

КОНТИНУАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ДЕФОРМАЦИИ ГРАФЕНА**Н. Ф. Морозов^{1,2}, П. Е. Товстик¹, Т. П. Товстик²*¹ Санкт-Петербургский государственный университет,
Российская Федерация, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7/9² Институт проблем машиноведения РАН (ИПМаш РАН),
Российская Федерация, 199178, Санкт-Петербург, Большой пр. В. О., 61

Исследуется однослойный лист графена. Предполагается, что полная потенциальная энергия рассматриваемой системы состоит из четырех частей: во-первых, из энергии растяжения связи между двумя соседними атомами (потенциал Морзе); во-вторых, из энергии изменения угла между тремя соседними атомами (потенциал Бреннера); в третьих, из энергии выхода атома из плоскости, определяемой тремя соседними атомами. В четвертых, из энергии кручения четырех соседних атомов. Силами Ван-дер-Ваальса пренебрегаем. Рассматриваем только малые деформации. С использованием длинноволнового приближения выведена двухмерная энергия растяжения и изгиба. В результате получена эквивалентная пластина с соответствующими упругими модулями растяжения и изгиба. Найдены частоты собственных колебаний прямоугольной пластины. Исследована устойчивость при сжатии в плоскости пластины. С этой целью в тангенциальные напряжения выведены нелинейные слагаемые, зависящие от поперечных перемещений. Полученные результаты сравниваются с результатами других авторов, полученными методом молекулярной динамики. Библиогр. 16 назв. Ил. 1.

Ключевые слова: графен, жесткость, колебания, устойчивость.

1. Введение. В последнее десятилетие графен активно используется в нанотехнологиях. Кроме того, однослойный лист графена является объектом, на котором отрабатываются методы исследования деформаций, динамики и прочности более сложных объектов наномеханики: графита, флюорографена, нанотрубки, фуллерена и других. Основным методом исследования является метод динамики частиц [1], при котором численно исследуется движение большого числа взаимодействующих частиц. При этом вводятся различные модели (потенциалы) взаимодействия. Модель парного силового взаимодействия, при которой потенциал зависит только от расстояния между частицами, для графена оказывается несостоятельной, ибо приводит к неустойчивости равновесной конфигурации [2].

Для исследования тангенциальной деформации графена предложена модель парного моментного взаимодействия [2–5], при которой каждая частица имеет три степени свободы — две поступательных и одну вращательную. Наряду с силовым взаимодействием вводится момент взаимодействия, зависящий от углов поворота частиц. На базе этой модели исследована устойчивость графена при больших деформациях [6], рассмотрен вопрос о распространении плоских волн в графене [7].

Альтернативной является модель трехчастичного взаимодействия [8, 9], при которой наряду с силовым взаимодействием в выражение упругой энергии вводится слагаемое, зависящее от изменения угла между тремя частицами. Заметим, что при осреднении модель парного моментного взаимодействия приводит к двухмерной моментной среде Коссера, а модель трехчастичного взаимодействия приводит к изотропной двухмерной среде [7].

Для описания изгибной деформации наряду с парным и трехчастичным взаимодействием вводится четырехчастичное взаимодействие [10–13], при котором учитывается энергия выхода частицы из плоскости, определяемой тремя другими частицами. Этот подход используется и в настоящей статье.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 12.01.92000.ННС-а, 10-01.00244а).

Эти потенциалы позволяют построить уравнения динамики системы частиц. В результате численного интегрирования решены задачи о свободных колебаниях и динамической потере устойчивости [13]. Для задачи свободных колебаний прямоугольной пластинки в [12] приведены приближенные формулы для частот колебаний, которые построены при аппроксимации методом наименьших квадратов численных результатов, полученных при анализе динамики системы частиц.

Целью настоящей работы является построение модели двумерной сплошной среды, которая в длинноволновом приближении описывает деформации листа графена. Потенциальная энергия представлена в виде суммы четырех слагаемых, учитывающих изменение расстояний между частицами и другие деформации, определяемые перемещением ближайших к данной частице соседей. Силы Ван-дер-Ваальса и температурное движение частиц не учитываются. Для малых деформаций эта модель описывает как тангенциальные, так и изгибные деформации и колебания графена, а также устойчивость его плоской формы при тангенциальных деформациях. Для исследования устойчивости в модель введены нелинейные слагаемые типа Кармана, пропорциональные квадратам малых углов поворота при выходе частиц из плоскости графена. Построенная модель позволяет говорить о существовании эквивалентной пластины, для которой могут быть применены известные методы исследования.

Отметим дополнительно, что в [14] предложена двумерная модель нелокального взаимодействия, в которой сделана попытка учесть дискретную структуру среды путем воздействия оператором $L = 1 - a^2\Delta$ на обычные напряжения, где Δ — оператор Лапласа, a — малый множитель. Подробнее эта модель здесь не обсуждается.

