



СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Rice, T.M.** Electron-hole liquid in semiconductors: Theoretical Aspects [Text] / T.M. Rice, J.C. Hensel, T.G. Fillips [et. al.] // Solid State Physics.— 1977. — Vol. 32.— P. 1–86; **Hensel J.C.** Electron-hole liquid in semiconductors: Experimental Aspects [Text] / J.C. Hensel, T.G. Fillips, G.A. Thomas // Ibid.— P. 87–314.
2. The electron-hole drops in semiconductors [Text] // Modern Problems in Condensed Matter Sciences / Eds. C.D. Jeffries, L.V. Keldysh. — Amsterdam: North-Holland, 1983. — Vol. 6. — 656 p.
3. **Keldysh, L.V.** Electron-hole liquid in semiconductors [Text] / L.V. Keldysh, N.N. Sibeldin // Ibid / Eds. W. Eisenmenger, A.A. Kaplyanskii. — Amsterdam: North-Holland, 1986. — Vol. 16. — P. 455–686.
4. **Тиходеев, С.Г.** Электронно-дырочная жидкость в полупроводниках [Текст] / С.Г. Тиходеев // Успехи физических наук. — 1985. — Т. 145. — Вып. 1. — С. 3–50.
5. **Sibeldin, N.N.** Electron-hole liquid in semiconductors [Text] / N.N. Sibeldin // Problems of Condensed Matter Physics: Quantum coherence phenomena in electron-hole and coupled matter-light systems: International Series of Monographs on Physics / Eds. A.L. Ivanov, S.G. Tikhodeev. — Oxford: Oxford University Press, 2008. — Vol. 139. — P. 227–257.
6. **Pauc, N.** Two-dimensional electron-hole liquid in single Si quantum wells with large electronic and dielectric confinement [Text] / N. Pauc, V. Calvo, J. Eymery [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 2004. — Vol. 92. — P. 236802-1–236802-4.
7. **Pauc, N.** Electronic and optical properties of Si/SiO₂ nanostructures. II. Electron-hole recombination at the Si/SiO₂ quantum-well–quantum-dot transition [Text] / N. Pauc, V. Calvo, J. Eymery [et al.] // Phys. Rev. B. — 2005. — Vol. 72. — P. 205325-1–205324-8.
8. **Бурбаев, Т.М.** Электронно-дырочная жидкость в напряженных SiGe-слоях кремниевых гетероструктур [Текст] / Т.М. Бурбаев, Е.А. Бобрик, В.А. Курбагов [и др.] // Письма в ЖЭТФ. — 2007. — Т. 85. — № 7. — С. 410–413.
9. **Burbaev, T.M.** Exciton condensation in the compressively strained SiGe layers of Si/SiGe/Si heterostructure [Text] / T.M. Burbaev, V.S. Bagaev, E.A. Bobrik [et al.] // Thin Solid Films.— 2008.— Vol. 517. — P. 55–56.
10. **Rieger, M.M.** Electronic-band parameters in strained Si_{1-x}Ge_x alloys on Si_{1-y}Ge_y substrates [Text] / M.M. Rieger, P. Vogl // Phys. Rev. B. — 1993. — Vol. 48.— No. 19. — P. 14276–14286.
11. **Baier, T.** Type-II band alignment in Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells from photoluminescence line shifts due to optically induced band-bending effects: experiment and theory [Text] / T. Baier, U. Mantz, K. Thonke [et al.] // Phys. Rev. B. — 1994. — Vol. 50. — No. 20. — P. 15191–15196.
12. **Penn, C.** Application of numerical exciton-wave-function calculations to the question of band alignment in Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells [Text] / C. Penn, F. Schäffler, G. Bauer [et al.] // Phys. Rev. B. — 1999. — Vol. 59. — P. 13314–13321.
13. **Betzler, K.** Two-electron transitions in the condensed phase of nonequilibrium carriers in Si [Text] / K. Betzler, R. Conradt // Phys. Rev. Lett. — 1972. — Vol. 28. — P. 1562–1563.
14. **Van de Walle, C.G.** Theoretical calculations of hetero-junction discontinuities in the Si/Ge system [Text] / C.G. Van de Walle, R.M. Martin // Phys. Rev. B. — 1986. — Vol. 34. — P. 5621–5634.
15. **Кулаковский, В.Д.** Экситонные молекулы в полупроводниках [Текст] / В.Д. Кулаковский, В.Б. Тимофеев, В.М. Эдельштейн // ЖЭТФ. — 1978. — Т. 74. — № 1. — С. 372–383.

