{22} \right] + D' (k_{12}^2 + k_{21}^2 + 2\eta_2 k_{12} k_{21}) \right\}
\end{aligned} \tag{29}$$

В рамках основных процедур МКЭ [35,36] будем искать приближение к точному решению для указанных обеих граничных задач.

После разбиения прямоугольной области срединной плоскости пластинки на прямоугольные конечные элементы, выражение полной потенциальной энергии системы можно записать в виде

$$\Pi = \sum_{e=1}^m \Pi^e = \sum_{e=1}^m \iint_{s^e} \frac{1}{2} \varepsilon^T \sigma ds^e - \sum_{e=1}^m \int_{l^e} U^T p^e dl^e, \tag{30}$$

где s^e - прямоугольная область конечного элемента, l^e - контур этой области, m - общее число элементов. А) В случае плоского напряженного состояния пластин:

$$\{u^e\}^T = (u_1^e, u_2^e, \Omega_3^e) - \text{вектор обобщённых перемещений,}$$

$$\{\varepsilon^e\}^T = (\Gamma_{11}^e, \Gamma_{22}^e, \Gamma_{12}^e, \Gamma_{21}^e, k_{13}^e, k_{23}^e) - \text{вектор обобщённых деформаций,}$$

$$\{\sigma^e\}^T = (T_{11}^e, T_{22}^{(e)}, S_{12}^e, S_{21}^e, L_{13}^{(e)}, L_{23}^{(e)}) - \text{вектор обобщённых усилий,}$$

$$\{p^e\}^T = (T_{11}^{(e)}, S_{12}^{(e)}, L_{13}^{(e)}) - \text{на контурах прямоугольного элемента } x = const,$$

$$\{p^e\}^T = (S_{21}^e, T_{22}^{(e)}, L_{23}^{(e)}) - \text{на контурах прямоугольного элемента } y = const.$$

Рассмотрим равновесие некоторого элемента e . Узлы прямоугольного конечного элемента обозначим i, j, k, l . Для прямоугольного элемента получается 36 степеней

свободы (четыре узла по $u_1^{(e)}, u_2^{(e)}, \Omega_3^{(e)}, \frac{\partial u_1^{(e)}}{\partial x}, \frac{\partial u_2^{(e)}}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_3^{(e)}}{\partial x}, \frac{\partial u_1^{(e)}}{\partial y}, \frac{\partial u_2^{(e)}}{\partial y}, \frac{\partial \Omega_3^{(e)}}{\partial y}$ в

каждом), поэтому вводим 36 полиномиальных коэффициентов $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{36}$:

$$\begin{aligned}
u_1^{(e)} = & \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y + \alpha_4 x^2 + \alpha_5 y^2 + \alpha_6 xy + \alpha_7 x^2 y + \alpha_8 xy^2 + \alpha_9 x^3 + \\
& + \alpha_{10} y^3 + \alpha_{11} x^3 y + \alpha_{12} xy^3,
\end{aligned}$$

$$u_2^{(e)} = \alpha_{13} + \alpha_{14}x + \alpha_{15}y + \alpha_{16}x^2 + \alpha_{17}y^2 + \alpha_{18}xy + \alpha_{19}x^2y + \alpha_{20}xy^2 + \alpha_{21}x^3 + \alpha_{22}y^3 + \alpha_{23}x^3y + \alpha_{24}xy^3, \quad (31)$$

$$\Omega_3^{(e)} = \alpha_{25} + \alpha_{26}x + \alpha_{27}y + \alpha_{28}x^2 + \alpha_{29}y^2 + \alpha_{30}xy + \alpha_{31}x^2y + \alpha_{32}xy^2 + \alpha_{33}x^3 + \alpha_{34}y^3 + \alpha_{35}x^3y + \alpha_{36}xy^3.$$

Выполняя процедуру действий МКЭ, получим

$$\{u^e\} = [N]\{\delta^e\}, \quad \{\varepsilon^e\} = [R][N]\{\delta^e\} = [B]\{\delta^e\}, \quad \{\sigma^e\} = [D][B]\{\delta^e\}, \quad (32)$$

