ISSN: 1999-6691, e-ISSN: 2782-3709

33

# Деформационное состояние листа графена в рамках континуальной моментно-мембранной теории упругих пластин

С.О. Саркисян<sup>1</sup>, К.А. Жамакочян<sup>1</sup>, Л.С. Саркисян<sup>2</sup>

Ширакский государственный университет, Гюмри, Республика Армения  $\mathbf{2}$ 

Институт механики НАН РА, Ереван, Республика Армения

Предложен подход для отыскания напряженно-деформированного состояния (НДС) структур, содержащих графен – новый наноматериал, который в настоящее время нашёл наиболее широкое практическое применение в наноэлектромеханических системах. Графен является базовым двумерным блоком, из которого строятся другие углеродные структуры: мембраны, листы, нанотрубки и другое. Для описания НДС листа графена использована феноменологическая континуальная моментно-мембранная теория пластин, из которой, вследствие того, что графен сверхтонкий материал, исключается понятие толщины. Физические соотношения упругости листа графена выражаются через его жёсткостные характеристики, которые определяются с помощью гармонического потенциала межатомных взаимодействий в углероде. Сформулированы дифференциальная и соответствующая ей вариационная постановка задачи статического деформирования и определения собственных частот и форм колебаний листа графена. Вариационная формулировка выполнена на основе принципа Лагранжа. Задача в вариационной постановке реализована численно, методом конечных элементов. Построены конечно-элементные соотношения, учитывающие моментные эффекты поведения листа графена. Для аппроксимации использован 4-узловой прямоугольный конечный элемент. Представлены численные решения нескольких задач статического деформирования листа графена в условиях плоского напряжённого состояния и поперечного изгиба, а также выполнен анализ его собственных колебаний. Продемонстрирована хорошая сходимость результатов численного моделирования во всех рассмотренных задачах. Полученные численные решения представляют собой важный результат для проектирования и расчёта резонаторов, в которых применяются сверхтонкие наноструктуры, а установление того факта, что лист графена обладает высокой собственной наименьшей частотой, находящейся в гегагерцевой области (например, для кварцевых резонаторов характерны мегагерцевые частоты), открывают перспективу применения самого графена в качестве сверх чувствительного наномеханического резонатора для детектирования малых масс и сверхмалых перемещений.

Ключевые слова: континуальная моментно-мембранная теория упругости, плоское напряжённое состояние, поперечных изгиб, наноструктуры с графеном, статика и собственные колебания, метод конечных элементов

Получение: 28.04.2023 / Публикация онлайн: 01.04.2024

УДК: 539.3

# 1. Ввеление

Графен — это двумерный материал, представляющий собой монослой атомов углерода и обладающий уникальными свойствами [1]. Необычность графена проявляется не только в электронных, но и в механических свойствах. Графен является очень прочным, гибким материалом, который обладает выдающимися механическими характеристиками [2]: высокими модулем сдвига, модулем Юнга, продольной скоростью звука и другим.

При исследовании процессов деформирования однослойного листа графена (или других однослойных наноматериалов, например, однослойной нанотрубки) можно непосредственно рассматривать атомную или молекулярную природу строения этих наностуктур. Широкое распространение получило молекулярнодинамическое моделирование графена [3–5]. На практике, для моделирования механического поведения графена или других двумерных наноматериалов, развит метод молекулярной механики (а также метод молекулярной структурной механики) [6–10] и дискретно-континуальные модели [11–15].

При применении метода молекулярной динамики в основном предполагается, что между атомами двумерных наноматериалов имеют место силовые взаимодействия центрального характера. С этой точки зрения в работе [16] отмечается, что если в атомной модели однослойной нанотрубки (также для однослойного графена) учесть только силовое взаимодействие центрального характера между формирующими трубку атомами, тогда нанотрубка (или лист графена) не имела бы изгибной жёсткости и была бы неустойчива. Это означает, что только существование однослойной нанотрубки (или листа графена) будет свидетельствовать о необходимости учёта моментного взаимодействия между её атомами. Исходя из этого, далее, в работах [17–20], как континуальная модель деформационного поведения однослойной нанотрубки (а также однослойного листа графена), устанавливается трёхмерная моментная теория упругости с независимыми полями перемещений и вращений.

Так как графен и углеродная однослойная нанотрубка состоят из одного атомного слоя, следовательно, актуальной является проблема: для изучения механического поведения двумерных наноматериалов, необходимо

построение на основе трёхмерной моментной теории упругости адекватной двумерной модели пластин или оболочек. С этой точки зрения отметим, что в работе [21] сначала изучается линейная атомная цепочка, когда между атомами силовое взаимодействие нецентрально и также имеется моментное взаимодействие (для силового поля атомных взаимодействий выбран гармонический потенциал), а затем строится соответствующая её одномерно-стержневая континуальная модель. При рассмотрении ячейки периодичности кристаллической решётки графена взаимодействие между атомами заменяется указанными стержнями, в результате чего получается дискретно-континуальная (стержневая) модель графена и предельным переходом — его континуальная линейная модель. В этой же работе устанавливается, что построенная континуальная модель графена полностью идентична моментно-мембранной линейной теории упругих пластин [22, 23] и, при помощи сравнения этих двух моделей, определяются упругие жёсткостные характеристики указанной теории пластин через физические параметры гармонического потенциала углерода (которые в литературе известны).

Таким образом, моментно-мембранная линейная теория упругих пластин: а) плоское напряжённое состояние, б) поперечный изгиб, с определёнными указанным выше способом жёсткостными характеристиками, трактуется как континуальная теория деформаций графена, которая открывает большие возможности для изучения различных прикладных задач статики, динамики и устойчивости листа графена.

Возможно рассмотрение задач листа графена в его плоскости; для этого необходимо использовать модель плоского напряжённого состояния моментно-мембранной теории пластин. Аналогично, при его поперечном изгибе требуется применение модели поперечного изгиба указанной теории пластин. В данной работе для решения граничных задач плоского напряжённого состояния и поперечного изгиба моментно-мембранной теории упругих пластин разработаны варианты применения метода конечных элементов (МКЭ), которые дают возможность для изучения различных конкретных прикладных задач статики и собственных колебаний листа графена.

Отметим работы [24–26], которые посвящены применению МКЭ для решения различных прикладных граничных задач моментной теории упругости. Полученные численные результаты в работе [26] рассматриваются как дополнение к аналитическим решениям с позиций их использования для экспериментального подтверждения моментных эффектов при деформировании упругих материалов и в решении проблемы идентификации механических постоянных моментной теории упругости.