УДК 539.2, 539.3

И.Е. Беринский

СТЕРЖНЕВАЯ МОДЕЛЬ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ГРАФЕНА

Компьютерное моделирование все шире используется для описания свойств материалов на микроуровне. В частности, в связи с развитием нанотехнологий большой интерес представляют углеродные материалы, обладающие исклю-

чительными характеристиками, в том числе и механическими. К таким объектам относятся и ранее неизвестные аллотропные модификации углерода, такие как углеродные однослойные и многослойные нанотрубки, фуллерены, угле-

родные нановолокна, наноалмазы, графен и многие другие. Механические свойства графена представляют интерес по нескольким причинам. Во-первых, весьма перспективным представляется создание композитных материалов на его основе. Содержащие графен композиты диспергируются в матрице, которая приобретает затем повышенные прочность, жесткость, электро- или теплопроводность [1]. Широкие возможности графена раскрываются при производстве электродов. Наконец, углеродные нанотрубки, которые находят все большее применение в технике и медицине, представляют собой не что иное, как графеновые слои, свернутые тем или иным способом. Таким образом, существует целый ряд возможностей для применения механических свойств графена. Поэтому изучение этих свойств является важной и актуальной задачей.

Методы механики деформируемого твердого тела получили широкое распространение для моделирования наноструктур. Часто нанотрубкам и графеновым слоям ставится в соответствие тонкая оболочка, но при построении модели не учитывается микроструктура этой оболочки [2]. Однако при этом приходится вводить формальный подгонный параметр, не имеющий физического смысла — толщину стенки оболочки. Использование понятий «объем» и «толщина» нанотрубки [3, 4] вносит произвол в определение размера нанобъекта и приводит к неоднозначности определения его упругих характеристик при переходе к континуальной теории упругости [5, 6]. Для нанотрубок это явление получило название «парадокс Якобсона» вскоре после выхода статьи [2]. Немалую роль при создании континуальных моделей играет анизотропия nanoобразований [7]. Таким образом, и при построении моделей сплошной среды нужно тем или иным способом учитывать микроструктуру материала.

Учет указанной микроструктуры может быть произведен с использованием и других методов. В частности, широкое распространение получило молекулярно-динамическое моделирование. Для углеродных материалов было предложено множество потенциалов межатомного взаимодействия [8–10]. Однако параметры многочастичных межатомных потенциалов, которые используются для подобного моделирования, не имеют ясного физического смысла. Кроме того,

остаётся открытым вопрос, насколько хорошо они описывают механические свойства наноматериалов. Наконец, использование подобных методов требует огромных вычислительных затрат. В то же время методы механики деформируемого твердого тела основаны на моделях, интуитивно более понятных исследователю (например стержни, оболочки и пр.), а кроме того существуют хорошо разработанные комплексы прикладных программ на основе метода конечных элементов, которые могли бы быть полезными для расчета наноструктур. Таким образом, необходимы теории, способные объединить дискретный и континуальный подходы, перекинуть мостик от микро- к макроструктуре, от микропараметров (физических и геометрических параметров кристаллических решеток и параметров межатомных связей) к макропараметрам (упругим модулям, собственным частотам и т. п.). Для этого нужны модели, называемые дискретными (дискретно-континуальными, структурными), которые основываются на адекватном описании микроструктуры материала. В этих моделях взаимодействие на микроуровне может описываться в рамках классической механики (без учета квантовомеханических эффектов), что оказывается достаточным для изучения упругого деформирования большинства кристаллических твердых тел. Для моделирования взаимодействия между атомами кристаллических решеток вводятся те или иные взаимодействия, а затем в зависимости от типа модели делается переход к макроскопическому описанию исследуемого материала.

Одегард [11] предложил структурный подход (называемый также в литературе «стержневым» или «дискретно-континуальным») для описания взаимодействия между атомами углерода. При этом введена парная силовая модель с различными законами взаимодействия для первой и второй координационной сфер. Используется простейший (линейный) закон взаимодействия, то есть фактически межатомные связи заменяются линейными пружинами различной жесткости. У Одегарда и в последующей литературе [12–14] эти пружины называются стержнями, хотя изгибная жесткость, характерная для стержней, в этих моделях не учитывается. Вообще говоря, подобные модели рассматривались и ранее, однако именно работа Одегарда привлекла внима-



ние широкой научной общественности к этому подходу. В России этот подход получил развитие в работах Р.В. Гольдштейна, А.В. Ченцова и Н.М. Осипенко [7, 13]. Несомненное достоинство стержневой модели состоит в том, что для углеродных связей был предложен простой и наглядный механический аналог. Поэтому, несмотря на ее определенные недостатки (в частности, с ее помощью не удастся получить правильное значение коэффициента Пуассона для графена [15]), она находит все большее применение [12].