2. Модель взаимодействия между атомами графена. Рассмотрим малые деформации и колебания однослойного листа графена. В положении равновесия частицы образуют плоскую систему правильных шестиугольников со стороной a_0 . Считаем, что каждая частица имеет три степени свободы, две из которых описывают смещения в плоскости графена и одна — из плоскости. Пренебрегая силами Ван-дер-Ваальса энергию упругого взаимодействия Π можно приближенно представить в виде суммы четырех слагаемых [13]:

$$\Pi = \Pi_1 + \Pi_2 + \Pi_3 + \Pi_4. \quad (2.1)$$

Потенциал Π_1 учитывает изменение расстояния между парами частиц (например, расстояния 01), потенциал Π_2 учитывает изменение углов между тройками частиц (например, угла 102 на рис. 1), потенциал Π_3 описывает энергию выхода частицы из плоскости, содержащей трех ее ближайших соседей (например, частицы θ из плоскости 123), наконец, потенциал Π_4 описывает энергию кручения цепочки из четверок частиц и зависит от изменения угла между двумя плоскостями (например, для цепочки $0-1-4-10$ — от угла между плоскостями $0-1-4$ и $1-4-10$).

Рассмотрим энергию, приходящуюся на частицу θ . Имея в виду рассмотрение малых деформаций, в потенциалах Π_1 , Π_2 и Π_3 учитываем влияние только трех ближайших к точке θ соседей, а в потенциале Π_4 — цепочки из точки θ и трех ближайших к ней точек (таких цепочек 12).

В общем случае потенциал Π_1 задается нелинейной функцией расстояния r (потенциал Леннарда—Джонса [15], потенциал Морзе и др.). Для малых деформаций возьмем

$$\Pi_1 = \frac{1}{2}c_1e^2, \quad (2.2)$$

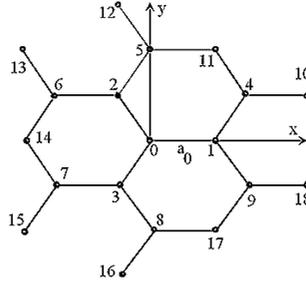


Рис. 1. Взаимодействующие точки.

где c_1 — упругая постоянная, e — деформация отрезка, соединяющего частицы. Точно также для малых деформаций возьмем приближенное представление потенциала Бреннера [9]

$$\Pi_2 = \frac{1}{2}c_2(\Delta\varphi)^2, \quad (2.3)$$

где c_2 — упругая постоянная, $\Delta\varphi$ — изменение угла между частицами (например, угла 102). Потенциалы Π_3 и Π_4 в случае малых деформаций возьмем в виде

$$\Pi_3 = \frac{1}{2}c_3\delta_3^2, \quad \Pi_4 = \frac{1}{2}c_4\delta_4^2, \quad (2.4)$$

где δ_3 и δ_4 — расстояния от точки 0 до плоскостей, проходящих через точки 123 и через точки $1-4-10$ соответственно.

3. Потенциальная энергия тангенциальной деформации. Рассмотрим сначала энергию тангенциальной деформации, определяемую потенциалами Π_1, Π_2 . Совместим начало координат с точкой 0 . Пусть u_i, v_i, w_i — проекции перемещений \mathbf{r}_i точек $1, 2, 3$ на оси декартовой системы координат $Oxyz$ с началом в точке 0 . Координаты точек после деформации имеют вид

$$x_i = x_i^0 + u_i, \quad y_i = y_i^0 + v_i, \quad z_i = w_i, \quad i = 1, 2, 3, \quad (3.1)$$

где x_i^0, y_i^0 — координаты тех же точек до деформации, причем

$$x_i^0 = \alpha_i a_0, \quad y_i^0 = \beta_i a_0, \quad \alpha_i = \cos \frac{2\pi(i-1)}{3}, \quad \beta_i = \sin \frac{2\pi(i-1)}{3}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (3.2)$$

Согласно формулам (2.2) и (2.3) для трех ближайших соседей получаем

$$\begin{aligned} \Pi_1 &= \frac{1}{2}c_1(e_1^2 + e_2^2 + e_3^2), \quad e_i = \frac{|\Delta\mathbf{r}_i|}{a_0}, \quad \Delta\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_i^0, \quad i = 1, 2, 3, \\ \Pi_2 &= \frac{1}{2}c_2((\Delta\varphi_{12})^2 + (\Delta\varphi_{23})^2 + (\Delta\varphi_{31})^2), \end{aligned} \quad (3.3)$$