#### 2. Постановка задачи

В работах [22, 23] построена моментно-мембранная линейная теория упругих тонких оболочек (срединная поверхность оболочки отнесена к криволинейной ортогональной системе координат, в которой любой точке поверхности отвечают числа ( $\alpha_1, \alpha_2$ )). Эта теория основывается на следующих гипотезах:

1) кинематической: компоненты векторов перемещения (V) и свободного поворота ( $\omega$ ) не зависят от координаты z, которая отсчитывается по нормали от точки ( $\alpha_1, \alpha_2$ ) срединной поверхности до произвольной точки оболочки :

$$V_i = u_i(\alpha_1, \alpha_2), \quad V_3 = w(\alpha_1, \alpha_2) \quad (i = 1, 2); \quad \omega_k = \Omega_k(\alpha_1, \alpha_2) \quad (k = 1, 2, 3), \tag{1}$$

то есть перемещения, прогиб, повороты распределены равномерно по толщине оболочки.

2) статической: в физических соотношениях не принимаются во внимание напряжения как существенно меньшие:  $\sigma_{33}$  — относительно напряжений  $\sigma_{ii}$ , где i = 1, 2;  $\sigma_{3i}$  — относительно  $\sigma_{i3}$ ; моментное напряжение  $\mu_{33}$  — относительно  $\mu_{ii}$ ;  $\mu_{3i}$  — относительно  $\mu_{i3}$ .

предполагается, что оболочка тонкая.

Следует отметить, что решения трёхмерной граничной задачи моментной теории упругости в тонких областях, построенные в [27, 28] имеют свойства, отвечающие указанным гипотезам.

При переходе к рассмотрению пластинки из уравнений и граничных условий моментно-мембранной линейной теории упругих тонких оболочек [22, 23], получаются две отдельные постановки, представляемые: 1) системой уравнений и граничными условиями для плоского напряжённого состояния упругих пластин, 2) системой уравнений и граничными условиями при поперечной изгибной деформации упругих пластин. Ниже приводятся обе системы уравнений и граничные условия в декартовых координатах x, y.

# 2.1. Основные уравнения и граничные условия моментно-мембранной теории для случая плоского напряжённого состояния упругих тонких пластинок

Основные уравнения и граничные условия, описывающие плоское напряжённое состояние упругих тонких пластин в рамках моментно-мембранной теории имеют вид [22, 23]:

– уравнения равновесия (движения, где *t* — время)

$$\frac{\partial T_{11}}{\partial x} + \frac{\partial S_{21}}{\partial y} = 0 \left( \rho_0 \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} \right), \quad \frac{\partial S_{12}}{\partial x} + \frac{\partial T_{22}}{\partial y} = 0 \left( \rho_0 \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} \right), \quad \frac{\partial L_{13}}{\partial x} + \frac{\partial L_{23}}{\partial y} + (S_{12} - S_{21}) = 0 \left( J_0 \frac{\partial^2 \Omega_3}{\partial t^2} \right); \quad (2)$$

- геометрические соотношения

$$\Gamma_{11} = \frac{\partial u_1}{\partial x}, \quad \Gamma_{22} = \frac{\partial u_2}{\partial y}, \quad \Gamma_{12} = \frac{\partial u_2}{\partial x} - \Omega_3, \quad \Gamma_{21} = \frac{\partial u_1}{\partial y} + \Omega_3, \quad k_{13} = \frac{\partial \Omega_3}{\partial x}, \quad k_{23} = \frac{\partial \Omega_3}{\partial y}; \tag{3}$$

– физические соотношения упругости

$$T_{11} = \tilde{E}_*(\Gamma_{11} + \nu \Gamma_{22}), \quad T_{22} = \tilde{E}_*(\Gamma_{22} + \nu \Gamma_{11}), \quad S_{12} = C_*[\Gamma_{12} + \eta_1 \Gamma_{21}], \quad S_{21} = C_*[\Gamma_{21} + \eta_1 \Gamma_{12}], \quad L_{13} = B_*k_{13}, \quad L_{23} = B_*k_{23}, \quad \eta_1 = \frac{\mu - \alpha}{\mu + \alpha};$$

$$(4)$$

- граничные условия

$$x = \text{const:} \ T_{11} = \bar{T}_{11}, \ S_{12} = \bar{S}_{12}, \ L_{13} = \bar{L}_{13}; \ y = \text{const:} \ S_{21} = \bar{S}_{21}, \ T_{22} = \bar{T}_{22}, \ L_{23} = \bar{L}_{23}$$
(5)

или

$$x = \text{const:} \ u_1 = \bar{u}_1, \ u_2 = \bar{u}_2, \ \Omega_3 = \bar{\Omega}_3; \ y = \text{const:} \ u_1 = \bar{u}_1, \ u_2 = \bar{u}_2, \ \Omega_3 = \bar{\Omega}_3, \tag{6}$$

где чертой сверху отмечены заданные значения величин на контуре пластинки. Также могут иметь место смешанные граничные условия. В формулах (1)–(6) приняты обозначения:  $u_1, u_2$  — перемещения в плоскости (x,y);  $\Omega_3$  — свободный поворот пластинки в плоскости (x,y);  $\Gamma_{11}, \Gamma_{22}, \Gamma_{12}, \Gamma_{21}$  — тангенциальные деформации;  $k_{13}, k_{23}$  — изменения кривизны вокруг осей x, y соответственно;  $T_{11}, T_{22}, S_{12}, S_{21}$  — тангенциальные усилия  $(T_{ii} = \int_{-h}^{h} \sigma_{ii} dz, S_{ij} = \int_{-h}^{h} \sigma_{ij} dz, i, j = 1, 2, i \neq j$ );  $L_{13}, L_{23}$  — моменты относительно оси z от моментных напряжений  $\mu_{13}, \mu_{23}$  ( $L_{i3} = \int_{-h}^{h} \mu_{i3} dz, i = 1, 2$ ), распределённые вдоль осей x, y соответственно;  $\rho_0$  — поверхностная плотность материала пластинки;  $J_0$  — поверхностная плотность, мера инерции при вращении. В физических соотношениях (4) величины  $\tilde{E}_*, C_*, B_*$  представляют собой жёсткостные характеристики плоской пластинки, которые связаны со свойствами её материала (E — модулем упругости,  $\nu$  — коэффициентом Пуассона,  $\mu, \alpha, B$  — упругими постоянными пластинки) и с толщиной пластинки 2h формулами:  $E_* = 2Eh, \tilde{E}_* = E_*/(1-\nu^2), C_* = 2h(\mu+\alpha), B_* = 2Bh$ ). В работе [21] для графена определены значения его жёсткостных характеристик (сотметим, что является определённым преимуществом перед другими стандартными модель графена (2)–(4) не требуется вводить числовое значение толщины пластинки, что является определённым преимуществом перед другими стандартными (классическими) моделями упругих пластинки соторым в данной работе подразумевается выражение полной потенциальной энергии стандартными (классическими) моделями упругих пластинки, что является определённым преимуществом перед другими стандартными (классическими) моделями упругих пластинки, что исловое значение толщиными пластинки, что является определённым преимуществом перед другими стандартными (классическими) моделями упругих пластин, Для численного расчёта пластинки графена с помощьм МКЭ предполагается запись энергетическ

$$\Pi = U - V,\tag{7}$$

где [23]:

$$U = \iint\limits_{(S)} W dx dy, \tag{8}$$

$$V = \int_{0}^{a} \left( \bar{S}_{21} \cdot u_1 + \bar{T}_{22} \cdot u_2 + \bar{L}_{23} \cdot \Omega_3 \right) \Big|_{y=0}^{y=b} dx + \int_{0}^{b} \left( \bar{T}_{11} \cdot u_1 + \bar{S}_{12} \cdot u_2 + \bar{L}_{13} \cdot \Omega_3 \right) \Big|_{x=0}^{x=a} dy.$$
(9)