Другая структурная модель для наноструктур, в которой межатомные связи представляются стержнями, обладающими жесткостью на растяжение и изгиб, была предложена в статье [16]. С другой стороны, такая связь может быть описана потенциалом межатомного взаимодействия, который является квадратичной формой межатомных расстояний и углов между связями. Сравнивая энергию растяжения и изгиба стержня с энергией растяжения связи и энергией изменения угла между связями соответственно [10, 17], они вычисляют по эмпирическим коэффициентам, задающим потенциал, необходимые параметры стержней. Далее строится конечно-элементная модель, с помощью которой определяются упругие характеристики нанотрубок. Подобный подход развивался позже в работах [18–20].

В данной работе представлен подход, сходный с использованным в работе [16], в частности, для моделирования межатомной связи также применяются гибкие стержни. Различие состоит в том, что в качестве альтернативного описания межатомной связи используется не эмпирический потенциал взаимодействия, а квадратичная форма векторов, описывающих положение частиц—атомов. Эта квадратичная форма является следствием учета моментного вклада в дополнение к силовому при описании взаимодействия между частицами. В статье [21] определена связь между упругими характеристиками некоторых материалов с микропараметрами моментной модели, а именно — со значениями продольной и поперечной жесткостей межатомной связи. Цель данной работы — получение соотношений, связывающих вышеупомянутые жесткости с параметрами стержневой модели, и вычисление их на основе экспериментальных данных для графита.

Описание межатомных взаимодействий на основе моментной теории

Телом-точкой называют материальный объект, занимающий нулевой объем в пространстве, положение которого считается определенным, если задан его вектор положения и тензор поворота [22]. Взаимодействие между телами-точками характеризуется вектором силы и вектором момента. Рассмотрим систему из двух тел-точек, моделирующих атомы кристаллической решетки. Далее для описания такой системы будем использовать формулы, полученные в [21, 23]. В актуальной конфигурации положение частиц задается радиус-векторами \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 , а ориентация — векторами поворотов $\boldsymbol{\varphi}_1$ и $\boldsymbol{\varphi}_2$. В равновесном положении $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = 0$, $\boldsymbol{\varphi}_1 = 0$ и $\boldsymbol{\varphi}_2 = 0$. Вводятся обозначения: \mathbf{F}_1 , \mathbf{M}_1 — сила и момент, действующие на тело-точку 1 со стороны тела-точки 2, \mathbf{F}_2 , \mathbf{M}_2 — сила и момент, действующие на тело-точку 2 со стороны тела-точки 1. Для них справедливы соотношения:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_1 = -\mathbf{F}_2;$$

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_1 + \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\mathbf{F}_1 = -\mathbf{M}_2 - \frac{1}{2}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)\mathbf{F}_2. \quad (1)$$

Рассматривая случай линейного упругого деформирования, для внутренней энергии можно принять следующую аппроксимацию:

$$U = \mathbf{F}^0 \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{M}^0 \boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{A} \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{B} \boldsymbol{\kappa} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\kappa} \mathbf{C} \boldsymbol{\kappa}. \quad (2)$$

Коэффициенты \mathbf{A} , \mathbf{B} и \mathbf{C} называются тензорами жесткости, а векторы \mathbf{F}^0 и \mathbf{M}^0 — это начальные усилия. В линейной теории тензоры жесткости — постоянные величины, причем тензоры \mathbf{A} и \mathbf{C} — симметричные, а \mathbf{B} — произвольный. На векторах $\boldsymbol{\varepsilon}$ и $\boldsymbol{\kappa}$, называемых векторами деформации, совершают работу векторы силы и момента:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^0 + \mathbf{A} \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{B} \boldsymbol{\kappa}, \quad \mathbf{M} = \mathbf{M}^0 + \boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{B} + \mathbf{C} \boldsymbol{\kappa}. \quad (3)$$

При получении этих соотношений использовался момент взаимодействия \mathbf{M} , вычисленный относительно середины отрезка, соединяющего тело-точки. При этом тензоры жесткости \mathbf{B} и \mathbf{C} также были вычислены относительно этой точки. Векторы деформации в этом случае имеют вид

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_0 + \frac{1}{2} \mathbf{r}_0 (\boldsymbol{\varphi}_1 + \boldsymbol{\varphi}_2); \quad \boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{\varphi}_1 - \boldsymbol{\varphi}_2; \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1. \quad (4)$$

Уравнения в виде (3), (4) удобны для определения структуры тензоров жесткости. В частности, в случае, если рассматривается плоская система частиц, имеющая две ортогональные плоскости симметрии, можно показать, что тензоры жесткости имеют вид

$$\mathbf{A} = C_A \mathbf{i}\mathbf{i} + C_D \mathbf{j}\mathbf{j}, \quad \mathbf{B} = 0, \quad \mathbf{C} = C_z \mathbf{k}\mathbf{k}, \quad (5)$$

где $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ — векторы ортонормированного базиса, при этом \mathbf{i} и \mathbf{j} лежат в плоскости частиц, \mathbf{k} — ортогонален этой плоскости.