где $[N]$ - матрица базисных функций конечного элемента (матрица функции формы), $[R]$ - матрица дифференциальных операторов, связывающих деформации и изгиб-кручения с перемещениями и свободным поворотом; $[D]$ - матрица упругости:

$$[R] = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x} & -1 \\ \frac{\partial}{\partial y} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial x} \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix}, \quad [D] = \begin{bmatrix} \tilde{E}_* & \tilde{E}_* \nu & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \tilde{E}_* \nu & \tilde{E}_* & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C_* & C_* \eta_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C_* \eta_1 & C_* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & B_* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & B_* \end{bmatrix}. \quad (33)$$

Вектор узловых обобщённых перемещений для элемента e выражается так

$$\{\delta^e\}^T = \left(u_{1i}^e, \frac{\partial u_{1i}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{1i}^e}{\partial y}, u_{2i}^e, \frac{\partial u_{2i}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{2i}^e}{\partial y}, \Omega_{3i}^e, \frac{\partial \Omega_{3i}^e}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{3i}^e}{\partial y}, u_{1j}^e, \frac{\partial u_{1j}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{1j}^e}{\partial y}, u_{2j}^e, \frac{\partial u_{2j}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{2j}^e}{\partial y}, \Omega_{3j}^e, \frac{\partial \Omega_{3j}^e}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{3j}^e}{\partial y}, u_{1k}^e, \frac{\partial u_{1k}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{1k}^e}{\partial y}, u_{2k}^e, \frac{\partial u_{2k}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{2k}^e}{\partial y}, \Omega_{3k}^e, \frac{\partial \Omega_{3k}^e}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{3k}^e}{\partial y}, u_{1l}^e, \frac{\partial u_{1l}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{1l}^e}{\partial y}, u_{2l}^e, \frac{\partial u_{2l}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{2l}^e}{\partial y}, \Omega_{3l}^e, \frac{\partial \Omega_{3l}^e}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{3l}^e}{\partial y} \right). \quad (34)$$

Б) В случае поперечного изгиба имеем

$\{u^e\}^T = (w^e, \Omega_1^e, \Omega_2^e)$ - вектор обобщённых перемещений,

$\{\varepsilon^e\}^T = (\Gamma_{13}^e, \Gamma_{23}^e, k_{11}^e, k_{22}^e, k_{12}^e, k_{21}^e)$ - вектор обобщённых деформаций,

$\{\sigma^e\}^T = (N_{13}^e, N_{23}^e, L_{11}^e, L_{22}^e, L_{12}^e, L_{21}^e)$ - вектор обобщённых усилий,

$\{p^e\}^T = (N_{13}^e, L_{11}^{(e)}, L_{12}^{(e)})$ - на контуре прямоугольного элемента $x = const$,

$\{p^e\}^T = (N_{23}^e, L_{21}^e, L_{22}^e)$ - на контуре прямоугольного элемента $y = const$.

Для прямоугольного конечного элемента получим 36 степеней свободы (четыре узла по $w^e, \Omega_1^e, \Omega_2^e, \frac{\partial w^e}{\partial x}, \frac{\partial w^e}{\partial y}, \frac{\partial \Omega_1^e}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_1^e}{\partial y}, \frac{\partial \Omega_2^e}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_2^e}{\partial y}$ в каждом). Прогиб w^e и

независимые повороты Ω_1^e, Ω_2^e представим так

$$\begin{aligned} w &= \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y + \alpha_4 x^2 + \alpha_5 y^2 + \alpha_6 xy + \alpha_7 x^2 y + \alpha_8 xy^2 + \alpha_9 x^3 + \\ &+ \alpha_{10} y^3 + \alpha_{11} x^3 y + \alpha_{12} xy^3, \\ \Omega_1 &= \alpha_{13} + \alpha_{14} x + \alpha_{15} y + \alpha_{16} x^2 + \alpha_{17} y^2 + \alpha_{18} xy + \alpha_{19} x^2 y + \alpha_{20} xy^2 + \alpha_{21} x^3 + \\ &+ \alpha_{22} y^3 + \alpha_{23} x^3 y + \alpha_{24} xy^3, \\ \Omega_2 &= \alpha_{25} + \alpha_{26} x + \alpha_{27} y + \alpha_{28} x^2 + \alpha_{29} y^2 + \alpha_{30} xy + \alpha_{31} x^2 y + \alpha_{32} xy^2 + \alpha_{33} x^3 + \\ &+ \alpha_{34} y^3 + \alpha_{35} x^3 y + \alpha_{36} xy^3. \end{aligned} \quad (35)$$

