

МЕХАНИКА

УДК 539.3

Член-корреспондент НАН РА С. О. Саркисян

Дискретная и континуально-моментная модели графена для деформаций в своей плоскости

(Представлено 11/VII 2019)

Ключевые слова: *графен; деформация в своей плоскости; дискретно-континуальная, континуально-моментная теории; упругие постоянные.*

Введение. Бурное развитие нанотехнологий привело к открытию новых механических и физических свойств материалов, имеющих структурные элементы наноразмерного масштаба [1]. С этой точки зрения актуальность приобрела проблема математического моделирования таких материалов на микроскопическом масштабном уровне (построение дискретной или дискретно-континуальной модели) и далее построения соответствующей континуальной модели [1, 2].

Существование наноматериалов типа графена и углеродной нанотрубки привело к необходимости при построении дискретной модели учитывать моментное (независимое) и нецентральное силовое взаимодействие между атомами материала [3-5]. В [6, 7] исходя из таких предположений построены дискретно-моментная и континуально-микрополярная (одномерная, стержневая) модели для линейной цепочки атомов.

В [8-12] применительно к структурам масштаба нанометра принимается подход построения стержневой системы (дискретно-континуальной), эквивалентной атомной модели. В этих работах как стержневая модель выбрана классическая теория стержней без учета или с учетом изгибной деформации.

В данной статье этот подход развивается и для деформаций графена в своей плоскости (при построении дискретной модели). Как стержневая модель для стержневой системы, заменяющей атомную, выбрана континуально-микрополярная стержневая модель, построенная в [6, 7]. Осуществлен предельный переход от стержневой системы к континуальной модели плоского напряженного состояния графена и показано, что эта модель представляет собой модель плоского напряженного состояния моментной

(микрополярной) теории упругости (для изотропного случая) с независимыми полями перемещений и вращений [13, 14]. В итоге определены упругие постоянные, в том числе и моментные постоянные, через постоянные атомной структуры.

1. Постановка задачи. Предметом изучения является графен (двумерный материал), который представляет собой самое тонкое вещество (состоит из одного атомного слоя, рис. 1, а). Будем считать, что каждый атом взаимодействует лишь с ближайшими соседними атомами (рис. 1, б).

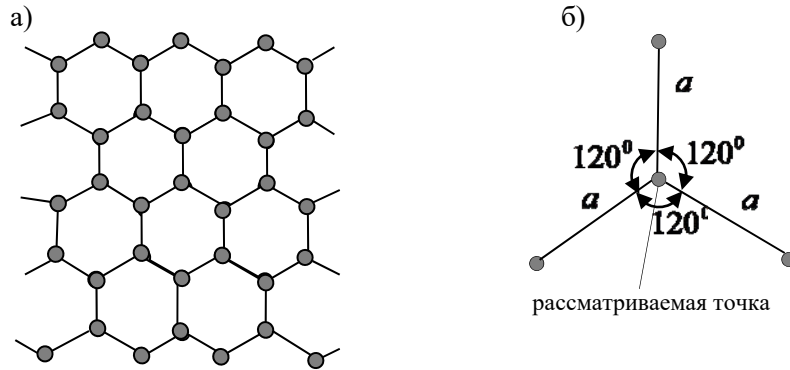


Рис. 1.

Предлагаемая в данной работе конкретная механическая модель упругой связи между атомами графена – модель упругого стержня, работающего на сжатие-растяжение, сдвиг и изгиб, построенная в работах [6, 7]. Потенциальная энергия деформации указанной модели упругого стержня имеет вид [6, 7]

$$U = \frac{1}{2} \int_0^a \left(\tilde{c}_1 \varepsilon_{\xi\xi}^2 + \tilde{c}_2 \gamma_{\xi\eta}^2 + \tilde{c}_3 \chi_{\xi\xi}^2 \right) d\xi, \quad (1.1)$$

где ξ – ось стержня, a – длина стержня (расстояние между атомами графена), $\varepsilon_{\xi\xi}$ – относительная деформация сжатия-растяжения вдоль оси ξ , $\gamma_{\xi\eta}$ – сдвиговая деформация в плоскости $\xi\eta$, $\chi_{\xi\xi}$ – кривизна оси стержня при изгибной деформации (в плоскости графена $\xi\eta$), $\tilde{c}_i (i=1,2,3)$ – упругие постоянные для соответствующих деформаций.