где e_1, e_2, e_3 — деформации отрезков $01, 02, 03$. Изменения $\Delta\varphi_{12}, \Delta\varphi_{23}, \Delta\varphi_{31}$ углов $102, 203, 301$ при деформации находим из соотношения

$$\Delta\mathbf{r}_i \cdot \Delta\mathbf{r}_j = |\Delta\mathbf{r}_i| |\Delta\mathbf{r}_j| \cos \left(\frac{2\pi}{3} + \Delta\varphi_{ij} \right). \quad (3.4)$$

Найдем приближенное выражение энергии тангенциальной деформации для малых деформаций. Имеем

$$e_i = \frac{x_i^0 u_i + y_i^0 v_i + w_i^2/2}{a_0^2},$$

$$\Delta\varphi_{ij} = -\frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{x_i^0 u_j + x_j^0 u_i + y_i^0 v_j + y_j^0 v_i + w_i w_j}{a_0^2} + \frac{1}{2}(e_i + e_j) \right). \quad (3.5)$$

В приближенных формулах для e_i и $\Delta\varphi_{ij}$ включены линейные слагаемые по отношению к u_i , v_i и слагаемые второго порядка малости по отношению к w_i . Последние необходимо вводить в рассмотрение при исследовании устойчивости листа графена при тангенциальной деформации.

Сделаем *предположение 1*: существуют гладкие функции $u(x, y)$, $v(x, y)$, $w(x, y)$, описывающие перемещения точек.

Тогда

$$u_i = a_0(\alpha_i u_{,x} + \beta_i u_{,y}), \quad v_i = a_0(\alpha_i v_{,x} + \beta_i v_{,y}), \quad w_i = a_0(\alpha_i w_{,x} + \beta_i w_{,y}), \quad (3.6)$$

где $u_{,x} = \partial u / \partial x$ и т. п. — частные производные. В этих обозначениях получаем выражения для энергии Π_1 и энергии Π_2 :

$$\Pi_1 = \frac{3c_1}{16} (3u_{,x}^2 + 2u_{,x}v_{,y} + 3v_{,y}^2 + \omega^2 + u_{,x}(3w_{,x}^2 + w_{,y}^2) + v_{,y}(w_{,x}^2 + 3w_{,y}^2) + 2\omega w_{,x}w_{,y}),$$

$$\Pi_2 = \frac{9c_2}{16} (u_{,x}^2 - 2u_{,x}v_{,y} + v_{,y}^2 + \omega^2 + u_{,x}(w_{,x}^2 - w_{,y}^2) + v_{,y}(w_{,y}^2 - w_{,x}^2) + 2\omega w_{,x}w_{,y}), \quad (3.7)$$

где $\omega = u_{,y} + v_{,x}$, а малые слагаемые с множителями $w_{,x}^4$, $w_{,x}^2 w_{,y}^2$, $w_{,y}^4$ отброшены.

Введем плотность энергии тангенциальной деформации

$$U_{12} = \frac{1}{\Delta S} \left(\frac{1}{2}\Pi_1 + \Pi_2 \right), \quad \Delta S = \frac{3\sqrt{3}a_0^2}{4}, \quad (3.8)$$

отнесенную к единице площади. Здесь ΔS — площадь, приходящаяся на одну частицу. Множитель $1/2$ введен связи с тем, что энергия Π_1 учитывается дважды.

Тангенциальные напряжения находим по формулам

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial U_{12}}{\partial u_{,x}} = E(u_{,x} + \nu v_{,y}) - \frac{3}{32} (\hat{c}_1(3w_{,x}^2 + w_{,y}^2) + 6\hat{c}_2(w_{,x}^2 - w_{,y}^2)),$$

$$\sigma_{yy} = \frac{\partial U_{12}}{\partial v_{,y}} = E(v_{,y} + \nu u_{,x}) - \frac{3}{32} (\hat{c}_1(3w_{,y}^2 + w_{,x}^2) + 6\hat{c}_2(w_{,y}^2 - w_{,x}^2)), \quad (3.9)$$

$$\sigma_{xy} = G\omega + \frac{3}{16}(\hat{c}_1 + 6\hat{c}_2)w_{,x}w_{,y},$$

где

$$E = \frac{9(\hat{c}_1 + \hat{c}_2)}{8}, \quad \nu = \frac{\hat{c}_1 - 6\hat{c}_2}{3(\hat{c}_1 + 2\hat{c}_2)}, \quad G = \frac{3(\hat{c}_1 + 6\hat{c}_2)}{16}, \quad \hat{c}_1 = \frac{c_1}{\Delta S}, \quad \hat{c}_2 = \frac{c_2}{\Delta S}, \quad (3.10)$$

причем выполнено соотношение $G = E(1 - \nu)/2$. Следовательно, при $w \equiv 0$ получена двухмерная изотропная сплошная среда.