В этом случае также приходим к выражениям (32), где на этот раз

$$[R] = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & +1 \\ \frac{\partial}{\partial y} & -1 & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial x} \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} & 0 \end{bmatrix}, [D] = \begin{bmatrix} D_* & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & D_* & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D'(1+2\eta_2) & D'\eta_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D'\eta_2 & D'(1+2\eta_2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & D' & D'\eta_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & D'\eta_2 & D' \end{bmatrix}. \quad (36)$$

Вектор узловых обобщённых перемещений для элемента e имеет вид

$$\begin{aligned} \{\delta^e\}^T = & \left(w_i^e, \frac{\partial w_i^e}{\partial x}, \frac{\partial w_i^e}{\partial y}, \Omega_{1i}^e, \frac{\partial \Omega_{1i}^e}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{1i}^e}{\partial y}, \Omega_{2i}^e, \frac{\partial \Omega_{2i}^e}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{2i}^e}{\partial y}, \right. \\ & w_j^e, \frac{\partial w_j^e}{\partial x}, \frac{\partial w_j^e}{\partial y}, \Omega_{1j}^e, \frac{\partial \Omega_{1j}^e}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{1j}^e}{\partial y}, \Omega_{2j}^e, \frac{\partial \Omega_{2j}^e}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{2j}^e}{\partial y}, \\ & w_k^e, \frac{\partial w_k^e}{\partial x}, \frac{\partial w_k^e}{\partial y}, \Omega_{1k}^e, \frac{\partial \Omega_{1k}^e}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{1k}^e}{\partial y}, \Omega_{2k}^e, \frac{\partial \Omega_{2k}^e}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{2k}^e}{\partial y}; \\ & \left. w_l^e, \frac{\partial w_l^e}{\partial x}, \frac{\partial w_l^e}{\partial y}, \Omega_{1l}^e, \frac{\partial \Omega_{1l}^e}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{1l}^e}{\partial y}, \Omega_{2l}^{(e)}, \frac{\partial \Omega_{2l}^{(e)}}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{2l}^{(e)}}{\partial y} \right). \end{aligned} \quad (37)$$

Для обеих задач А) и Б), имея выражение функционала (30), используя формулу дифференцирования (21, 22) и принимая обозначения

$$[K^e] = \iint_{(s^e)} [B]^T [D][B] ds^e, \quad \{f^e\} = \int_{(r^e)} [N]^T \{p^e\} dl^e, \quad (38)$$

уравнение равновесия элемента e , в окончательном виде будет выражаться так

$$\frac{\partial \Pi^e}{\partial \{\delta^e\}} = [K^e] \{\delta^e\} - \{f^e\} = 0. \quad (39)$$

Здесь матрица $[K^e]$ носит название матрицы жёсткости конечного элемента e ;

$\{f^e\}$ - вектор эквивалентных узловых сил.

Далее, осуществляя объединение этих элементарных матричных соотношений в одно матричное соотношение, которое корректируется в целях учёта кинематических граничных условий (статические граничные условия учитываются автоматически при составлении вектора узловых сил), получим окончательную систему алгебраических уравнений:

$$[K_\Sigma] \{\Delta\} = \{f_\Sigma\}, \quad (40)$$

порядок которой соответствует количеству введённых в рассмотрение неизвестных.

Матрица $[K_\Sigma]$ носит название глобальной матрицы жёсткости или матрицы жёсткости системы конечных элементов, а $\{f_\Sigma\}$ - глобального вектора узловых сил системы; $\{\Delta\}$ - глобальный вектор узловых неизвестных

$$\{\Delta\} = \{\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_N\}^T. \quad (41)$$

Здесь N - общее число узлов в системе; δ_i - вектор неизвестных i -го узла типа (34) и (37).