Здесь W — поверхностная плотность потенциальной энергии деформации пластинки:

$$W = \frac{1}{2} \Big[ \tilde{E}_* \big( \Gamma_{11}^2 + \Gamma_{22}^2 + 2\nu \Gamma_{11} \Gamma_{22} \big) + C_* \big( \Gamma_{12}^2 + \Gamma_{21}^2 + 2\eta_1 \Gamma_{12} \Gamma_{21} \big) + B_* \big( k_{13}^2 + k_{23}^2 \big) \Big].$$
(10)

Итак, имеем функционал для анализа плоского напряжённого состояния пластинки из однослойного графена в рамках моментно-мембранной теории упругих пластин. С математической точки зрения решение системы уравнений (2)–(4) с граничными условиями (5), (6) эквивалентно отысканию минимума функционала (7) с учётом соотношений (8)–(10) [23].

Следует отметить, что модель плоского напряжённого состояния моментно-мембранной теории упругих пластин идентична модели плоской задачи моментной теории упругости [29, 30]. Здесь эта модель относится к графену (с известными жёсткстными характеристиками). При  $\alpha = 0, B = 0$  модель (2)–(6) переходит к плоскому напряжённому состоянию пластин как в классической теории упругости.

# 2.2. Основные уравнения и граничные условия моментно-мембранной теории для случая поперечного изгиба упругих тонких пластинок

Описание поперечного изгиба упругих тонких пластин в рамках моментно-мембранной теории включает [22, 23]:

- уравнения равновесия (движения)

$$\frac{\partial N_{13}}{\partial x} + \frac{\partial N_{23}}{\partial y} = -q_3 \left( \rho_0 \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \right), \quad \frac{\partial L_{11}}{\partial x} + \frac{\partial L_{21}}{\partial y} + N_{23} = -m_1 \left( J_0 \frac{\partial^2 \Omega_1}{\partial t^2} \right), \\
\frac{\partial L_{12}}{\partial x} + \frac{\partial L_{22}}{\partial y} - N_{13} = -m_2 \left( J_0 \frac{\partial^2 \Omega_2}{\partial t^2} \right),$$
(11)

где  $q_3$ ,  $m_1$ ,  $m_2$  — распределённые в плоскости пластины нормальная нагрузка и моменты-пары; – геометрические соотношения

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

– физические соотношения упругости

$$N_{13} = D_* \Gamma_{13}, \quad N_{23} = D_* \Gamma_{23}, \quad L_{12} = D'[k_{12} + \eta_2 k_{21}], \quad L_{21} = D'[k_{21} + \eta_2 k_{12}], \\ L_{11} = D'[(1 + 2\eta_2)k_{11} + \eta_2 k_{22}], \quad L_{22} = D'[(1 + 2\eta_2)k_{22} + \eta_2 k_{11}], \quad \eta_2 = (\gamma_* - \varepsilon_*)/(\gamma_* + \varepsilon_*);$$

$$(13)$$

– граничные условия

$$x = \text{const:} N_{13} = \bar{N}_{13}, \ L_{11} = \bar{L}_{11}, \ L_{12} = \bar{L}_{12}$$
 или  $w = \bar{w}, \ \Omega_1 = \bar{\Omega}_1, \ \Omega_2 = \bar{\Omega}_2;$  (14)

$$y = \text{const:} N_{23} = \bar{N}_{23}, \ L_{21} = \bar{L}_{21}, \ L_{22} = \bar{L}_{22}$$
 или  $w = \bar{w}, \ \Omega_1 = \bar{\Omega}_1, \ \Omega_2 = \bar{\Omega}_2.$  (15)

Здесь чертой сверху отмечены, величины заданные на контуре пластинки. Также могут иметь место граничные условия смешанного типа. В формулах (11)–(15) обозначено: w — прогиб срединной поверхности пластинки;  $\Omega_1$ ,  $\Omega_2$  — свободные повороты точек пластинки относительно осей x и y;  $\Gamma_{13}$ ,  $\Gamma_{23}$  — поперечные сдвиговые деформации в плоскостях (x,z) и (y,z);  $k_{11}$ ,  $k_{22}$ ,  $k_{12}$ ,  $k_{21}$  — компоненты тензора изгиба–кручений;  $N_{13}$ ,  $N_{23}$  — перерезывающие усилия  $(N_{i3} = \int_{-h}^{h} \sigma_{i3} dz, i=1,2)$ ;  $L_{11}$ ,  $L_{22}$ ,  $L_{12}$ ,  $L_{21}$  — изгибающие и крутящие моменты  $(L_{ij} = \int_{-h}^{h} \mu_{ij} dz, i, j=1,2)$ ;  $D_*$ , D' ( $D_* = 2Gh$ ,  $D' = \gamma_* + \varepsilon_* = (\gamma + \varepsilon) \cdot 2h$ ) — жёсткостные характеристики материала пластинки при поперечном изгибе (при этом G — модуль сдвига,  $\gamma$  и  $\varepsilon$  — упругие постоянные моментной теории упругости, 2h — толщина пластинки). Указанные жесткостные характеристики для графена определены в работе [21].

Сформулированная граничная задача (11)–(15), согласно моментно-мембранной теории поперечного изгиба упругих пластин [23], эквивалентна вариационной задаче, имеющей в основе принцип возможных перемещений. Решение задачи в вариационной форме сводится к минимизации функционала полной потенциальной энергии пластинки размерами  $a \times b$ :

$$\Pi = \iint_{(S)} W_0 dx dy - \iint_{(S)} qw dx dy - \int_0^a \left( \bar{N}_{23} \cdot w + \bar{L}_{22} \cdot \Omega_2 + \bar{L}_{21} \cdot \Omega_1 \right) \Big|_{y=0}^{y=b} dx - \int_0^b \left( \bar{N}_{13} \cdot w + \bar{L}_{11} \cdot \Omega_1 + \bar{L}_{12} \cdot \Omega_2 \right) \Big|_{x=0}^{x=a} dy,$$
(16)

где поверхностная плотность потенциальной энергии её деформации  $W_0$  выражается как

$$W_{0} = \frac{1}{2} \Big\{ D_{*} \big( \Gamma_{13}^{2} + \Gamma_{23}^{2} \big) + D' \big[ (1 + 2\eta_{2}) \big( k_{11}^{2} + k_{22}^{2} \big) + 2\eta_{2} k_{11} k_{22} \big] + D' \big( k_{12}^{2} + k_{21}^{2} + 2\eta_{2} k_{12} k_{21} \big) \Big\}.$$
(17)

Отметим, что модель поперечного изгиба моментно-мембранной теории упругих пластин в силу того, что по толщине пластинки все искомые величины (1) распределены равномерно, при обращении в нуль моментной жёсткостной постоянной D' не переходит в модель классической теории изгиба пластин. Однако эта модель, с математической точки зрения, аналогична модели изгиба пластин с малой сдвиговой жёсткостью, то есть модели пластин типа Тимошенко [31]. Это означает, что обе модели описываются одинаковыми уравнениями, но физические уравнения содержат различные коэффициенты.