4. Потенциальная энергия изгибной деформации. Найдем энергию деформации, приходящуюся на точку θ . Рассмотрим длинноволновое приближение и предположим, что в окрестности точки θ соседние точки располагаются на поверхности второго порядка:

$$z = f(x, y) = \frac{1}{2}k_1x^2 + \tau xy + \frac{1}{2}k_2y^2, \quad (4.1)$$

где k_1, k_2, τ — кривизны и кручение поверхности (4.1). Вычисляя расстояния $z_0 = \delta_3$ и $z_0 = \delta_4$, входящие в формулы (2.4), находим искомую энергию $\Pi_{34} = \Pi_3 + \Pi_4$. При этом энергия Π_4 состоит из 12 слагаемых. Цепочки $0-1-4-10, 0-1-4-10, 0-1-9-18, 0-1-9-17$, формирующие четыре слагаемых и содержащие отрезок 01 , показаны на рис. 1. Аналогично восемь цепочек точек содержат отрезки 02 и 03 . Всего с частицей θ учитывается взаимодействие 18 частиц (рис. 1). Расстояния z_0 находим из равенства нулю определителя третьего порядка:

$$\begin{vmatrix} x_i & y_i & z_i - z_0 \\ x_j & y_j & z_j - z_0 \\ x_k & y_k & z_k - z_0 \end{vmatrix} = 0, \quad (4.2)$$

где i, j, k — номера точек на плоскости, расстояние до которой вычисляется.

Сумма 13 упомянутых выше слагаемых дает энергию, приходящуюся на одну точку:

$$\Pi(k_1, k_2, \tau) = \frac{c_3 a_0^2}{32} (k_1 + k_2)^2 + \frac{3c_4 a_0^2}{2} (7k_1^2 - 2k_1 k_2 + 7k_2^2 + 16\tau^2). \quad (4.3)$$

Как и выше, плотность потенциальной энергии изгибной деформации U_{34} выражается по формуле (4.3), в которой вместо c_3, c_4 следует положить

$$\hat{c}_3 = \frac{c_3}{\Delta S}, \quad \hat{c}_4 = \frac{c_4}{2\Delta S}, \quad \Delta S = \frac{3\sqrt{3}a_0^2}{4}. \quad (4.4)$$

При этом энергия цепочки учитывается дважды, ибо она входит при рассмотрении каждого из двух ее концов.

5. Полная потенциальная энергия. Полная потенциальная энергия системы U может быть найдена суммированием по всем частицам потенциальной энергии тангенциальной и изгибной деформации. Предполагая, что плотность энергии мало меняется при переходе от одной точки к другой, заменяем суммирование интегрированием по площади S пластины. В результате получаем

$$U = \iint_S (U_{12} + U_{34}) dx dy. \quad (5.1)$$

После преобразований запишем энергию в виде

$$\begin{aligned} U = & \frac{E}{2} \iint_S \left(u_{,x}^2 + 2\nu u_{,x} v_{,y} + v_{,y}^2 + \frac{1-\nu}{2} (u_{,y} + v_{,x})^2 \right) dx dy + \\ & + \frac{D}{2} \iint_S \left(w_{,xx}^2 + 2\nu_b w_{,xx} w_{,yy} + w_{,yy}^2 + 2(1-\nu_b) w_{,xy}^2 \right) dx dy + \\ & + \frac{1}{2} \iint_S \left(\sigma_{xx} w_{,x}^2 + 2\sigma_{xy} w_{,x} w_{,y} + \sigma_{yy} w_{,y}^2 \right) dx dy, \end{aligned} \quad (5.2)$$

где величины E и ν определены формулами (3.10), частные производные $w_{,xx}$, $w_{,yy}$, $w_{,xy}$ равны кривизнам и кручению поверхности (4.1),

$$D = \frac{a_0^2(\hat{c}_3 + 168\hat{c}_4)}{16}, \quad \nu_b = \frac{\hat{c}_3 - 24\hat{c}_4}{\hat{c}_3 + 168\hat{c}_4}, \quad (5.3)$$

а тангенциальные напряжения σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{xy} вычисляются по формулам (3.9), в которых считаем $w = 0$.

Потенциальная энергия (5.2) соответствует пластине, подверженной тангенциальным и изгибным деформациям, причем E — жесткость при растяжении, D — изгибная жесткость. Коэффициенты Пуассона ν и ν_b оказались различными при тангенциальной деформации и при изгибе. Имея в виду известные формулы для пластины

$$E = \frac{E_0 h_0}{1 - \nu_0^2}, \quad D = \frac{E_0 h_0^3}{12(1 - \nu_0^2)}, \quad (5.4)$$

можно ввести эффективную толщину h_0 листа графена по формуле

$$h_0 = \sqrt{\frac{12D}{E}}. \quad (5.5)$$

В соответствии с принципом Гамильтона—Остроградского варьирование функционала

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (T - U) dt = 0 \quad (5.6)$$

по u, v, w дает уравнения движения и граничные условия. Здесь T — кинетическая энергия системы,

$$T = \frac{\rho}{2} \iint_S (u_{,t}^2 + v_{,t}^2 + w_{,t}^2) dx dy, \quad \rho = \frac{m_0}{\Delta S}, \quad (5.7)$$

где ρ — плотность, отнесенная к единице площади, m_0 — масса частицы.