Однако часто при решении конкретных задач удобнее использовать моменты взаимодействия, вычисленные относительно тел-точек. При этом новые векторы деформации приобретают вид

$$\boldsymbol{\varepsilon}_1 = \mathbf{r} - \mathbf{r}_0 + \mathbf{r}_0 \times \boldsymbol{\varphi}_2; \quad \boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{\varphi}_1 - \boldsymbol{\varphi}_2; \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1. \quad (6)$$

Векторы силы и момента в этом случае могут быть представлены в виде

$$\mathbf{F} = \tilde{\mathbf{F}}^0 + \tilde{\mathbf{A}}\boldsymbol{\varepsilon}_1 + \tilde{\mathbf{B}}\boldsymbol{\kappa}_1; \quad \mathbf{M} = \tilde{\mathbf{M}}^0 + \boldsymbol{\varepsilon}_1 \tilde{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{C}}\boldsymbol{\kappa}_1. \quad (7)$$

Начальные усилия \mathbf{F}^0 и \mathbf{M}^0 отличаются от начальных усилий $\tilde{\mathbf{F}}^0$ и $\tilde{\mathbf{M}}^0$, а тензоры жесткости $\tilde{\mathbf{A}}, \tilde{\mathbf{B}}, \tilde{\mathbf{C}}$ отличаются от тензоров $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$. При этом верны соотношения

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A}; \quad \tilde{\mathbf{B}} = \mathbf{B} - \frac{1}{2} \mathbf{A} \times \mathbf{r}_0;$$

$$\tilde{\mathbf{C}} = \mathbf{C} + \frac{1}{2} (\mathbf{r}_0 \times \mathbf{B} - \mathbf{B}^T \times \mathbf{r}_0) - \frac{1}{4} \mathbf{r}_0 \times \mathbf{A} \times \mathbf{r}_0. \quad (8)$$

Соотношения (6)–(8) будут использоваться нами далее при рассмотрении систем частиц, находящихся под действием внешних усилий. В дальнейшем будем рассматривать ненапряженные системы, то есть начальные усилия будем считать равными нулю.

Основные уравнения линейной теории прямолинейных стержней

В данном разделе представлена сводка основных уравнений линейной теории прямолинейных стержней, составленная в соответствии с приведенной в работе [24]. Принимаем, что смещения точек стержня описываются следующими уравнениями:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}\mathbf{t} + \mathbf{w}; \quad \mathbf{t}\mathbf{w} = 0; \quad \boldsymbol{\psi} = \boldsymbol{\phi}\mathbf{t} + \mathbf{t} \times \boldsymbol{\theta}; \quad \boldsymbol{\theta}\mathbf{t} = 0 \quad (9)$$

где \mathbf{u} — это продольные смещения точек стержня, \mathbf{w} — вектор поперечных смещений, $\boldsymbol{\phi}$ — кручение, \mathbf{t} — единичный вектор касательной.

Векторы деформации задаются соотношениями

$$\mathbf{e} = \boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{t} + \boldsymbol{\gamma}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = u', \quad \boldsymbol{\gamma} = \mathbf{w}' - \boldsymbol{\theta}, \quad \boldsymbol{\Phi} \approx \boldsymbol{\phi}'\mathbf{t} + \mathbf{t} \times \boldsymbol{\theta}'; \quad (10)$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}$ — относительное удлинение стержня, $\boldsymbol{\gamma}$ — вектор деформации поперечного сдвига, $\boldsymbol{\phi}'$ — относительное закручивание стержня, $\boldsymbol{\theta}$ — вектор изгибных деформаций.

В линейной теории стержней без учета естественной крутки соотношения упругости для действующих в стержне усилий и моментов принимают следующий вид:

$$\mathbf{N} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{e}; \quad \mathbf{M} = \boldsymbol{\Phi} \cdot \boldsymbol{\Phi}; \quad \mathbf{N} = T\mathbf{t} + \mathbf{Q};$$

$$\mathbf{M} = H\mathbf{t} + \mathbf{t} \times \mathbf{L}; \quad \mathbf{t} \cdot \mathbf{Q} = 0; \quad \mathbf{t} \cdot \mathbf{L} = 0, \quad (11)$$

где T — продольное усилие в стержне, H — крутящий момент, \mathbf{Q} — вектор поперечных усилий, \mathbf{L} — вектор изгибающих моментов.