# 3. Конечно-элементное решение краевых задач статики и собственных колебаний в рамках моментномембранной теории упругих пластин на примере прямоугольного листа графена при плоском напряжённом состоянии и при поперечном изгибе

#### 3.1. Задача статики

В рассматриваемых задачах действительные поля переменных сообщают минимум функционалу полной потенциальной энергии. Для задачи плоского напряжённого состояния (модель А) функционал задаётся выражениями (7)–(10), для задачи поперечного изгиба (модель Б) — выражениями (16), (17). В рамках основных процедур МКЭ будем отыскивать приближение к точному решению для обеих граничных задач.

После разбиения прямоугольной срединной поверхности на прямоугольные конечные элементы полная потенциальная энергия пластинки представляется в виде:

$$\Pi = \sum_{e=1}^{m} \Pi^{e} = \sum_{e=1}^{m} \iint_{s^{e}} \frac{1}{2} \varepsilon^{\mathrm{T}} \sigma ds^{e} - \sum_{e=1}^{m} \iint_{l^{e}} U^{\mathrm{T}} p^{e} dl^{e},$$
(18)

где  $s^e$  — площадь конечного элемента,  $l^e$  — его контур, m — общее число элементов,  $\varepsilon^T$ ,  $\sigma$ ,  $U^T$ ,  $p^e$  — векторы переменных, T — символ операции транспонирования.

<u>Модель А.</u> Плоское напряжённое состояние пластинки. В этом случае величины, входящие в (18), выражаются через следующие параметры элементов:  $\{\varepsilon^e\}^T = (\Gamma_{11}^e, \Gamma_{22}^e, \Gamma_{12}^e, \Gamma_{21}^e, k_{13}^e, k_{23}^e)$  — вектор обобщённых деформаций,  $\{\sigma^e\}^T = (T_{11}^e, T_{22}^{(e)}, S_{12}^e, S_{21}^e, L_{13}^{(e)}, L_{23}^{(e)})$  — вектор обобщённых усилий,  $\{u^e\}^T = (u_1^e, u_2^e, \Omega_3^e)$  — вектор обобщённых перемещений,  $\{p^e\}^T = (T_{11}^{(e)}, S_{12}^{(e)}, L_{13}^{(e)})$  — усилия на контурах x = const прямоугольного элемента,  $\{p^e\}^T = (S_{21}^e, T_{22}^{(e)}, L_{23}^{(e)})$  — усилия на контурах y = const прямоугольного элемента. Символ T указывает на операцию транспонирования.

Рассмотрим равновесие некоторого элемента eс узлами i,j,k,l, каждый из которых характеризуется 9 степенями свободы (9 независимыми переменными):  $u_1^{(e)}, u_2^{(e)}, \Omega_3^{(e)} \partial u_1^{(e)} / \partial x, \partial u_2^{(e)} / \partial x, \partial u_3^{(e)} / \partial x, \partial u_1^{(e)} / \partial y, \\ \partial u_2^{(e)} / \partial y, \partial \Omega_3^{(e)} / \partial y$ . Представим переменные  $u_1^{(e)}, u_2^{(e)}, \Omega_3^{(e)}$  в плоскости  $\{x,y\}$  в виде полиномиальных рядов, содержащих в общей сложности 36 коэффициентов  $\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_{36}$ :

$$u_{1}^{(e)} = \alpha_{1} + \alpha_{2}x + \alpha_{3}y + \alpha_{4}x^{2} + \alpha_{5}y^{2} + \alpha_{6}xy + \alpha_{7}x^{2}y + \alpha_{8}xy^{2} + \alpha_{9}x^{3} + \alpha_{10}y^{3} + \alpha_{11}x^{3}y + \alpha_{12}xy^{3},$$

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

$$\Omega_{3}^{(e)} = \alpha_{25} + \alpha_{26}x + \alpha_{27}y + \alpha_{28}x^{2} + \alpha_{29}y^{2} + \alpha_{30}xy + \alpha_{31}x^{2}y + \alpha_{32}xy^{2} + \alpha_{33}x^{3} + \alpha_{34}y^{3} + \alpha_{35}x^{3}y + \alpha_{36}xy^{3}.$$
(19)

После выполнения процедур МКЭ придём к соответствующим дискретным представлениям:

$$\{u^e\} = [N]\{\delta^e\}, \quad \{\varepsilon^e\} = [R][N]\{\delta^e\} = [B]\{\delta^e\}, \quad \{\sigma^e\} = [D][B]\{\delta^e\}, \tag{20}$$

где [N] — матрица базисных функций конечного элемента (матрица функций формы), [R] — матрица дифференциальных операторов, связывающих линейные деформации и деформации изгиба–кручения с перемещениями и свободным поворотом, [D] — матрица упругости:

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

Далее вектор узловых обобщённых перемещений в элементе е выражается через искомые переменные:

$$\{\delta^e\}^{\mathrm{T}} = \left(u_{1i}^e, \frac{\partial u_{1i}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{1i}^e}{\partial y}, u_{2i}^e, \frac{\partial u_{2i}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{2i}^e}{\partial y}, \Omega_{3i}^e, \frac{\partial \Omega_{3i}^e}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{3i}^e}{\partial y}, u_{1j}^e, \frac{\partial u_{1j}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{1j}^e}{\partial y}, u_{2j}^e, \frac{\partial u_{2j}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{2j}^e}{\partial y}, \Omega_{3j}^e, \frac{\partial \Omega_{3j}^e}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{3j}^e}{\partial y}, u_{2j}^e, \frac{\partial u_{2j}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{2j}^e}{\partial y}, \Omega_{3j}^e, \frac{\partial \Omega_{3j}^e}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{3j}^e}{\partial y}, u_{2j}^e, \frac{\partial u_{2j}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{2j}^e}{\partial y}, \frac{\partial \Omega_{3j}^e}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{3j}^e}{\partial y}, u_{2j}^e, \frac{\partial u_{2j}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{2j}^e}{\partial y}, \frac{\partial u_{2j}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{2j}^e}{\partial y}, \frac{\partial u_{2j}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{2j}^e}{\partial y}, \frac{\partial u_{2j}^e}{\partial y}, \frac{\partial u_{2j}^e}{\partial x}, \frac{\partial u_{2j}^e}{\partial y}, \frac{\partial u_{$$

$$u_{1k}^{e}, \frac{\partial u_{1k}^{e}}{\partial x}, \frac{\partial u_{1k}^{e}}{\partial y}, u_{2k}^{e}, \frac{\partial u_{2k}^{e}}{\partial x}, \frac{\partial u_{2k}^{e}}{\partial y}, \Omega_{3k}^{e}, \frac{\partial \Omega_{3k}^{e}}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{3k}^{e}}{\partial y}, u_{1l}^{e}, \frac{\partial u_{1l}^{e}}{\partial x}, \frac{\partial u_{1l}^{e}}{\partial y}, u_{2l}^{e}, \frac{\partial u_{2l}^{e}}{\partial x}, \frac{\partial u_{2l}^{e}}{\partial y}, \Omega_{3l}^{e}, \frac{\partial \Omega_{3l}^{e}}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{3l}^{e}}{\partial y} \right).$$
(21)