Предложенный континуальный подход в ряде случаев позволяет получить явное решение. Основными источниками погрешности являются предположение 1 о существовании гладких функций $u(x, y)$, $v(x, y)$, $w(x, y)$, описывающих перемещения точек в окрестности данной точки, а также игнорирование взаимодействия с удаленными точками. В соответствии с использованным здесь длинноволновым приближением погрешность растет вместе с уменьшением длины волны деформации. Другим источником погрешности является то, что выражение энергии P_4 может быть использовано лишь для частиц, удаленных от края не менее, чем на $(2 + \sqrt{3}/2)a_0$ (см. рис. 1).

Предложенный континуальный подход нечувствителен к хиральности графена.

6. Свободные колебания прямоугольного листа графена. Рассмотрим лист графена прямоугольной формы $0 \leq x \leq a$, $0 \leq y \leq b$. Имея в виду исследование поперечных перемещений, найдем вариацию по w функционала (5.6). В результате интегрирования по частям получаем

$$\begin{aligned} \int_0^a \int_0^b (D\Delta\Delta w + \rho w_{,tt} - F) \delta w dx dy + \int_0^b M_{xx} \delta w_{,x} \Big|_{x=0}^{x=a} dy + \int_0^a M_{yy} \delta w_{,y} \Big|_{y=0}^{y=b} dx - \\ - \int_0^b Q_x \delta w \Big|_{x=0}^{x=a} dy - \int_0^a Q_y \delta w \Big|_{y=0}^{y=b} dx + 2M_{xy} \delta w \Big|_{x=0}^{x=a} \Big|_{y=0}^{y=b} = 0, \quad (6.1) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
\Delta w &= w_{,xx} + w_{,yy}, & F &= (\sigma_{xx}w_{,x})_{,x} + (\sigma_{xy}w_{,x})_{,y} + (\sigma_{xy}w_{,y})_{,x} + (\sigma_{yy}w_{,y})_{,y}, \\
M_{xx} &= D(w_{,xx} + \nu_b w_{,yy}), & M_{yy} &= D(w_{,yy} + \nu_b w_{,xx}), & M_{xy} &= D(1 - \nu_b)w_{,xy}, \\
Q_x &= D(w_{,xxx} + (2 - \nu_b)w_{,xyy}) - \sigma_{xx}w_{,x} - \sigma_{xy}w_{,y}, \\
Q_y &= D(w_{,yyy} + (2 - \nu_b)w_{,xxy}) - \sigma_{xy}w_{,x} - \sigma_{yy}w_{,y}.
\end{aligned} \tag{6.2}$$

Рассмотрим свободные поперечные колебания в предположении, что начальные напряжения отсутствуют ($F = 0$), а все края шарнирно оперты:

$$w = w_{,xx} = 0 \quad (x = 0, x = a), \quad w = w_{,yy} = 0 \quad (y = 0, y = b). \tag{6.3}$$

Формы колебаний

$$w_{mn}(x, y) = w_0 \sin \frac{m\pi x}{a_x} \sin \frac{n\pi y}{a_y}, \quad m, n = 1, 2, \dots, \tag{6.4}$$

удовлетворяют уравнению $D\Delta\Delta w + \rho w_{,tt} = 0$ и граничным условиям (6.3), и им соответствуют частоты свободных колебаний

$$\omega_{mn} = \sqrt{\frac{D}{\rho}} \left(\frac{m^2 \pi^2}{a^2} + \frac{n^2 \pi^2}{b^2} \right). \tag{6.5}$$

Область применимости формулы (6.5) ограничена условием, чтобы длины полу-волн a/m и a/n были существенно больше минимального расстояния между частицами,

$$\min\{a/m, b/n\} \gg a_0. \tag{6.6}$$

В противном случае используемое здесь длинноволновое приближение неприменимо.