Теперь перейдём к задаче о собственных колебаниях листа графена на основе моментно-мембранной теории упругих пластин: А)-плоское напряжённое состояние, Б)-поперечный изгиб. Решение этой задачи численно реализуем с помощью МКЭ. При

решении МКЭ задачи о собственных колебаний пластин, удобно пользоваться соответствующей вариационной формулировкой.

А) Вариационная задача в этом случае имеет вид (11), с учётом (12), (13).

Б) Вариационная задача в этом случае имеет вид (11), с учётом (24), (25).

Итак, будем иметь дело с экстремальным свойством для функционала (11), на основе которого получим основные матрицы теории МКЭ для определения частот и форм собственных колебаний пластины:

$$\left\{ \left[K^e \right] - \omega^2 \left[M^e \right] \right\} \cdot \left\{ \delta^e \right\} = 0, \quad (42)$$

где $\left[K^e \right]$ - матрица жёсткости (37), а $\left[M^e \right]$ - матрица массы конечного элемента e .

Глобальная система однородных алгебраических уравнений метода МКЭ примет вид

$$\left\{ \left[K_{\Sigma} \right] - \omega^2 \left[M_{\Sigma} \right] \right\} \cdot \left\{ \Delta \right\} = 0, \quad (43)$$

где $\left[K_{\Sigma} \right]$ - глобальная матрица жёсткости пластины; $\left[M_{\Sigma} \right]$ - глобальная матрица масс пластины; $\left\{ \Delta \right\}$ - глобальный вектор узловых неизвестных (41).

Система (43) является обобщённой задачей на собственные значения, решая которую (после учёта в ней граничных условий) будут определены частоты и формы собственных колебаний пластины (листа графена), как для случая А), так и для Б).

3. Прикладная задача собственных колебаний листа графена на основе моментно-мембранной теории упругих пластин.

Рассмотрим задачу собственных колебаний прямоугольного листа графена по модели поперечного изгиба пластинки, когда пластинка по всему контуру шарнирно-опёрта. Граничные условия имеют вид (19).

Жесткостные характеристики для графена имеют значения (20), по данным работы [30]: $\rho_0 = 0,76 \text{ мг} / \text{м}^2 = 0,76 \cdot 10^{-15} \text{ нкг} / \text{нм}^2$; $J_0 = 0,46 \cdot 10^{-19} \text{ нкг}$. Пусть $a = 20 \text{ нм}$, $b = 20 \text{ нм}$.

Для этого, на основании (41), составляя разрешающее матричное уравнение с учётом граничных условий (19), для каждого приближения по МКЭ, обращая соответствующий определитель к нулю, численно определяются значения частот колебаний.

В таблице 1 приведены значения наименьшей частоты собственных колебаний прямоугольного листа графена.

Таблица 1. Наименьшая частота собственных колебаний листа графена

Наименьшая частота собственных колебаний ГГц -(ГигаГерц)	Приближения по МКЭ			Теоретическое значение
	4 конечных элемента	16 конечных элементов	36 конечных элементов	
ω	19.5	6.47	5.80	5.72

Приведённые в таблице 1 числовые значения, указывают на практическую сходимость приближений по МКЭ.

Отметим, что теоретические значения искомых величин определены применением для решения указанных граничных задач метода двойных тригонометрических рядов.

Заключение. В работе изложена моментно-мембранная линейная динамическая теория упругих пластин: 1) плоское напряжённое состояние, 2) поперечный изгиб, как континуальные теории деформационного поведения листа графена. Эта теория открывает большие возможности для изучения прикладных деформационных задач листа графена, как в его плоскости, так и в случае поперечного изгиба. Для построения численных решений поставленных таким образом краевых задач применяется метод конечных элементов. Задачи изгиба и собственных колебаний листа графена (прямоугольной пластинки) методом конечных элементов решаются на основе принципа минимума определённых функционалов. В результате, построены матрицы жёсткости и масс прямоугольного конечного элемента листа графена.