<u>Модель Б.</u> Поперечный изгиб пластинки. При поперечном изгибе входящие в выражение полной потенциальной энергии пластинки (18) обобщённые параметры связываются с характеристиками конечных элементов, которые отвечают состоянию поперечного изгиба:  $\{u^e\}^T = (w^e, \Omega_1^e, \Omega_2^e)$  — 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,  $\{p^e\}^T = (N_{13}^e, L_{11}^e, L_{12}^e)$  — усилия на контуре x = const прямоугольного элемента,  $\{p^e\}^T = (N_{23}^e, L_{21}^e, L_{22}^e)$  — усилия на контуре y = const прямоугольного элемента.

Узлы прямоугольного конечного элемента также имеют по 9 степеней свободы ( $w^e$ ,  $\Omega_1^e$ ,  $\Omega_2^e \partial w^e / \partial x$ ,  $\partial w^e / \partial y$ ,  $\partial \Omega_1^e / \partial x$ ,  $\partial \Omega_1^e / \partial y$ ,  $\partial \Omega_2^e / \partial x$ ,  $\partial \Omega_2^e / \partial y$ ). Прогиб  $w^e$  и независимые повороты  $\Omega_1^e$ ,  $\Omega_2^e$  представляются подобно (20):

$$w = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y + \alpha_4 x^2 + \alpha_5 y^2 + \alpha_6 xy + \alpha_7 x^2 y + \alpha_8 xy^2 + \alpha_9 x^3 + \alpha_{10} y^3 + \alpha_{11} x^3 y + \alpha_{12} xy^3,$$
  

$$\Omega_1 = \alpha_{13} + \alpha_{14} x + \alpha_{15} y + \alpha_{16} x^2 + \alpha_{17} y^2 + \alpha_{18} xy + \alpha_{19} x^2 y + \alpha_{20} xy^2 + \alpha_{21} x^3 + \alpha_{22} y^3 + \alpha_{23} x^3 y + \alpha_{24} xy^3,$$
  

$$\Omega_2 = \alpha_{25} + \alpha_{26} x + \alpha_{27} y + \alpha_{28} x^2 + \alpha_{29} y^2 + \alpha_{30} xy + \alpha_{31} x^2 y + \alpha_{32} xy^2 + \alpha_{33} x^3 + \alpha_{34} y^3 + \alpha_{35} x^3 y + \alpha_{36} xy^3,$$

В этом случае также приходим к дискретным выражениям вида (20), где на этот раз

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

Вектор узловых обобщённых перемещений в элементе е связан с другими узловыми переменными:

$$\{\delta^{e}\}^{\mathrm{T}} = \left(w_{i}^{e}, \frac{\partial w_{i}^{e}}{\partial x}, \frac{\partial w_{i}^{e}}{\partial y}, \Omega_{1i}^{e}, \frac{\partial \Omega_{1i}^{e}}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{2i}^{e}}{\partial y}, \Omega_{2i}^{e}, \frac{\partial \Omega_{2i}^{e}}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{2i}^{e}}{\partial y}, w_{j}^{e}, \frac{\partial w_{j}^{e}}{\partial x}, \frac{\partial w_{j}^{e}}{\partial y}, \Omega_{1j}^{e}, \frac{\partial \Omega_{1j}^{e}}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{2j}^{e}}{\partial y}, \frac{\partial \Omega_{2i}^{e}}{\partial y}, w_{j}^{e}, \frac{\partial w_{j}^{e}}{\partial x}, \frac{\partial w_{j}^{e}}{\partial y}, \Omega_{1j}^{e}, \frac{\partial \Omega_{1j}^{e}}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{2j}^{e}}{\partial y}, \frac{\partial \Omega_{2j}^{e}}{\partial y}, \frac{\partial \Omega_{2i}^{e}}{\partial y}, \Omega_{1l}^{e}, \frac{\partial \Omega_{1i}^{e}}{\partial x}, \frac{\partial \Omega_{2i}^{e}}{\partial y}, \Omega_{2l}^{e}, \frac{\partial \Omega_{2i}^{e}}{\partial y}, \frac{\partial \Omega_{2i}^$$

Далее, для задач А и Б, исходя из функционала (18), после дифференцирования в соответствии с МКЭ [32–34] и введения обозначений:

$$f^{e} = \int_{(l^{e})} [N]^{\mathrm{T}} \{p^{e}\} dl^{e}, [K^{e}] = \iint_{(s^{e})} [B]^{\mathrm{T}} [D] [B] ds^{e},$$
(23)

придём к уравнению равновесия элемента е:

$$\frac{\partial \Pi^e}{\partial \{\delta^e\}} = [K^e] \{\delta^e\} - \{f^e\} = 0$$

где  $[K^e]$  — матрицы жёсткости конечного элемента  $e, \{f^e\}$  — вектор эквивалентных узловых сил.

Далее, объединим эти элементарные матричные соотношения в одно матричное соотношение, в которое внесём изменения в целях учёта кинематических граничных условий (при представлении вектора узловых сил статические граничные условия выполняются автоматически), получим окончательную систему алгебраических уравнений:

$$\left[K_{\Sigma}\right]\left\{\Delta\right\} = \left\{f_{\Sigma}\right\},\,$$

порядок которой соответствует числу введённых в рассмотрение неизвестных. Матрица  $[K_{\Sigma}]$  носит название глобальной матрицы жёсткости,  $\{f_{\Sigma}\}$  — глобального вектора узловых сил системы, а  $\{\Delta\}$  — глобального вектора узловых неизвестных:

$$\{\Delta\} = \{\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_N\}^{\mathrm{T}}.$$
(24)

Здесь: N — общее число узлов в системе;  $\delta_i$  — вектор неизвестных *i*-го узла вида (21) или (22).

#### 3.2. Задача собственных колебаний листа графена

Решение этой задачи также будем находить численно, с помощью МКЭ.

