

МЕХАНИКА

УДК 539.3

Член-корреспондент НАН РА С. О. Саркисян

Дискретная и континуальная (микрополярная)  
«стержневая» модели атомной цепочки  
нанокристаллического материала

(Представлено 18/XII 2018)

**Ключевые слова:** *атомная цепочка, нанокристаллический материал, дискретная модель, континуальная (микрополярная) «стержневая» модель.*

**Введение.** В связи с развитием в настоящее время нанотехнологий большой интерес представляет математическое моделирование углеродных материалов (нанотрубка, графен и др.) [1]. При изучении атомных или молекулярных систем большого размера наиболее распространённым является метод молекулярной динамики [1, 2]. В вычислительных нанотехнологиях метод молекулярной динамики (в задачах статики – метод молекулярной механики) позволяет рассчитывать новые и перспективные материалы на атомно-молекулярном уровне и создавать наноматериалы с заданными физико-механическими свойствами.

Следует отметить, что в последние десятилетия широкое распространение при моделировании наноматериалов получили методы механики деформируемого твёрдого тела [3]. При расчёте напряжённо-деформированного состояния, например, нанотрубок, в некоторых работах (например, [4]) пользуются классической теорией упругих тонких оболочек, но без учёта микроструктуры материала, или теорией упругих оболочек [5], когда упругие модули оболочки определяются в результате исследования дискретной модели, в которой учитывается только силовое взаимодействие между формирующими трубку атомами. Однако существование однослойной нанотрубки и графена свидетельствует о необходимости учёта моментного взаимодействия между атомами (в противном случае слой атомов, формирующий нанотрубку или графен, не имел бы изгибной жёсткости, что не соответствует действительности) [6-10].

С другой стороны, известно, что невозможно однозначно определять толщину наноматериалов (нанотрубка, графен и др.). Несмотря на это при

изучении нанотрубки или графена как для отмеченных выше оболочённых моделей [4, 5], так и построенных в работах [12-16] стержневых моделей используется понятие толщины. С этой точки зрения актуально построение таких механических моделей, в данном случае «стержневых», которые, с одной стороны, учитывали бы моментные взаимодействия между атомами наноматериала и, с другой стороны, не использовали понятие их толщины.

В данной работе на основе учёта нецентрального силового и моментного взаимодействия между атомами построена дискретная модель нанокристаллической цепочки атомов и, далее, с помощью предельного перехода построена её континуальная одномерная («стержневая») модель, в которой не фигурирует толщина этого «стержня». В этой микрополярной «стержневой» континуальной модели все упругие постоянные выражаются через параметры атомной дискретной модели рассматриваемой цепочки.

Имея в виду, что в работах [17-19] асимптотическим методом построена простейшая физически понятная и наглядная одномерная модель микрополярного упругого стержня, при рассмотрении которой (при свободных колебаниях) не учитывается понятие толщины этого стержня, при помощи сравнения с континуальной «стержневой» моделью атомной цепочки определяются упругие постоянные микрополярного стержня через параметры атомной дискретной модели цепочки.

**1. Дискретно-моментная модель цепочки атомов. Принцип Гамильтона.** Рассмотрим многоатомную молекулу, когда атомы (с одинаковыми массой и моментом инерции) данной молекулы расположены с равным интервалом  $a$  вдоль одной прямой (такая молекула называется линейной или атомной цепочкой). Пусть на этой прямой расположена ось  $x$ . Будем учитывать взаимодействие каждого атома только с его ближайшими соседями. Действующие силы и моменты на атом с номером  $k$  от соседних атомов с номерами  $k-1$  и  $k+1$  отметим следующим образом. Так как указанные силы имеют нецентральный характер, составляющие по оси  $x$  отметим буквой  $N$ , составляющие по оси  $y$  – буквой  $Q$ , моменты – буквой  $L$ . Движение атомов цепочки проходит в плоскости  $xu$  (по оси  $x$  – продольная деформация, по оси  $y$  – изгибная деформация).