Построено численное решение конкретной прикладной задачи собственных изгибных колебаний листа графена. В соответствующей таблице показаны численные результаты решения указанной задачи при равномерной разбивке пластинки на различное число прямоугольных конечных элементов. Даны сравнения полученных результатов с теоретическими.

ЛИТЕРАТУРА

1. Nalwa H.S. Handbook of Nanostructured Materials and Nanotechnology. London: Elsevier Applied Science, 2000.
2. Bhushan V. Springer Handbook of Nanotechnology. Heidelberg: Springer, 2004.
3. Kudin K.N. et al. C₂F, BN and C nanoshell elasticity from ab initio computations // Phys. Rev. B. 2001. 64(23). P. 235406.
4. Liu F et al. Ab initio calculation of ideal strength and phonon instability of graphene in tension // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 76. Is. 6. P. 1-7.
5. Рапапорт Д.К. Искусство молекулярной динамики. Москва, Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика». 2012. 632 с.
6. Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В. Основы моделирования молекулярной динамики. Москва, Ижевск: Институт компьютерных исследований. 2018. 106 с.
7. Дьячков П.Н. Углеродные нанотрубки. Строение, свойства, применения. М.: БИНОМ. 2006. 293 с.
8. Geim A.K., Novoselov K.S. The rise of graphene // Nature Materials. 2007. Vol. 6, no. 3. P. 183- 191. DOI:10.1038/nmat1849.
9. Баимова Ю.А., Мулюков Р.Р. Графен, нанотрубки и другие углеродные наноструктуры. М.: РАН. 2018. 212 с.
10. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Фирсова А.Д. Учёт моментного взаимодействия при расчёте изгибной жёсткости наноструктур // Доклады РАН. 2003. Т. 391, № 6. С. 764-768.
11. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. Получение макроскопических соотношений упругости сложных кристаллических решёток при учёте моментных взаимодействий на микроуровне // Прикл. мат. и механика. 2007. Т. 71. Вып. 4. С. 595-615.

12. Современные проблемы механики. Механические свойства ковалентных кристаллов / под ред. А.М. Кривцова, О.С. Лободы. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та. 2014. 160 с.
13. Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. Аномалии механических характеристик наноразмерных объектов // Доклады РАН. 2001. Т. 381. Вып. 3. С. 345-347.
14. Tersoff, J. Empirical Interatomic potential for Carbon, with Applications to Amorphous Carbon. *Phys. Rev. B*. 1988, 61. 2879-2882. DOI: 10.1103/PhysRevLett.61.2879
15. Brenner, D.W.; Shendezova, O.A.; Harrison, J.A. et al. A second- generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons // *J. Phys: Condens. Matter* 2002, 14, 783-802. DOI:10.1088/0953-8984/14/4/312
16. Dmitriev S.V., Semenov A.S., Savin A.V., Igamor M.A., Bachurin D.V. Rotobreather in a carbon nanotube bundle// *J. Micromech. Mol. Phys.* 2020. Vol. 5. N 3. 2050010.
17. Дмитриев С. В., Сунагатова И.Р., Ильгамов М.А, Павлов И.С. Собственные частоты изгибных колебаний углеродных нанотрубок // Журнал технической физики. 2021. Т. 91. Вып. 11. С. 1732-1737.
18. Головнева Е.И., Головнев И.Ф., Фомин В.М. Молекулярно- динамический анализ динамического разрушения наноструктур // Физ. мезомех. 2003. Т. 6. N: 2. С.37-46.
19. Андреев А.Н., Астафуров С.В., Фомин В.М. и др. Механика - от дискретного к сплошному / Отв. ред. В. М. Фомин. Новосибирск: Наука. 2008. 344 с.
20. Odegard G.M., Gates T.S., Nicholson L.M., Wise K.E. Equivalent-Continuum Modeling of Nano-structured Materials// NASA Langley Research Center: Technical Memorandum NASA/TM-2001-210863-2001.
21. Гольдштейн Р.В., Ченцов А.В. Дискретно-континуальная модель нанотрубки. //Иzv. РАН. Механика твердого тела. 2005. № 4. С. 57-74.
22. Гольдштейн Р.В., Городцов В.А., Лисовенко Д.С. Мезомеханика многослойных углеродных нанотрубок и наноусов//Физическая мезомеханика. 2008. Т. 11. N 6. С. 25-42.
23. Li, C.A.; Chou, T.W. A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes. *Int. J. Solids Struch.*2003, 40, 2487-2499. DOI: 10.1016/S0020-7683(03)00056-8
24. Wan, H.; Delate, F. A structural approach for predicting the mechanical properties of carbon nanotubes. *Meccanica* 2010, 45, 43-51. DOI: 10.1007/s11011№2-009-9222-2
25. Аннин Б.Д., Алёхин В.В., Бабичев А.В., Коробейников С.Н. Применение метода молекулярной механики к задачам устойчивости и собственных колебаний однослойных углеродных нанотрубок//Иzv. РАН. Механика твёрдого тела. 2012. N. 5. С. 65-83.
26. Алёхин В.В., Аннин Б. Д., Бабичев А.В., Коробейников С.Н. Собственные колебания и выпучивание графеновых листов// Изв. РАН. Механика твёрдого тела. 2013. N 5. С. 34-39.
27. Zhang P., Jiang H., Huang Y., Geubelle P.H., Hwang K.C. An atomistic-based continuum theory the carbon nanotubes analysis of fracture nucleation// *J. Mech. And Phys. Solids*. 2004. 52. P. 977-998.
28. Xiao J.R., Gama B.A., Gillespie Jr. An analytical molecular structural mechanics model for the mechanical properties of carbon nanotubes// *Int. J. Solis Struct.* 2025. 42. P. 3075-3092.