7. Устойчивость прямоугольного листа графена при сжатии. Рассмотрим статическую потерю устойчивости при однородном сжатии в направлении оси x [16], положив

$$\sigma_{xx} = -p, \quad p > 0, \quad \sigma_{xy} = \sigma_{yy} = 0. \tag{7.1}$$

В предположении, что края $x = 0$ и $x = a$ шарнирно оперты, а края свободны, прогиб при потере устойчивости находим из решения краевой задачи

$$\begin{aligned}
D\Delta\Delta w + pw_{,xx} &= 0, & w &= w_{,xx} = 0 \quad (x = 0, x = a), \\
w_{,yy} + \nu_b w_{,xx} &= 0, & D(w_{,yyy} + (2 - \nu_b)w_{,xxy}) &= 0 \quad (y = 0, y = b).
\end{aligned} \tag{7.2}$$

После разделения переменных

$$w(x, y) = W(y) \sin \frac{\pi x}{a} \tag{7.3}$$

для функции $W(y)$ приходим к краевой задаче, которая имеет четное и нечетное относительно середины $y = b/2$ решения. Для четного решения, которое дает меньшее значение нагрузки

$$W(y) = C_1 \operatorname{ch}(\lambda_1(y/a - b/(2a))) + C_2 \operatorname{ch}(\lambda_2(y/a - b/(2a))), \tag{7.4}$$

уравнение для определения критической нагрузки имеет вид

$$\begin{vmatrix} (\lambda_1^2 - \nu_b) \operatorname{ch}(\lambda_1 \eta) & (\lambda_2^2 - \nu_b) \operatorname{ch}(\lambda_2 \eta) \\ (\lambda_1^3 - (2 - \nu_b) \lambda_1) \operatorname{sh}(\lambda_1 \eta) & (\lambda_2^3 - (2 - \nu_b) \lambda_2) \operatorname{sh}(\lambda_2 \eta) \end{vmatrix} = 0, \quad (7.5)$$

где

$$\lambda_{1,2}^2 = 1 \pm \sqrt{\hat{p}}, \quad \hat{p} = \frac{pa^2}{D\pi^2}, \quad \eta = \frac{b}{2a}. \quad (7.6)$$

8. Численные результаты. Возьмем следующие значения параметров: масса частицы $m_0 = 1.9927 \cdot 10^{-26}$ кг, расстояние между частицами $a_0 = 0.142 \cdot 10^{-9}$ м, масса на единицу площади $\rho = 7.608 \cdot 10^{-7}$ кг/м². Возьмем коэффициенты жесткости из [13], которые после линеаризации в наших обозначениях дают $\hat{c}_1 = 319.8$ Н/м, $\hat{c}_2 = 33.44$ Н/м, тогда по формулам (3.10) находим $E = 220.8$ Н/м, $\nu = 0.086$. Далее $a_0^2 \hat{c}_3 = 10.61$ Н/м, $a_0^2 \hat{c}_4 = 8.86$ Н/м, и по формулам (5.3) получаем $D = 93.7 a_0^2$ Нм, $\nu_b = -0.135$.

Рассмотрим свободные колебания шарнирно опертой прямоугольной пластинки с длинами сторон $a = 3.266 \cdot 10^{-9}$ м, $b = 3.433 \cdot 10^{-9}$ м. По формуле (6.5) находим первую частоту поперечных колебаний $\nu_{11} = \omega_{11}/(2\pi) = 0.442 \cdot 10^{12}$ (Гц). В [13] методом динамики частиц для той же пластины получено значение $\nu_{11} = 0.259 \cdot 10^{12}$ (Гц).

Обратимся к задаче устойчивости. Для принятых выше значений параметров находим решение уравнения (7.5) $\hat{p} = 0.984$. Тогда в силу формул (7.1) и (7.6) $\sigma_{xx} = -1.720$ (Н/м), деформация $u_{,x} = \sigma_{xx}/E = -0.00779$ и критическое сближение краев $\Delta x = a |u_{,x}| = 2.54 \cdot 10^{-11}$ (м). Та же задача в [13] решалась методом динамики частиц. Задавалось сближение двух противоположных сторон с заданной скоростью. При скорости $v = 50$ (м/с) поперечное движение начиналось при $\Delta x = 1.05 \cdot 10^{-10}$ (м), а при скорости $v = 5$ (м/с) — начиналось при $\Delta x = 3.125 \cdot 10^{-11}$ (м), т. е. количественное различие наших результатов и результатов [13] уменьшается вместе с уменьшением скорости сближения сторон.

9. Обсуждение. Сравнение наших результатов с результатами работы [13] говорит о том, что предложенная континуальная модель приводит к более жесткой пластине, чем модель, основанная на динамике частиц [13], ибо предположение 1 накладывает определенные связи на перемещения частиц. Рассмотрим этот вопрос подробнее.