Тензоры напряжений \mathbf{A} и $\boldsymbol{\Phi}$ строятся следующим образом:

$$\mathbf{A} = EF \mathbf{t}\mathbf{t} + kGF(\mathbf{E} - \mathbf{t}\mathbf{t});$$

$$\boldsymbol{\Phi} = GJ_p \mathbf{t}\mathbf{t} + E\mathbf{c}; \quad (12)$$

$$\mathbf{c} = J_1 \mathbf{d}_1 \mathbf{d}_1 + J_2 \mathbf{d}_2 \mathbf{d}_2; \quad k = \frac{\pi^2}{12},$$

где E — модуль Юнга; F — площадь поперечного сечения стержня; G — модуль сдвига; k — коэффициент поперечного сдвига; $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2$ — векторы нормали и бинормали; J_1, J_2 — соответствующие моменты инерции поперечного сечения стержня; J_p — геометрическая жесткость на кручение, причем для эллиптического в сечении стержня она равна полярному моменту инерции J_p .

С помощью используемых обозначений без учета внешних распределенных сил и моментов уравнения равновесия стержня примут следующий вид:

$$\mathbf{N}'(s) = 0; \quad \mathbf{M}'(s) + \mathbf{t} \times \mathbf{N}(s) = 0, \quad (13)$$

где s — естественная координата стержня.

Приведенные в данном разделе уравнения позволяют решить задачи о растяжении, сдвиге, изгибе и кручении линейно-упругих стержней, находящихся под воздействием внешних нагрузок.

Связь между дискретным и континуальным подходами

Несомненным плюсом стержневых моделей является хорошее развитие математического аппарата механической теории стержней, при этом сами модели интуитивно понятны. Кроме того,

стержневые модели вошли во все стандартные конечно-элементные компьютерные пакеты, что позволяет строить сложные конструкции на их основе. Таким образом, важна возможность их использования для моделирования наносистем и наноматериалов.

Представим, что взаимодействие между двумя атомами углерода осуществляется посредством упругого стержня, работающего на сжатие-растяжение, изгиб и кручение. Подобным стержнем моделируется взаимодействие электронных облаков, которые формируют направленную ковалентную химическую связь. Ясно, что упругие характеристики этого стержня должны быть подобраны так, чтобы полученная в результате модель удовлетворяла экспериментальным значениям упругих характеристик исследуемого кристалла. Ранее было показано [23], что эта же связь может быть описана с помощью моментного подхода, причем характеристики моментного взаимодействия были определены для некоторых материалов. Цели данной работы — установление связи моментного и стержневого подходов, а также определение необходимых характеристик стержней по известным значениям моментных характеристик.

Рассмотрим систему из двух частиц, одна из которых жестко закреплена, а вторая сместилась относительно первой на трансляционный вектор \mathbf{u}_* и вектор поворота φ_* . Согласно моментному подходу между частицами начали действовать сила и момент взаимодействия (3), которые характеризуются компонентами C_A , C_D и C_Z . С другой стороны, можно представить, что рассматриваемые частицы соединены упругим стержнем, левый конец которого закреплен, а правый смещен из положения равновесия на вектор \mathbf{u}_* и повернут на угол φ_* . В результате в стержне возникают усилия, зависящие от \mathbf{u}_* и φ_* . Уравнения статики (13) для них дают

$$\mathbf{N} = \mathbf{N}_0 = \text{const}; \quad \mathbf{M} = \mathbf{N}_0 - \mathbf{t} \times \mathbf{N}_0 s. \quad (14)$$

На основании этих формул введем обозначения для вычисленных силы и момента на конце стержня:

$$\mathbf{N}_* = \mathbf{N}_0; \quad \mathbf{M}_* = \mathbf{N}_0 - \mathbf{t} \times \mathbf{N}_0 l. \quad (15)$$

С другой стороны, согласно (11), (12), —

$$\mathbf{N} = \mathbf{A}(\mathbf{u}' + \mathbf{t} \times \varphi'); \quad \mathbf{M} = \mathbf{e} \cdot \varphi'. \quad (16)$$

Решая совместно системы (14) и (16), получаем выражения для векторов смещения и поворота:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{N}_0 s - \\ &- \mathbf{t} \times \left(\mathbf{e}^{-1} \left(\frac{1}{2} \mathbf{M}_0 s^2 - \frac{1}{6} \mathbf{t} \times \mathbf{N}_0 s^3 \right) + \varphi_0 s \right) + \mathbf{u}_0; \\ \varphi &= \mathbf{e}^{-1} \left(\mathbf{M}_0 s - \frac{1}{2} \mathbf{t} \times \mathbf{N}_0 s^2 \right) + \varphi_0. \end{aligned} \quad (17)$$

С учетом граничных условий

$$\mathbf{u}|_{s=0} = 0; \quad \mathbf{u}|_{s=l} = \mathbf{u}_*; \quad \varphi|_{s=0} = 0; \quad \varphi|_{s=l} = \varphi_* \quad (18)$$