При исследовании собственных колебаний пластины по модели А функционал (7)–(10) заменяется лагранжианом:

$$L_{1} = \frac{1}{2} \iint_{(s)} \left[ \left[ \left[ \left\{ \Gamma_{11}^{2} + \Gamma_{22}^{2} + 2\nu\Gamma_{11}\Gamma_{22} \right\} + C_{*} \left( \Gamma_{12}^{2} + \Gamma_{21}^{2} + 2\eta_{1}\Gamma_{12}\Gamma_{21} \right) + B_{*} \left( k_{13}^{2} + k_{23}^{2} \right) \right] dxdy - \frac{1}{2} \omega^{2} \iint_{(s)} \left[ \rho_{0} \left( u_{1}^{2} + u_{2}^{2} \right) + J_{0} \Omega_{3}^{2} \right] dxdy,$$

$$(25)$$

где  $\omega$  — круговая частота колебаний. В случае модели Б функционал (16), (17) заменяется лагранжианом вида:

$$L_{2} = \frac{1}{2} \iint_{(S)} \left\{ D_{*} \left( \Gamma_{13}^{2} + \Gamma_{23}^{2} \right) + D' \left[ (1 + 2\eta_{2}) \left( k_{11}^{2} + k_{22}^{2} \right) + 2\eta_{2} \cdot k_{11} k_{22} \right] + D' \left( k_{12}^{2} + k_{21}^{2} + 2\eta_{2} \cdot k_{12} k_{21} \right) \right\} dxdy - \frac{1}{2} \left\{ D_{*} \left( \Gamma_{13}^{2} + \Gamma_{23}^{2} \right) + D' \left[ (1 + 2\eta_{2}) \left( k_{11}^{2} + k_{22}^{2} \right) + 2\eta_{2} \cdot k_{11} k_{22} \right] \right\} dxdy - \frac{1}{2} \left\{ D_{*} \left( \Gamma_{13}^{2} + \Gamma_{23}^{2} \right) + D' \left[ (1 + 2\eta_{2}) \left( k_{11}^{2} + k_{22}^{2} \right) + 2\eta_{2} \cdot k_{11} k_{22} \right] \right\} dxdy - \frac{1}{2} \left\{ D_{*} \left( \Gamma_{13}^{2} + \Gamma_{23}^{2} \right) + D' \left[ (1 + 2\eta_{2}) \left( k_{11}^{2} + k_{22}^{2} \right) + 2\eta_{2} \cdot k_{11} k_{22} \right] \right\} dxdy - \frac{1}{2} \left\{ D_{*} \left( \Gamma_{13}^{2} + \Gamma_{23}^{2} \right) + D' \left[ (1 + 2\eta_{2}) \left( k_{11}^{2} + k_{22}^{2} \right) + 2\eta_{2} \cdot k_{11} k_{22} \right] \right\} dxdy - \frac{1}{2} \left\{ D_{*} \left( \Gamma_{13}^{2} + \Gamma_{23}^{2} \right) + D' \left[ (1 + 2\eta_{2}) \left( k_{11}^{2} + k_{22}^{2} \right) + 2\eta_{2} \cdot k_{11} k_{22} \right] \right\} dxdy - \frac{1}{2} \left\{ D_{*} \left( \Gamma_{13}^{2} + \Gamma_{23}^{2} \right) + D' \left[ (1 + 2\eta_{2}) \left( k_{11}^{2} + k_{22}^{2} \right) + 2\eta_{2} \cdot k_{11} k_{22} \right] \right\} dxdy - \frac{1}{2} \left\{ D_{*} \left( \Gamma_{13}^{2} + \Gamma_{23}^{2} \right) + D' \left[ (1 + 2\eta_{2}) \left( k_{11}^{2} + k_{22}^{2} \right) + 2\eta_{2} \cdot k_{11} k_{22} \right] + D' \left( k_{12}^{2} + k_{21}^{2} + 2\eta_{2} \cdot k_{12} k_{21} \right) \right\} dxdy - \frac{1}{2} \left\{ D_{*} \left( \Gamma_{13}^{2} + \Gamma_{23}^{2} \right) + D' \left( R_{11}^{2} + R_{21}^{2} + 2\eta_{2} \cdot k_{21} \right\} dxdy - \frac{1}{2} \left\{ D_{*} \left( \Gamma_{13}^{2} + \Gamma_{23}^{2} \right) + D' \left( \Gamma_{13}^{2} + \Gamma_{23}^{2} \right) + D' \left( \Gamma_{13}^{2} + \Gamma_{23}^{2} + 2\eta_{2} \cdot k_{21} \right\} dxdy - \frac{1}{2} \left\{ D_{*} \left( \Gamma_{13}^{2} + \Gamma_{23}^{2} \right) + D' \left( \Gamma_{13}^{2} + \Gamma_{23}^{2} + \Gamma_{23}^{2$$

$$-\frac{1}{2}\omega^{2} \iint_{(S)} \left[\rho_{0}w^{2} + J_{0}\left(\Omega_{1}^{2} + \Omega_{2}^{2}\right)\right] dxdy,$$
(26)

Экстремальные свойства (см. [35]) функционала (25) или (26) приводят в задаче на собственные колебания к следующим конечно-элементным уравнениям для элемента:

$$\{[K^e] - \omega^2[M^e]\} \cdot \{\delta^e\} = 0,$$

где [ $K^e$ ] — матрица жёсткости (23), [ $M^e$ ] — матрица массы конечного элемента e. Глобальная система однородных алгебраических уравнений метода МКЭ в целом для пластины примет вид:

$$\left\{ \left[ K_{\sum} \right] - \omega^2 \left[ M_{\sum} \right] \right\} \cdot \left\{ \Delta \right\} = 0, \tag{27}$$

при этом  $[K_{\Sigma}]$  — глобальная матрица жёсткости,  $[M_{\Sigma}]$  — глобальная матрица масс,  $\{\Delta\}$  — глобальный вектор узловых неизвестных (24). В системе (27) необходимо учесть кинематические граничные условия.

Система (27) является задачей на собственные значения, решениями которой служат частоты и формы собственных колебаний пластины в рамках моделей А и Б листа графена.

#### 4. Результаты решения задач

Рассмотрим задачи статики и собственных колебаний прямоугольного листа графена по модели Б (поперечный изгиб пластинки) (Рис. 1) при двух вариантах закрепления по контуру: 1) шарнирное опирание; 2) жёсткое защемление. В задаче статики зададим  $q_3 \equiv \text{const}, m_1 = 0, m_2 = 0$ . Первый вариант граничных условий записывается так:

$$x = 0, a: \quad w = 0, \quad \frac{d\Omega_2}{dx} = 0, \quad \Omega_1 = 0;$$

$$y = 0, b: \quad w = 0, \quad \Omega_2 = 0, \quad \frac{d\Omega_1}{dy} = 0.$$
(28)

В расчёте использовались характеристики графена из [21] (размерности содержат приставку «н» — нано: наноНьютон (нН), нанометр (нм) и так далее):  $D_* = 86$  нН/нм; D' = 0.415 нН·нм;  $\eta_2 = -0.219$ . Для  $q_3$  принималось значение:  $q_3 = 10^{-3}$  нН/нм<sup>2</sup>. Пластинка графена имела размеры 0 = 20 нм, b = 20 нм.