В работе [7] при вычислении энергии тангенциальной деформации Π_{12} четырех частиц $\theta, 1, 2, 3$ проекции u_0, v_0 перемещения частицы θ определялись из условия минимума энергии (в п. 3 было принято $u_0 = v_0 = 0$). В результате для упругих модулей в отличие от (3.10) получаем

$$\tilde{E} = \frac{3\hat{c}_1(\hat{c}_1^2 + 18\hat{c}_1\hat{c}_2 + 27\hat{c}_2^2)}{8(\hat{c}_1 + 3\hat{c}_2)^2}, \quad \tilde{\nu} = \frac{\hat{c}_1^2 - 6\hat{c}_1\hat{c}_2 - 9\hat{c}_2^2}{\hat{c}_1^2 + 18\hat{c}_1\hat{c}_2 + 27\hat{c}_2^2}, \quad \tilde{G} = \frac{9\hat{c}_1\hat{c}_2(2\hat{c}_1 + 3\hat{c}_2)}{4(\hat{c}_1 + 3\hat{c}_2)^2}. \quad (9.1)$$

Освобождение от несуществующих связей $u_0 = v_0 = 0$ незначительно уменьшает тангенциальную жесткость пластины. Для принятых выше значений коэффициентов \hat{c}_1 и \hat{c}_2 имеем

$$E/\tilde{E} = 220.8/217.2, \quad \nu/\tilde{\nu} = 0.086/0.103, \quad G/\tilde{G} = 118.8/97.6. \quad (9.2)$$

Отметим, что коэффициенты Пуассона ν и $\tilde{\nu}$ заметно отличаются от значений $\nu = 0.17 - 0.21$, приведенных в [5]. Сближение результатов возможно лишь за счет изменения коэффициентов c_1 и c_2 в формулах (2.2) и (2.3).

Для изгибных деформаций предположение 1 приводит к значительно большей погрешности. Для ее оценки откажемся от предположения, что после деформации частицы лежат на поверхности (4.1), т.е. $z_i = f(x_i, y_i)$, $i = 0, 1, \dots, 18$. Будем искать значения z_i , ($i > 0$), для которых энергия изгибной деформации $\Pi_{34}(k_1, k_2, \tau)$ минимальна. При этом наложим ограничение, заключающееся в том, что среднеквадратичное приближение набора точек x_i, y_i, z_i поверхностью второго порядка

$$z = f(x, y) = \frac{1}{2}k_1x^2 + \tau xy + \frac{1}{2}k_2y^2 + ax + by + c, \quad (9.3)$$

приводит к тем же значениям k_1, k_2, τ , что и выше. Это ограничение будет выполнено, если взять

$$z_i = f(x_i, y_i) + \Delta z_i, \quad i = 1, 2, \dots, 18, \quad (9.4)$$

где приращения Δz_i удовлетворяют трем линейным уравнениям

$$\langle a_i^{(k)} \Delta z_i \rangle = 0, \quad k = 1, 2, 3, \quad \langle g_i \rangle \equiv \sum_{i=0}^{18} g_i, \quad (9.5)$$

причем

$$a_i^{(1)} = x_i^2 - \frac{\langle x_i^2 \rangle}{19} - x_i \frac{\langle x_i^3 \rangle}{\langle x_i^2 \rangle}, \quad a_i^{(2)} = x_i y_i - y_i \frac{\langle x_i y_i^2 \rangle}{\langle y_i^2 \rangle}, \quad a_i^{(3)} = y_i^2 - \frac{\langle y_i^2 \rangle}{19} + x_i \frac{\langle x_i y_i^2 \rangle}{\langle x_i^2 \rangle}.$$

Приближенное значение минимума энергии изгибной деформации вычислялось методом Монте-Карло при случайном выборе значений Δz_i . Для каждого набора параметров k_1, k_2, τ было рассмотрено $2 \cdot 10^7$ вариантов.

В результате перебора величин Δz_i было отмечено значительное (на 20–36% в зависимости от k_1, k_2, τ) уменьшение энергии при взаимодействии частицы θ с остальными 18 частицами по сравнению со значением энергии Π_{34} в случае, когда все частицы лежат на поверхности (4.1). Этот результат может быть улучшен, если учесть, что найденное расположение точек, близкое к оптимальному для частицы θ , может оказаться неоптимальным для остальных частиц. Поэтому была вычислена изгибная энергия взаимодействия всех 19 частиц (рис. 1). Слагаемых типа Π_3 в (2.4) оказалось 10, а типа Π_4 — 48. В зависимости от параметров k_1, k_2, τ с использованием метода Монте-Карло было отмечено снижение энергии на 5–18%.

Континуальная модель может быть улучшена за счет выбора параметров жесткости эквивалентной пластины. В то же время проведенные расчеты показали, что при изгибной деформации частицы не располагаются на гладкой поверхности. В связи с этим перспективной может оказаться модель [14], учитывающая нелокальное взаимодействие.