находим

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_* &= \mathbf{A}^{-1} \mathbf{N}_0 l - \mathbf{t} \times \left(\mathbf{e}^{-1} \left(\frac{1}{2} \mathbf{M}_0 l^2 - \frac{1}{6} \mathbf{t} \times \mathbf{N}_0 l^3 \right) \right); \\ \varphi_* &= \mathbf{e}^{-1} \left(\mathbf{M}_0 l - \frac{1}{2} \mathbf{t} \times \mathbf{N}_0 l^2 \right); \quad \mathbf{u}_0 = 0, \quad \varphi_0 = 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Разрешим системы (15) и (19) относительно \mathbf{u}_* и φ_* . В результате действующую на конце стержня силу можно привести к виду

$$\begin{aligned} \mathbf{N} &= \mathbf{A} \boldsymbol{\varepsilon}_*, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_* = \mathbf{u}_* + \frac{1}{2} \mathbf{t} \times \varphi_* l; \\ \mathbf{A} &= \left(\mathbf{A}^{-1} l - \frac{1}{12} (\mathbf{t} \times \mathbf{e}^{-1} \times \mathbf{t}) l^3 \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (20)$$

Сравнивая последние соотношения с выражениями (3)–(5), видим, что нам удалось получить силу взаимодействия в той же форме, в какой она была получена при использовании дискретного подхода. Для определения компонент тензора \mathbf{A} используем следующее свойство: пусть некий тензор второго ранга представляется в виде

$$\Lambda = \lambda_1 \mathbf{t} \mathbf{t} + \lambda_2 \mathbf{d}_1 \mathbf{d}_1 + \lambda_3 \mathbf{d}_2 \mathbf{d}_2, \quad (21)$$

где $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ — некие вещественные числа.

Нетрудно убедиться, что обратный тензор в этом случае имеет вид

$$\Lambda = \frac{1}{\lambda_1} \mathbf{t} \mathbf{t} + \frac{1}{\lambda_2} \mathbf{d}_1 \mathbf{d}_1 + \frac{1}{\lambda_3} \mathbf{d}_2 \mathbf{d}_2. \quad (22)$$

Используя это обстоятельство, из выражения (20) найдем интересующие нас компоненты:

$$\begin{aligned} C_A &= \mathbf{t} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{t} = \frac{EF}{l}; \\ C_D &= \mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{d}_1 = \frac{12kJ_2 F}{kFl^3 + 24J_2(1+\nu)l}. \end{aligned} \quad (23)$$

Уравнения теории стержней, которые были использованы нами для получения этих выражений, учитывают деформацию поперечного сдвига, что соответствует модели балки Тимошенко. В результате использования этой модели коэффициент Пуассона ν вошел в выражение для поперечной жесткости C_D как независимый параметр. Однако если нет необходимости учета деформации поперечного сдвига, то можно воспользоваться более простой моделью Бернулли — Эйлера. Переход к этой модели может быть произведен, если положить в (23) $k \rightarrow \infty$. Тогда получим:

$$C_A = \frac{EF}{l}; \quad C_D = \frac{12EJ_2}{l^3}. \quad (24)$$

Вычисленный момент на конце стержня можно представить в виде, аналогичном виду (7):

$$\mathbf{M} = \varepsilon_{1*} \cdot \tilde{\mathbf{B}} + \tilde{\mathbf{C}} \cdot \kappa_{1*}, \quad (25)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{B}} &= -\frac{1}{2} \mathbf{t} \times \mathbf{A} l; \quad \tilde{\mathbf{C}} = \frac{1}{l} \mathbf{e} - \frac{1}{4} \mathbf{t} \times \mathbf{A} \times \mathbf{t} l^2; \\ \varepsilon_{1*} &= \mathbf{u} + (\mathbf{t} \times \varphi_*) l, \quad \kappa_{1*} = \varphi_*. \end{aligned} \quad (26)$$

Используя формулу (7), нетрудно убедиться, что изгибная жесткость C_z может быть найдена по формуле:

$$C_z = \frac{1}{l} \mathbf{d}_2 \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_2 = \frac{EJ_2}{l}. \quad (27)$$

Отметим, что из выражений (26) легко также получить жесткость на кручение упругого стержня вокруг своей оси, аналога которой нет в рассматриваемой нами ранее моментной постановке:

$$C_\tau = \frac{1}{l} \mathbf{t} \cdot \mathbf{e} \cdot \mathbf{t} = \frac{GJ_r}{l}. \quad (28)$$

В результате определена связь между жесткостями стержня на растяжение, поперечный сдвиг, изгиб и кручение с упругими и геометрическими характеристиками стержней. Эта связь будет использоваться далее для параметризации модели решетки графена.