Кинетическая энергия рассматриваемого стержня выражается формулой [6, 7]

$$K = \frac{1}{2} \int_0^a \left[\tilde{\rho} \left(\frac{\partial u_\xi}{\partial t} \right)^2 + \tilde{\rho} \left(\frac{\partial u_\eta}{\partial t} \right)^2 + \tilde{I} \left(\frac{\partial \Omega_z}{\partial t} \right)^2 \right] d\xi, \quad (1.2)$$

где $\tilde{\rho}$ – линейная плотность массы, $\tilde{I}$ – линейная плотность момента инерции, u_ξ – продольное перемещение, u_η – изгибное перемещение, Ω_z – угловой независимый поворот атома (ось z перпендикулярна к плоскости $\xi\eta$).

Для дальнейшего изучения задачи можно развивать два подхода:

а) дискретно-континуальный: в этом случае необходимо разрабатывать модель применения метода конечных элементов для одного стержня, затем для ячейки периодичности (рис. 1, б) и далее для всей рассматриваемой области графена с учетом соответствующих граничных условий;

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

Отметим, что основной целью данной работы являются, во-первых, построение континуальной модели для деформаций графена в своей плоскости и, во-вторых, сравнение этой модели с теорией плоской задачи моментной теории упругости и определение упругих постоянных этой теории через параметры атомной структуры графена. Развитию подхода а) будет посвящена отдельная статья.

2. Построение континуально-моментной модели для деформаций графена в своей плоскости. Потенциальная энергия деформаций и кинетическая энергия движения для ячейки периодичности (рис. 1, б) выражаются формулами

$$U = \sum_{k=1}^3 U_k, \quad K = \sum_{k=1}^3 K_k, \quad (2.1)$$

где U_k и K_k – потенциальная и кинематическая энергии k -го стержня ($k = 1, 2, 3$), которые определяются формулами (1.1), (1.2).

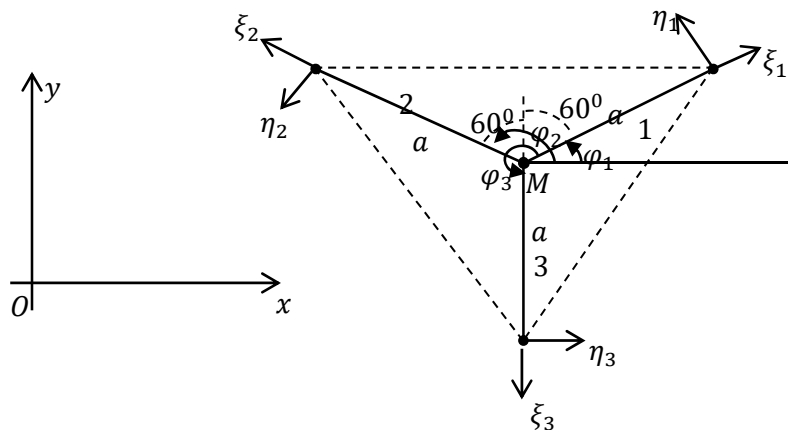


Рис. 2.

Приближенное значение поверхностной интенсивности энергии получим делением среднего значения суммарной энергии на площадь ячейки периодичности $S \left(S = \frac{3\sqrt{3}a^2}{4} \right)$. После предельного перехода ($a \rightarrow 0$) полу-

чим для соответствующей континуальной теории выражения интенсивностей потенциальной энергии деформации и кинетической энергии движения в данной точке плоскости графена. Если обозначить приближенное значение интенсивности потенциальной энергии деформации ячейки периодичности через $\bar{U}_0$, а приближенное значение интенсивности кинетической энергии ячейки периодичности – через $\bar{K}_0$, то для них будем иметь