Литература

1. Кривцов А. М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: Физматлит, 2007. 304 с.
2. Беринский И. Е., Иванова Е. А., Кривцов А. М., Морозов Н. Ф. Применение моментного взаимодействия к построению устойчивой модели кристаллической решетки графита // Изв. РАН. МТТ. 5. 2007.

3. *Иванова Е. А., Кривцов А. М., Морозов Н. Ф., Фурсова А. Д.* Учет моментного взаимодействия при расчете изгибной жесткости наноструктур // Доклады Академии наук. 2003. Т. 391, №6. С. 764–768.

4. *Иванова Е. А., Кривцов А. М., Морозов Н. Ф.* Получение макроскопических соотношений упругости сложных кристаллических решеток с учетом моментных взаимодействий на микроуровне // Прикл. матем. и механ. 2007. Т. 71. Вып. 4. С. 595–615.

5. *Кузькин В. А., Кривцов А. М.* Описание механических свойств графена с использованием частиц с вращательными степенями свободы. // Доклады Академии Наук. 2011. Т. 440, №4. С. 1–4.

6. *Товстик П. Е., Товстик Т. П.* Модель двухмерного графитового слоя // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 1. 2009. Вып. 3. С. 134–142.

7. *Товстик П. Е., Товстик Т. П.* Статический и динамический анализ двухмерных решеток графита // Изв. РАН. МТТ. 5. 2012. С. 35–43.

8. *Brenner D. W.* Empirical Potential for Hydrocarbons for Use in Simulating the Chemical Vapor Deposition of Diamond Films // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 42. P. 9458–9471.

9. *Brenner D. W., Shenderova O. A., Harrison J. A. et al.* // J. Phys. Condens. Matter. 2002. N 14. P. 783–802.

10. *Mayo S. L., Olafson B. D., Goddard III W. A.* DREIDING: A generic force field for molecular simulations // J. Phys. Chem. 1990. Vol. 94. P. 8897–8909.

11. *Wackerfuss J.* Molecular mechanics in the context of the finite element method // Int. J. Number. Meth. Enngng. 2009. Vol. 77, N 7. P. 969–997.

12. *Sakhaei-Pour A., Ahmadian M. T., Naghdabadi R.* Vibrational analysis of single-layered graphene sheets // Nanotechnology. Vol. 19. 2008. 085702.

13. *Алехин В. В., Аничин Б. Д., Бабичев А. В., Коробейников Н. С.* Собственные колебания и выпучивание графеновых листов // Изв. РАН. МТТ. 5. 2013.

14. *Usuki T., Yogo K.* Beam equations for multi-walled carbon nanotubes derived from Flugge shell theory // Proc. R. Soc. A 465. 1199–1226. 2009.

15. *Lennard-Jones J. E.* // Proc. Royal Society. 1024. Vol. 106. N 441.

16. *Вольмир А. С.* Устойчивость упругих систем. М.: Физматгиз, 1963. 880 с.

Статья поступила в редакцию 24 октября 2013 г.

Сведения об авторах

Морозов Никита Федорович — академик РАН, профессор; moroziv@mnf.usr.pu.ru

Товстик Петр Евгеньевич — доктор физико-математических наук, профессор; peter.tovstik@mail.ru

Товстик Татьяна Петровна — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник; tovstik_t@mail.ru

CONTINUAL MODEL OF DEFORMATION OF GRAPHENE

Nikita F. Morozov^{1,2}, Petr E. Tovstik¹, Tatiana P. Tovstik²

¹ St.Petersburg State University, Universitetskaya nab., 7/9, St. Petersburg, 199034, Russian Federation; moroziv@mnf.usr.pu.ru, peter.tovstik@mail.ru

² Institute of Problems of Mechanical Engineering RAS, Bolshoy pr. V. O., 61, St. Petersburg, 199178, Russian Federation; moroziv@mnf.usr.pu.ru, tovstik_t@mail.ru

A single-layered graphene sheet is investigated. It is accepted that the total potential energy of the system under consideration consists of four parts. The first of them is the bond stretching energy describing interaction between two neighbouring atoms (the Morse potential). The second is the in-plane angle bending energy depending on the position of three neighbouring atoms (the Brenner's potential). The third is the energy of the atom deflection out of the plane of three neighbouring atoms. And the fourth is the torsion energy of four neighbouring atoms. The Van-der-Waals forces are neglected. Only the small deflections are studied. By using the long-waves approximation the continuous stretching and bending 2D energy density is delivered. As a result, the equivalent plate with the elastic stretching and bending modules is obtained. The natural frequencies of a rectangular plate are found. The stability under the in-plane compression is investigated. For this aim the nonlinear terms depending on the transversal deflection are included in the tangential stresses. The numerical results are compared with the results of the other authors obtained by the molecular dynamics method. Refs 16. Figs 1.

Keywords: graphen, stiffness, vibrations, stability.