Из решения матричного уравнения (27) с учётом граничных условий (28) получим значения всех искомых величин в любой точке прямоугольной области. Таблица 1 содержит вычисленные значения компонент обобщённых переменных в центральной точке D(a/2,b/2) прямоугольной области размерами  $a \times b$ . Для сравнения здесь и в последующих таблицах приведены точные значения, определённые из решения граничной задачи методом двойных тригонометрических рядов.



Рис. 1. Распределённые усилия (а) и моменты (б) в элементе пластины при расчёте по модели Б

Компонента	Число конечн	Топное значение			
	4	16	36	64	точное значение
Прогиб w, нм	0.1019	1.1214	1.4664	1.5231	1.5665
Свободный поворот $\Omega_1$ , рад	0	0	0	0	0
относительно оси $x$					
Свободный поворот $\Omega_2$ , рад	0	0	0	0	0
относительно оси $C$					
Перерезывающее усилие $N_{13}$ ,	0	0	0	0	0
нН/нм					
Перерезывающее усилие N <sub>23</sub> ,	0	0	0	0	0
нН/нм					
Крутящий момент $L_{11}$ , нН	0	0	0	0	0
Крутящий момент L <sub>22</sub> , нН	0	0	0	0	0
Изгибающий момент $L_{12}$ , нН	0.0023	0.0156	0.0182	0.01817	0.01775
Изгибающий момент $L_{21}$ , нН	-0.0023	-0.0156	-0.0182	-0.01817	-0.01775

Таблица 1. Значения компонент обобщённых переменных в центре прямоугольной области

**Таблица 2.** Значения компонент обобщённых переменных в точке с координатами B(a,b/2)

Компонента	Число конечных элементов в дискретизирующей область сетке				Тонное значение
	4	16	36	64	ТОЧНОЕ значение
Свободный поворот $\Omega_2$ , рад	0.0133	0.1786	0.2391	0.2504	0.2598
относительно оси у					
Перерезывающее усилие N <sub>13</sub> ,	-0.0597	-0.0377	-0.0144	-0.0086	-0.0067
нН/нм					
Крутящий момент $L_{11}$ , нН	0	0	0	0	0
Изгибающий момент $L_{12}$ , нН	0	0	0	0	0

Таблица 3. Наименьшая частота собственных колебаний листа графена

Наименьшая частота	Число	конечн	Тонное знанение	
собственных колебаний	4	16	36	точное значение
$\omega, \Gamma \Gamma$ ц	19.5	6.47	5.80	5.72

Результаты решения задачи на собственные колебания прямоугольного листа графена приведены в таблице З ( $\rho_0 = 0.76 \cdot 10^{-15}$  нкг/нм<sup>2</sup>;  $J_0 = 0.46 \cdot 10^{-19}$  нкг [21]).

Данные таблиц 1–3 демонстрируют сходимость численного решения к точному с измельчением конечноэлементной сетки.

Рассмотрим задачу при втором варианте граничных условий:

$$x = 0, a: w = 0, \Omega_1 = 0, \Omega_2 = 0;$$
  
 $x = 0, b: w = 0, \Omega_1 = 0, \Omega_2 = 0.$ 

При 64 конечных элементах получены следующие результаты: w(O) = 0.478 нм;  $\Omega_1(O) = \Omega_2(O) = 0$ ;

 $N_{13}(O) = N_{23}(O) = L_{11}(O) = L_{22}(O) = 0; L_{12}(O) = 0.00897 \text{ HH}; L_{21}(O) = -0.00897 \text{ HH}; \omega = 10.9 \text{ ГГц.}$ 



**Рис. 2.** Расчётная область в задаче плоского напряжённого состояния прямоугольного листа графена

Теперь рассмотрим задачи статики и собственных колебаний прямоугольного листа графена по модели А (плоское напряжённое состояние). На рисунке 2 показан прямоугольный лист графена с контрольными точками. Левый конец этой области жёстко защемлён, в точке *А* приложена сосредоточенная нагрузка *P*. Граничные условия этой задачи имеют вид:

$$x=0: \quad u_1=0, u_2=0, \Omega_3=0$$
  

$$y=0: \quad S_{21}=0, T_{22}=0, L_{23}=0,$$
  

$$y=b: \quad S_{21}=0, T_{22}=-P\delta(x-a,y) L_{23}=0$$
  

$$x=a: \quad S_{12}=0, T_{11}=0, L_{13}=0,$$

где  $\delta(x,y)$  — дельта-функция Дирака.

Расчёты выполнены при значениях параметров:  $E_* = 287$  нН/нм;  $\tilde{E}_* = 304$  нН/нм;  $C_* = 168$  нН/нм;  $B_* = 0,505$  нН·нм [21], a = 20 нм, b = 20 нм, P = 0,5 нН. В результате вычисленный получены следующие данные в точках A(a,b), B(0,b/2) при  $\omega = 93$  ГГц:  $u_1(A) = 0.0115$  нм,  $u_2(A) = -0.0226$  нм,  $\Omega_3(A) = -0.00481$  рад,  $T_{11}(B) = -0.0014$  нН/нм,  $S_{12}(B) = 0.00328$  нН/нм,  $L_{13}(B) = 0.00014$  нН.

# 5. Заключение

На основе построенной в рамках моментно-мембранной линейной теории упругих тонких пластин континуальной математической модели деформационного поведения листа графена представлен его конечно-элементный расчёт в случае задач статики и собственных колебаний. Использован четырёхузловой прямоугольный конечный элемент с характерными узловыми кинематическими параметрами, отвечающими моментно-мембранной теории упругих тонких пластин. При вариационной реализации метода конечных элементов для задач статики листа графена получены матрицы жёсткости и векторы эквивалентных узловых усилий, а для задачи собственных колебаний — матрица жёсткости и матрица масс. С использованием разработанного алгоритма конечно-элементного подхода решены и проанализированы прикладные задачи статики и собственных колебаний листа графена при его плоском напряжённом состоянии и поперечном изгибе. Численные результаты демонстрируют достаточно хорошую сходимость. Построенные конечно-элементные соотношения обладают универсальностью и могут применяться при решении других задач с наноструктурами в рамках моментно-мембранной линейной теории упругих оболочек.

Работа выполнена в рамках контракта N: 10-12/23-I/SHSU, финансируемого Комитетом по науке Республики Армении.

#### Литература

- 1. Geim A.K., Novoselov K.S. The rise of graphene // Nature Materials. 2007. No. 3. P. 183-191. DOI: 10.1038/nmat1849.
- 2. Баимова Ю.А., Мулюков Р.Р. Графен, нанотрубки и другие углеродные наноструктуры. М.: РАН, 2018. 212 с.