$$\begin{aligned} \bar{U}_0 = \frac{2\sqrt{3}}{9a} & \left\{ \tilde{c}_1 e_{\xi_1 \xi_1}^2 + \tilde{c}_2 \gamma_{\xi_1 \eta_1}^2 + \tilde{c}_3 \chi_{\xi_1 \xi_1}^2 \right\}_{\left(\xi_1^*, 0 \right)}_{\left(x=x_1^*, y=y_1^* \right)} + \\ & + \left\{ \tilde{c}_1 e_{\xi_2 \xi_2}^2 + \tilde{c}_2 \gamma_{\xi_2 \eta_2}^2 + \tilde{c}_3 \chi_{\xi_2 \eta_2}^2 \right\}_{\left(\xi_2^*, 0 \right)}_{\left(x=x_2^*, y=y_2^* \right)} + \\ & + \left\{ \tilde{c}_1 e_{\xi_3 \xi_3}^2 + \tilde{c}_2 \gamma_{\xi_3 \eta_3}^2 + \tilde{c}_3 \chi_{\xi_3 \eta_3}^2 \right\}_{\left(\xi_3^*, 0 \right)}_{\left(x=x_3^*, y=y_3^* \right)}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$\begin{aligned} \bar{K}_0 = \frac{2\sqrt{3}}{9a} & \left\{ \tilde{\rho} \left(\frac{\partial u_{\xi}}{\partial t} \right)^2 + \tilde{\rho} \left(\frac{\partial u_{\eta}}{\partial t} \right)^2 + \tilde{I} \left(\frac{\partial \Omega_z}{\partial t} \right)^2 \right\}_{\left(\xi_1^{**}, 0 \right)}_{\left(x=x_1^{**}, y=y_1^{**} \right)} + \\ & + \left\{ \tilde{\rho} \left(\frac{\partial u_{\xi}}{\partial t} \right)^2 + \tilde{\rho} \left(\frac{\partial u_{\eta}}{\partial t} \right)^2 + \tilde{I} \left(\frac{\partial \Omega_z}{\partial t} \right)^2 \right\}_{\left(\xi_2^{**}, 0 \right)}_{\left(x=x_2^{**}, y=y_2^{**} \right)} + \\ & + \left\{ \tilde{\rho} \left(\frac{\partial u_{\xi}}{\partial t} \right)^2 + \tilde{\rho} \left(\frac{\partial u_{\eta}}{\partial t} \right)^2 + \tilde{I} \left(\frac{\partial \Omega_z}{\partial t} \right)^2 \right\}_{\left(\xi_3^{**}, 0 \right)}_{\left(x=x_3^{**}, y=y_3^{**} \right)}, \end{aligned} \quad (2.3)$$

где $(\xi_k^*, 0)$ или (x_k^*, y_k^*) , $(\xi_k^{**}, 0)$ или (x_k^{**}, y_k^{**}) ($k=1,2,3$) – точки на оси k -го стержня ячейки периодичности, диктуемыми теоремой о среднем значении соответствующих определенных интегралов.

Понятно, что при $a \rightarrow 0$ (x_k^*, y_k^*) , тогда $(x_k^{**}, y_k^{**}) \rightarrow (x, y)$ ($k=1,2,3$), где (x, y) – координаты точки M в системе координат (x, y) (рис. 2).

После предельного перехода для полученной континуальной модели необходимо $e_{\xi_k \xi_k}, \gamma_{\xi_k \eta_k}, \chi_{\xi_k \xi_k}$ ($k=1,2,3$) выражать через величины $e_{xx}, \gamma_{xy}, \chi_{xx}$ в координатной системе xy . В итоге

$$\begin{aligned} e_{\xi\xi} &= e_{xx} \cos^2 \varphi + e_{yy} \sin^2 \varphi + (\gamma_{xy} + \gamma_{yx}) \sin \varphi \cos \varphi, \\ \gamma_{\xi\eta} &= (-e_{xx} + e_{yy}) \sin \varphi \cos \varphi - \gamma_{yx} \sin^2 \varphi + \gamma_{xy} \cos^2 \varphi, \\ \chi_{\xi\xi} &= \chi_{xx} \cos \varphi + \chi_{yy} \sin \varphi, \end{aligned} \quad (2.4)$$

где

$$\begin{aligned} e_{xx} &= \frac{\partial u}{\partial x}, \quad e_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}, \quad \gamma_{xy} = \frac{\partial u_y}{\partial x} - \Omega, \\ \gamma_{yx} &= \frac{\partial u_x}{\partial y} + \Omega, \quad \chi_{xx} = \frac{\partial \Omega}{\partial x}, \quad \chi_{yy} = \frac{\partial \Omega}{\partial y}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Здесь следует добавить также следующие формулы:

$$\begin{aligned} u_{\xi} &= u_x \cos \varphi + u_y \sin \varphi, \\ u_{\eta} &= -u_x \sin \varphi + u_y \cos \varphi, \\ \Omega_z &= \Omega_z = \Omega. \end{aligned} \quad (2.6)$$

В формулах (2.4), (2.6) следует иметь в виду, что для первого стержня $\varphi = \varphi_1 = \frac{\pi}{6}$, для второго $\varphi = \varphi_2 = \frac{5\pi}{6}$, для третьего $\varphi = \varphi_3 = \frac{3\pi}{2}$.