Уравнения движения атома с номером  $k$  как тела-точки [20] выражаются следующим образом (рассматриваем свободные колебания):

$$N^{(k+1)} - N^{(k)} = m \frac{\partial^2 u_1^{(k)}}{\partial t^2}, \quad (1.1)$$

$$\begin{aligned}
Q^{(k+1)} - Q^{(k)} &= m \frac{\partial^2 u_2^{(k)}}{\partial t^2}, \\
L_3^{(k+1)} - L_3^{(k)} + Q^{(k)} \frac{1}{2} a + Q^{(k+1)} \frac{1}{2} a &= I_3 \frac{\partial^2 \omega_3^{(k)}}{\partial t^2}.
\end{aligned} \tag{1.2}$$

Здесь  $m$  и  $I_3$  – масса и собственный момент инерции каждого атома,  $N^{(k)}$  – продольная сила,  $Q^{(k)}$  – перерезывающая сила,  $L_3^{(k)}$  – изгибающий момент,  $(u_1^{(k)}, u_2^{(k)})$  – компоненты вектора перемещения атома с номером  $k$ ,  $\omega_3^{(k)}$  – свободный поворот  $k$ -го атома вокруг собственной оси  $z$ . Во втором уравнении системы (1.2) (т.е. в уравнении моментов) для перерезывающих сил  $Q^{(k)}$  и  $Q^{(k+1)}$  как точки их приложения взяты средние точки между соседними атомами [21].

В литературе (см., например, [22, 23]) хорошо известны выражения для потенциальной энергии многих молекул в линейном приближении (т.е. если считать упругие силы и моменты линейно зависящими от деформационных перемещений и поворотов). Запишем это выражение для рассматриваемой цепочки атомов:

$$V = \frac{1}{2} \sum C_1 \left( d_1^{(k)} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum C_2 \left( d_2^{(k)} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum C_3 \left( \theta^{(k)} \right)^2, \tag{1.3}$$

где  $C_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  – упругие постоянные для соответствующих деформаций (продольных или изгибных),  $d_1^{(k)}$  – продольные относительные перемещения,  $d_2^{(k)}$  – относительные изгибные линейные перемещения,  $\theta^{(k)}$  – относительные угловые свободные перемещения, т. е.

$$\begin{aligned}
d_1^{(k)} &= u_1^{(k+1)} - u_1^{(k)}, \quad d_2^{(k)} = u_2^{(k+1)} - u_2^{(k)} - \frac{1}{2} a \left( \omega_3^{(k+1)} + \omega_3^{(k)} \right), \\
\theta^{(k)} &= \omega_3^{(k+1)} - \omega_3^{(k)}.
\end{aligned} \tag{1.4}$$

Выражение потенциальной энергии (1.3) обычно используется для расчета спектров колебаний многоатомных молекул, причём упругие постоянные  $C_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) можно считать предварительно известными (экспериментально) для многих молекул [22, 14].

Легко заметить, что

$$\begin{aligned}
N^{(k+1)} - N^{(k)} &= - \frac{\partial V}{\partial u_1^{(k)}}, \quad Q^{(k+1)} - Q^{(k)} = - \frac{\partial V}{\partial u_2^{(k)}}, \\
L_3^{(k+1)} - L_3^{(k)} &= - \frac{\partial V}{\partial \omega_3^{(k)}}.
\end{aligned} \tag{1.5}$$

Можем записать закон Гука для рассматриваемой линейной молекулы:

$$N^{(k)} = C_1 \left( u_1^{(k)} - u_1^{(k-1)} \right), \tag{1.6}$$

$$Q^{(k)} = C_2 \left[ \left( u_2^{(k)} - u_2^{(k-1)} \right) - \frac{1}{2} a \left( \omega_3^{(k)} + \omega_3^{(k-1)} \right) \right], \quad (1.7)$$

$$L_3^{(k)} = C_3 \left( \omega_3^{(k)} - \omega_3^{(k-1)} \right).$$

Таким образом, дискретная модель (модель молекулярной динамики) для рассматриваемой линейной молекулы построена. В случае продольных колебаний – это уравнение движения (1.1) и закон упругости (1.6), в случае изгибных колебаний – это уравнения движения (1.2) и закон упругости (1.7).

Для рассматриваемой линейной молекулы кинетическая энергия выражается следующим образом:

$$K = \frac{1}{2} \sum_k \left[ m \left( \frac{du_1^{(k)}}{dt} \right)^2 + m \left( \frac{du_2^{(k)}}{dt} \right)^2 + I_3 \left( \frac{d\omega_3^{(k)}}{dt} \right)^2 \right]. \quad (1.8)$$

Из выражений (1.3), (1.4) и (1.8) следует, что лагранжиан  $L$  для рассматриваемой линейной молекулы равен

$$L = K - V = \frac{1}{2} \sum_k \left\langle \left[ m \left( \frac{du_1^{(k)}}{dt} \right)^2 + m \left( \frac{du_2^{(k)}}{dt} \right)^2 + I_3 \left( \frac{d\omega_3^{(k)}}{dt} \right)^2 \right] - \right. \\ \left. - \left\{ C_1 \left( u_1^{(k+1)} - u_1^{(k)} \right)^2 + C_2 \left[ u \left( u_2^{(k+1)} - u_2^{(k)} \right) - \frac{1}{2} a \left( \omega_2^{(k+1)} + \omega_2^{(k)} \right) \right]^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + C_3 \left( \omega_3^{(k+1)} - \omega_3^{(k)} \right)^2 \right\} \right\rangle, \quad (1.9)$$

а принцип Гамильтона выражается обычным образом:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} (K - V) dt = 0. \quad (1.10)$$

Легко заметить, что вытекающие из принципа Гамильтона (1.10) (с учётом (1.9)) уравнения Эйлера – Лагранжа представляют собой уравнения движения (1.1) и (1.2).