Определение параметров стержневой модели решетки графена

Представим себе, что связь между двумя атомами в кристаллической решетке моделируется линейно-упругими, круглыми в сечении стержнями постоянного диаметра, с длиной, равной

длине межатомной связи. Тогда площадь, момент инерции сечения и геометрическая жесткость на кручение (полярный момент) примут вид соответственно:

$$F = \frac{\pi d^2}{4}; \quad J_2 = \frac{\pi d^2}{64}; \quad J_r = J_p = \frac{\pi d^4}{64}. \quad (29)$$

Воспользуемся моделью Эйлера для определения упругих характеристик стержня. Тогда из формулы (25) с учетом выражений (29) получим выражения для модуля Юнга и диаметра через значения продольной и поперечной жесткостей связи:

$$E = \frac{3C_A^2}{\pi l C_D}, \quad d = \frac{2\sqrt{3}}{3} \sqrt{\frac{C_D}{C_A}} l, \quad (30)$$

которые полностью определяют поведение стержня для данной модели.

Подставляя выражения (29), (30) в формулы (27), (28), можем получить выражения для изгибной и крутильной жесткостей:

$$C_z = \frac{C_D l^2}{12}; \quad C_\tau = \frac{C_D l^2}{12(1+\nu)}. \quad (31)$$

Параметры C_A и C_D могут быть однозначно определены из упругих характеристик материала. В частности, в работе [21] показано, как определить такие характеристики для графена. Из выражений (31) следует, что изгибная жесткость также может быть однозначно определена. При этом крутильная жесткость содержит независимый параметр — коэффициент Пуассона, который, вообще говоря, остается неопределенным для данного стержня. Данный коэффициент вносит произвол и при попытке воспользоваться моделью Тимошенко для определения характеристик стержней, моделирующих связи, так как он входит в выражение (23) для поперечной жесткости.

Воспользуемся известными экспериментальными данными для графена [21]:

$$C_A = 730,2 \text{ Н/м};$$

$$C_D = 401,6 \text{ Н/м}; \quad l = 0,142 \text{ нм}. \quad (32)$$

Подставляя эти данные в формулы (29), получим

$$E = 8,928 \text{ ТПа}, \quad d = 0,122 \text{ нм}. \quad (33)$$

Таким образом, нам удалось определить параметры стержня Бернулли — Эйлера, которые могут быть использованы для моделирования упругих свойств графена.



В результате работы была построена модель решетки графена, в которой межатомные связи моделируются линейно-упругими цилиндрическими стержнями. Предложен подход, позволяющий связать дискретное описание взаимодействия частиц, моделирующих атомы решетки, и континуальное описание с помощью классической теории стержней. Соотношения, полученные в результате применения этого подхода для продольной и изгибной жесткостей стержня, совпадают с полученными ранее в работах [16, 19]. Однако в этих работах параметры стержней определяются, в частности, из сравнения энергии изгиба стержня с энергией изменения угла между атомными связями. В данной работе предложено сравнивать поперечную жесткость стержня с поперечной жесткостью связи, определенной на основании моментной те-

рии. Такой подход представляется более рациональным с позиций физического смысла. В результате определены параметры стержней, соответствующие кристаллической решетке графена. Предложенная модель может использоваться в стандартных прикладных конечно-элементных пакетах программ с целью исследования упругих свойств графена и нанотрубок.