Имея в виду ((2.4), (2.6), а также [6, 7]), что $\tilde{C}_k = aC_k$ ($k=1,2,3$), для плотностей потенциальной энергии деформации и кинетической энергии движения континуальной модели в единой системе координат xy получим

$$\begin{aligned} U_0 &= \frac{1}{2} \frac{4\sqrt{3}}{9} \left\{ \left(\frac{9}{8}c_1 + \frac{3}{8}c_2 \right) e_{xx}^2 + \left(\frac{9}{8}c_1 + \frac{3}{8}c_2 \right) e_{yy}^2 + \left(\frac{3}{4}c_1 - \frac{3}{4}c_2 \right) e_{xx}e_{yy} + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{3}{8}c_1 + \frac{9}{8}c_2 \right) \gamma_{yy}^2 + \left(\frac{3}{8}c_1 + \frac{9}{8}c_2 \right) \gamma_{yx}^2 + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{3}{4}c_1 - \frac{3}{4}c_2 \right) \gamma_{xy}\gamma_{yx} + \frac{3}{2}c_3\chi_{xx}^2 + \frac{3}{2}c_3\chi_{yy}^2 \right\}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$K_0 = \frac{1}{2} \frac{4\sqrt{3}}{3} \left[\rho_0 \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} \right)^2 + \rho_0 \left(\frac{\partial u_y}{\partial t} \right)^2 + I_0 \left(\frac{\partial \Omega}{\partial t} \right)^2 \right], \quad (2.8)$$

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

Принцип Гамильтона для построенной континуальной модели графена запишем в обычном виде

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \iint_{(S)} (U_0 - K_0) dx dy \right\} dt = 0, \quad (2.9)$$

где U_0 и K_0 определяются формулами (2.7) и (2.8).

Из принципа Гамильтона (2.9) следуют уравнения движения, выраженные через u_x, u_y и Ω , а также граничные условия.

3. Модель плоской задачи моментной теории упругости с независимыми полями перемещений и вращений как модель графена для деформаций в своей плоскости. Определение упругих постоянных моментной теории упругости через параметры атомной структуры графена. Рассмотрим принцип Гамильтона для плоского напряженного состояния моментной теории упругости с независимыми полями перемещений и вращений [14, 16]. Это вариационное уравнение можем записать в виде (2.9), где на этот раз имеем

$$\begin{aligned} \bar{U}_0 = \frac{1}{2} a \left[\frac{E}{1-\nu^2} e_{xx}^2 + \frac{E}{1-\nu^2} e_{yy}^2 + \frac{2E\nu}{1-\nu^2} e_{xx} e_{yy} + (\mu + \alpha) \gamma_{xy}^2 + (\mu + \alpha) \gamma_{yx}^2 \right. \\ \left. + 2(\mu - \alpha) \gamma_{xy} \gamma_{yx} + B \chi_{xz}^2 + B \chi_{yz}^2 \right] \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$\bar{K}_0 = \frac{1}{2} \left[\rho_0 \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} \right)^2 + \rho_0 \left(\frac{\partial u_y}{\partial t} \right)^2 + I_0 \left(\frac{\partial \Omega}{\partial t} \right)^2 \right]. \quad (3.2)$$

Здесь E, ν, μ, α, B — упругие коэффициенты указанной модели.

Сравнивая формулы (2.7) и (3.1), а также (2.8) и (3.2), получим следующие равенства:

$$\begin{aligned} \frac{4\sqrt{3}}{9a} \left(\frac{9}{8} C_1 + \frac{3}{8} C_2 \right) = \frac{E}{1-\nu^2}, \quad \frac{4\sqrt{3}}{9a} \left(\frac{3}{4} C_1 - \frac{3}{4} C_2 \right) = \frac{2E\nu}{1-\nu^2}, \\ \frac{4\sqrt{3}}{9a} \left(\frac{3}{8} C_1 + \frac{9}{8} C_2 \right) = \mu + \alpha, \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\frac{4\sqrt{3}}{9a} \left(\frac{3}{4} C_1 - \frac{3}{4} C_2 \right) = 2(\mu - \alpha), \quad \frac{4\sqrt{3}}{9a} \cdot \frac{3}{2} C_3 = B.$$

Решая систему уравнений (3.3) относительно E, ν, μ, α и B , получим

$$\begin{aligned} E = \frac{4\sqrt{3}}{3a} \cdot \frac{C_1(C_1 + C_2)}{3C_1 + C_2}, \quad \mu = \frac{\sqrt{3}}{6a} \cdot (C_1 + C_2), \quad \alpha = \frac{\sqrt{3}}{3a} \cdot C_2, \\ \nu = \frac{C_1 - C_2}{3C_1 + C_2}, \quad B = \frac{2\sqrt{3}}{3a} \cdot C_3. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Равенства (3.4) определяют упругие постоянные моментной теории упругости через постоянные атомной структуры графена.