- 3. Kang J.W., Kim H.-W., Kim K.-S., Lee J.H. Molecular dynamics modeling and simulation of a graphene-based nanoelectromechanical resonator // Current Applied Physics. 2013. Vol. 13, no. 4. P. 789–794. DOI: 10.1016 / j. cap.2012.12.007.
- 4. *Wang J., Li T.T.* Molecular dynamics simulation of the resonant frequency of graphene nanoribbons // Ferroelectrics. 2019. Vol. 549, no. 1. P. 87–95. DOI: 10.1080/00150193.2019.1592547.
- 5. Попов А.М. Вычислительные нанотехнологии. М.: КноРус, 2017. 312 с.
- 6. *Korobeynikov S.N., Alyokhin V.V., Babichev A.V.* Simulation of mechanical parameters of graphene using the DREIDING force field // Acta Mechanica. 2018. Vol. 229, no. 6. P. 2343–2378. DOI: 10.1007/s00707-018-2115-5.
- 7. *Korobeynikov S.N., Alyokhin V.V., Babichev A.V.* On the molecular mechanics of single layer graphene sheets // International Journal of Engineering Science. 2018. Vol. 133. P. 109–131. DOI: 10.1016/j.ijengsci.2018.09.001.
- Korobeynikov S.N., Alyokhin V.V., Babichev A.V. Advanced nonlinear buckling analysis of a compressed single layer graphene sheet using the molecular mechanics method // International Journal of Mechanical Sciences. 2021. Vol. 209. 106703 DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2021.106703.
- 9. Аннин Б.Д., Баимова Ю.А., Мулюков Р.Р. Механические свойства, устойчивость, коробление графеновых листов и углеродных нанотрубок (обзор) // Прикладная механика и техническая физика. 2020. Т. 61, № 5. С. 175–189. DOI: 10.15372/PMTF20200519.
- Квашнин А.Г., Сорокин П.Б., Квашнин Д.Г. Теоретические исследования механических свойств графеновых мембран методом молекулярной механики // Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Математика и физика. 2009. Т. 2, № 4. С. 426–431.
- Odegard G.M., Gates T.S., Nicholson L.M., Wise K.E. Equivalent-Continuum Modeling of Nano-structured Materials: Technical Memorandum / NASA Langley Research Center. 2001. NASA/TM-2001-210863–2001.
- 12. *Li C., Chou T.-W.* A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes // International Journal of Solids and Structures. 2003. Vol. 40. P. 2487–2499. DOI: 10.1016/S0020-7683(03)00056-8.
- 13. Гольдитейн Р.В., Ченцов А.В. Дискретно-континуальная модель нанотрубки // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. 2005. № 4. С. 57–74.
- 14. *Wan H., Delale F.* A structural mechanics approach for predicting the mechanical properties of carbon nanotubes // Meccanica. 2009. Vol. 45. P. 43–51. DOI: 10.1007/s11012-009-9222-2.
- 15. *Беринский И.Е., Кривцов А.М., Кударова А.М.* Определение изгибной жёсткости графенового листа // Физическая мезомеханика. 2014. Т. 17, № 1. С. 57–65. URL: https://www.elibrary.ru/rzuckp.
- Иванова Е.А., Морозов Н.Ф., Семенов Б.Н., Фирсова А.Д. Об определении упругих моделей наноструктур: теоретические расчеты и методика экспериментов // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. 2005. № 4. С. 75–84.
- 17. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Фирсова А.Д. Учёт моментного взаимодействия при расчёте изгибной жёсткости наноструктур // Доклады Академии наук. 2003. Т. 391, № 6. С. 764–768.
- Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. Получение макроскопических соотношений упругости сложных кристаллических решёток с учётом моментных взаимодействий на микроуровне // Прикладная математика и механика. 2007. Т. 71, № 4. С. 595–615.
- 19. *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. 476–479.
- 20. Современные проблемы механики. Механические свойства ковалентных кристаллов / под ред. А.М. Кривцов, О.С. Лобода. СПб.: Исд-во Политехн. ун-та, 2014. 160 с.
- 21. Саркисян С.О. Стержневая и континуально-моментная модели деформаций двумерных наноматериалов // Физическая мезомеханика. 2022. Т. 25, № 2. С. 109–121. DOI: 10.55652/1683-805X\_2022\_25\_2\_109.
- 22. 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. DOI: 10.24411/1683-805Х-2020-14002.
- 23. *Саркисян С.О.* Вариационные принципы моментно-мембранной теории оболочек // Вестник Московского университета. Серия 1. Математика. Механика. 2022. № 1. С. 38–47.
- 24. *Sachio N., Benedict R., Lakes R.* Finite element method for orthotropic micropolar elasticity // International Journal of Engineering Science. 1984. Vol. 22, no. 3. P. 319–330. DOI: 10.1016/0020-7225(84)90013-2.
- Nakamura S., Lakes R.S. Finite element analysis of stress concentration around a blunt crack in a cosserat elastic solid // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1988. Vol. 66, no. 3. P. 257–266. DOI: 10.1016/0045-7825 (88)90001-1.
- Корепанов В.В., Матвеенко В.П., Шардаков И.Н. Численное исследование двумерных задач несимметричной теории упругости // Известия Российской академии наук. Механика твёрдого тела. 2008. № 2. С. 63–70.

- 27. Саркисян С.О. Краевые задачи тонких пластин в несимметричной теории упругости // Прикладная математика и механика. 2008. Т. 72, № 1. С. 129–147.
- 28. *Саркисян С.О.* Теория микрополярных упругих тонких оболочек // Прикладная математика и механика. 2012. Т. 76, № 2. С. 325–343.
- 29. Пальмов В.А. Плоская задача теории несимметричной упругости // Прикладная математика и механика. 1964. Т. 28, № 6. С. 1117–1120.
- 30. *Булыгин А.Н., Кувшинский Е.В.* Плоская деформация в асимметрической теории упругости // Прикладная математика и механика. 1967. Т. 31, № 3. С. 543–547.
- 31. Пелех Б.Л. Концентрация напряжений около отверстий при изгибе трансверсально-изотропных пластин. Киев: Наукова думка, 1977. 183 с.
- 32. Норри Д., де Фриз Ж. Введение в метод конечных элементов. М.: Мир, 1981. 304 с.
- 33. Галлагер Р. Метод конечных элементов. Основы. М.: Мир, 1984. 428 с.
- 34. *Белкин А.Е., Гаврюшин С.С.* Расчёт пластин методом конечных элементов. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2008. 232 с.
- 35. Новацкий В. Теория упругости. М.: Мир, 1975. 862 с.

### Сведения об авторах:

Саркисян Самвел Оганесович (корр.), член-корр. НАН Армении, дфмн, проф., Ширакский государственный университет имени М. Налбандяна, Республика Армения, 3126, г. Гюмри, ул. Паруйра Севака, д. 4; e-mail: s\_sargsyan@yahoo.com; ORCID: 0000-0003-1102-1061 Жамакочян Кнарик Араратовна, кфмн, преп., Ширакский государственный университет имени М. Налбандяна; e-mail: knarikzhamakochyan@mail.ru; ORCID: 0009-0008-1692-2866

*Саркисян Лусине Самвеловна*, кфмн, доц., снс, Институт механики НАН РА, Республика Армения, 0019, г. Ереван, пр. Маршала Баграмяна, д. 24/2; e-mail: slusin@yahoo.com; ORCID: 0009-0006-5255-1930