Автор благодарит профессора СПбГПУ Е.А. Иванову, инициировавшую эту работу, и заведующего кафедрой «Теоретическая механика» СПбГПУ профессора А.М. Кривцова за ценные наставления и многочисленные обсуждения.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 09-05-12071-офи_м и гранта для студентов, аспирантов вузов и академических институтов, расположенных на территории Санкт-Петербурга.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Сегал, М.** Прорыва ждите через год [Электронный ресурс]: Пер. с англ. / М. Сегал.— URL: http://www.nanometer.ru/2009/10/27/12566498911870_157791.html (дата обращения: 06.03.2010).
2. **Yakobson, B.I.** Nanomechanics of carbon tubes: Instabilities beyond linear response [Text] / B.I. Yakobson, C.J. Brabec, J. Bernholc // Phys. Rev. Lett.— 1995.— Vol. 76.— P. 2511–2514.
3. **Елецкий, А.В.** Механические свойства углеродных наноструктур и материалов на их основе [Текст] / А. В. Елецкий // УФН.— 2007.— Т. 177.— № 3. С. 233–274.
4. Carbon nanotubes : science and applications [Text] / edited by M. Meuzarpan.— Boca Raton: CRC Press LLC.— 2005.— 280 p.
5. **Кривцов, А.М.** Аномалии механических характеристик наноразмерных объектов [Текст] / А.М. Кривцов, Н.Ф. Морозов // Доклады Академии наук.— 2001.— Т. 381.— Вып. 3.— С. 345–347.
6. **Кривцов, А.М.** О механических характеристиках наноразмерных объектов [Текст] / А.М. Кривцов, Н.Ф. Морозов // Физика твердого тела.— 2002.— Т. 44.— Вып. 12.— С. 2158–2163.
7. **Гольдштейн, Р.В.** К определению прочности наноразмерных объектов [Текст] / Р.В. Гольдштейн, Н.М. Осипенко, А.В. Ченцов // Изв. РАН. МТТ.— 2008.— № 3.— С. 164–181.
8. **Tersoff, J.** Empirical interatomic potential for carbon with applications to amorphous carbon [Text] / J. Tersoff // Phys. Rev. B.— 1988.— Vol. 61.— P. 2879–2882.
9. **Brenner, D.W.** A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons [Text] / D.W. Brenner, O.A. Shen-
10. **derova, J.A. Harrison [et al.]** // J. Phys.: Condens. Matter.— 2002.— Vol. 14.— P. 783–802.
11. **Cornell, W.D.** A second generation force-field for the simulation of proteins, nucleic acids and organic molecules [Text] / W.D. Cornell, P. Cieplak, C.I. Bayly [et al.] // J. Am. Chem. Soc.— 1995.— Vol. 117.— P. 5179–5197.
12. **Odegard, G.M.** // Equivalent-continuum modeling of nano-structured materials [Text] / G.M. Odegard, T.S. Gates, L.M. Nicholson [et al.] // Compos. Sci. Technol.— 2002.— Vol. 62.— P. 1869–1880.
13. **Аннин, Б.Д.** Компьютерное моделирование выпучивания нанотрубки при кручении [Текст] / Б.Д. Аннин, С.Н. Коробейников, А.В. Бабищев // Сибирский журнал индустриальной математики.— 2008.— Т. 11.— № 1.— С. 3–22.
14. **Гольдштейн, Р.В.** Дискретно-континуальная модель нанотрубки [Текст] / Р.В. Гольдштейн, А.В. Ченцов // Изв. РАН. МТТ.— 2005.— № 4.— С. 57–74.
15. **Scarpa, F.** Effective elastic mechanical properties of single layer graphene sheets [Text] / F. Scarpa, S. Adhikari, A. Srikantha Phani // Nanotechnology.— 2009.— Vol. 20.— P. 065709.
16. **Кривцов, А.М.** Упругие свойства одноатомных и двухатомных кристаллов. [Текст]: Учеб. пос. / А.М. Кривцов.— СПб.: Изд-во Политехн. ун-та.— 2010.— 124 с.
17. **Li, C.** A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes [Text] / C. Li, T. W. Chou // Int. J. Solids Struct.— 2003.— Vol. 40.— P. 2487–2499.
18. **Gelin, B.R.** Molecular modeling of polymer structures and properties [Текст] / B.R. Gelin.— Cincinnati: Hanser/Gardner Publishers, 1994.

18. **Li, C.** Quantized molecular structural mechanics modeling for studying the specific heat of single-walled carbon nanotubes [Text] / C. Li, T.W. Chou // Phys. Rev. B.— 2005.— Vol. 71.— P. 075409.

19. **Tserpes, K.I.** Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes [Text] / K.I. Tserpes, P. Papanikos // Composites: Part B.— Vol. 36.— 2005.— P. 468–477.

20. **Wan, H.** A structural mechanics approach for predicting the mechanical properties of carbon nanotubes [Text] / H. Wan, F. Delale // Meccanica.— 2010.— Vol. 45— P. 43–51.

21. **Иванова, Е.А.** Получение макроскопических соотношений упругости сложных кристаллических решеток при учете моментных взаимодействий на

микроуровне [Текст] / Е.А. Иванова, А.М. Кривцов, Н.Ф. Морозов // Прикладная математика и механика.— 2007.— Т. 71.— Вып. 4.— С. 595–615.

22. **Жилин, П.А.** Теоретическая механика. Фундаментальные законы механики [Текст]: Учеб. пос. / П.А. Жилин.— СПб: Изд-во СПбГПУ.— 2003.— 340 с.

23. **Иванова, Е.А.** Описание кристаллической упаковки частиц с учетом моментных взаимодействий [Текст] / Е.А. Иванова, А.М. Кривцов, Н.Ф. Морозов, А.В. Фирсова // Изв. РАН. МТТ.— 2003.— № 4.— С. 110–127.

24. **Жилин, П.А.** Прикладная механика. Теория тонких упругих стержней [Текст]: Учеб. пос. / П.А. Жилин.— СПб: Изд-во СПбГПУ.— 2007.— 101 с.