Легко проверить, что на основе (3.4) имеет место известное равенство

$$\mu = \frac{E}{2(1 + \nu)}.$$

Таким образом, вариационное уравнение Гамильтона (2.10), когда потенциальная энергия деформации выражается формулой (3.1) (в которой упругие постоянные выражаются формулами (3.4)), а кинетическая энергия движения – формулой (3.2), представляет собой вариационное уравнение Гамильтона для континуальной теории деформаций графена в своей плоскости. Континуальная теория в свою очередь представляет плоское напряженное состояние моментной теории упругости с независимыми полями перемещений и вращений.

На основе указанного вариационного уравнения Гамильтона для континуальной теории можем получить уравнения движения в перемещениях и повороте, а также граничные условия.

Работа выполнена при финансовой поддержке ГКН МОН РА в рамках научного проекта 18RF-106.

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

Член-корреспондент НАН РА С. О. Саркисян

Дискретная и континуально-моментная модели графена для деформаций в своей плоскости

Построена дискретно-континуальная модель (модель стержневой системы) графена для деформаций в своей плоскости. Предельным переходом построена континуальная модель для таких деформаций как модель плоского напряженного состояния моментной теории упругости с независимыми полями перемещений и вращений. Определены упругие постоянные моментной теории упругости через параметры атомной структуры графена.

ՀՀ ԳԱԱ թղթակից անդամ Ս. Ն. Մարգարյան

Գրաֆենի՝ իր հարթության մեջ դեֆորմացիայի դիսկրետ և կոնտինուալ-մոմենտային մոդելները

Կառուցված է գրաֆենի՝ իր հարթության մեջ դեֆորմացիայի դիսկրետ-կոնտինուալ մոդելը (ձողային համակարգի մոդելը): Սահմանային անցումով կառուցվել է այդ դեֆորմացիայի կոնտինուալ մոդելը՝ որպես տեղափոխությունների և պտույտների անկախ դաշտերով առաձգականության մոմենտային տեսությամբ հարթ լարվածային վիճակի մոդել: Գրաֆենի ատոմային կառուցվածքի պարամետրերի միջոցով որոշված են մոմենտային առաձգականության տեսության առաձգական հաստատունները:

Corresponding member of NAS RA S. H. Sargsyan

**Discrete and Continual-Moment Models of Graphene
for Deformations in Its Plane**

In this paper a discrete-continual model (a model of beam system) of graphene for deformations in its own plane is constructed. Further, a continual model for this deformations is constructed as a model of a plane stress state of the moment theory of elasticity with independent fields of displacements and rotations. The elastic constants of the moment theory of elasticity are determined through the parameters of the atomic structure of graphene.

Литература

1. *Морозов Н. Ф.* – Механика твердого тела. 2005. № 4. С. 188-189.
2. *Гуткин М. Ю., Кривцов А. М., Морозов Н. Ф., Семенов Б. Н.* В сб.: Проблемы механики деформируемых твердых тел и горных пород, посвященном 75-летию академика РАН Е. И. Шемякина. М. Наука. 2006. С. 221-242.
3. *Иванова Е. А., Кривцов А. М., Морозов Н. Ф., Фарсова А. Д.* – Доклады РАН. 2003. Т. 391. № 6. С. 764-768.
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. *Саркисян С. О.* В кн.: Перспективные материалы и технологии: моногр. в 2-х томах. Т. 2. Витебск. УО «ВГТУ». 2019. С. 19-26.
8. *Odegard G. M., Gates T. S., Nicholson L. M., Wise K. E.* In: Technical Memorandum NASA/TM-2001-210863, NASA Langley Research Center, Langley, 2001.
9. *Гольдштейн Р. В., Ченцов А. В.* – Изв. РАН. Механика твердого тела. 2005. № 4. С. 57-74.
10. *Li C. A., Chou T. W.* – Int. J. Solids Struct. 2003. V. 40. P. 2487-2499.
11. *Беринский И. Е.* – Научно-техн. ведомости СПбГПУ. 2010. № 104. С. 13-20.
12. *Wan H., Delale F.* – Meccanica. 2010. V. 45. P. 43-51.
13. *Саркисян С. О.* – Прикладная математика и механика. 2008. Т. 72. Вып. 1. С. 129-147.
14. *Nowacki W.* Theory of Asymmetric Elasticity. Oxford. Pergamon. 1986. 383 p.
15. *Саркисян С. О.* – Физическая мезомеханика. 2008. Т. 11. № 5. С. 41-54.
16. *Sargsyan S. H.* – Internat. Journal of Mechanics. 2014. V. 8. P. 93-100.