29. Борн М., Кунь Х. Динамическая теория кристаллических решёток. М.: Изд-во иностр.лит. 1958. 488 с. (Born M., Huang K. Dynamic Theory of Crystal Lattices. Oxford: Oxford University Press. 1954).
30. Саркисян С.О. Стержневая и континуально-моментная модели деформаций двумерных наноматериалов//Физическая мезомеханика. 2022. Т.25. N 2. С. 109-121.
31. Sargsyan S.H. Continuous Theory and Problems of Static Bending, Natural Vibrations and Stability of a Graphene Sheet// Actual Problems of Continuum Mechanics: Experiment, Theory, and Applications. AIP Conference Proceedings 2504, 030047 (2023)
32. Саркисян С.О. Модель тонких оболочек в моментной теории упругости с деформационной концепцией «сдвиг плюс поворот» // Физическая мезомеханика. 2020. Т. 23. № 4. С. 13-19.
33. Саркисян С.О. Вариационные принципы моментно-мембранной теории оболочек // Вестник Московского университета. Серия 1. Математика. Механика. 2022. № 1. С. 38-47.
34. Sargsyan S.H. Moment-membrane theory of elastic cylindrical shells as a continual model of deformations of a single-layer carbon nanotube// Journal of Materials Physics and Mechanics. 2024. Vol. 52. №1. P. 26-38.
35. Norrie D.H., De Vries G. An Introduction to Finite Element Analysis. New York: Academic Press, 1978. 301 p.
36. Gallagher R.H. Finite Element Analysis: Fundamentals. Pearson College Div. First Edition, 1975. 420 p.

Сведения об авторах:

Саркисян Самвел Оганесович – чл.-корр. НАН РА, д.ф.м.н, проф., заведующий лабораторией «Механики материалов и конструкций нано- и микротехники» Ширакского государственного университета им. М. Налбандяна,
Тел.:(37493)151698. **E-mail:** s_sargsyan@yahoo.com

Саркисян Лусине Самвеловна – к.ф.м.н., доцент, старший научный сотрудник Института Механики НАН РА,
Тел.:(37499)577790. **E-mail:** lusinehsargsyan@gmail.com

Жамакочян Кнарик Араратовна- к.ф.м.н., доцент, старший научный сотрудник Ширакского государственного университет имени М. Налбандяна,
Тел.: (37493)873294. **E-mail:** knarikzhamakochyan@mail.ru.

Поступила в редакцию 4-ого марта 2026 г.