## 2. Одномерная («стержневая») континуальная модель линейной цепочки атомов. Принцип Гамильтона для континуальной модели.

Для построения континуальной модели линейной молекулы представим лагранжиан дискретной модели (1.9) в следующем виде:

$$L = \frac{1}{2} \sum_k a \left\langle \left[ \frac{m}{a} \left( \frac{du_1^{(k)}}{dt} \right)^2 + \frac{m}{a} \left( \frac{du_2^{(k)}}{dt} \right)^2 + \frac{I_3}{a} \left( \frac{d\omega_3^{(k)}}{dt} \right)^2 \right] - \right. \\ \left. - \left\{ C_1 a \left( \frac{u_1^{(k+1)} - u_1^{(k)}}{a} \right)^2 + C_2 a \left[ \frac{u_3^{(k+1)} - u_3^{(k)}}{a} - \frac{1}{2} \left( \omega_3^{(k+1)} + \omega_3^{(k)} \right) \right]^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + C_3 a \left( \frac{\omega_3^{(k+1)} - \omega_3^{(k)}}{a} \right)^2 \right\} \right\rangle. \quad (2.1)$$

Специальная форма, в которой записан лагранжиан дискретной модели (1.9), выбрана для удобства предельного перехода к случаю континуальной модели.

нуальной (непрерывной) модели, т.е. когда  $a \rightarrow 0$ .

Что касается множителя  $a$ , который стоит под знаком суммы перед большими скобками в формуле (2.1), то его следует заменить на  $\Delta x = dx$ , а суммирование по  $k$  заменить интегралом по  $x$ . Далее ясно, что индекс  $k$ , характеризующий номер атома, должен при переходе к континуальной модели превратиться в непрерывную координату  $x$ . Поэтому вместо переменных  $u_1^{(k)}(t)$ ,  $u_2^{(k)}(t)$  и  $\omega_3^{(k)}(t)$  будем теперь иметь переменные  $u(x,t)$ ,  $w(x,t)$  и  $\Omega(x,t)$ . Что касается величин  $C_i \cdot a$ ,  $i=1,2,3$ , ниже убедимся, что предельные их значения, когда  $a \rightarrow 0$ , являются постоянными; пока обозначим их

$$C_i \cdot a = \tilde{C}_i, \quad i=1,2,3. \quad (2.2)$$

Поступая указанным выше образом, в результате предельного перехода, при  $a \rightarrow 0$ , формула (2.1) переходит в лагранжиан континуальной модели, для которого имеем:

$$L = \frac{1}{2} \int_0^\ell \left\{ \left[ \tilde{\rho} \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 + \tilde{\rho} \left( \frac{\partial w}{\partial t} \right)^2 + \tilde{I} \left( \frac{\partial \Omega}{\partial t} \right)^2 \right] - \left( \tilde{C}_1 \varepsilon_x^2 + \tilde{C}_2 \gamma^2 + \tilde{C}_3 \chi^2 \right) \right\} dx. \quad (2.3)$$

Здесь

$$\varepsilon_x = \frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{u_1^{(k+1)} - u_1^{(k)}}{a}, \quad (2.4)$$

$$\gamma = \frac{\partial w}{\partial x} - \Omega = \lim_{a \rightarrow 0} \left[ \frac{u_2^{(k+1)} - u_2^{(k)}}{a} - \frac{1}{2} (\omega_3^{(k+1)} + \omega_3^{(k)}) \right], \quad (2.5)$$

$$\chi = \frac{\partial \Omega}{\partial x} = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{\omega_3^{(k+1)} - \omega_3^{(k)}}{a}, \quad (2.6)$$

$$\tilde{\rho} = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{m}{a}, \quad \tilde{I} = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{I}{a}, \quad (2.7)$$

$\tilde{\rho}$  – линейная плотность массы цепочки,  $\tilde{I}$  – линейная плотность её момента инерции,  $\varepsilon_x$  – относительная продольная деформация,  $\gamma$  – сдвиговая деформация,  $\chi$  – кривизна цепочки.

Для получения уравнения движения, соотношения упругости и геометрических соотношений для континуальной модели уравнения движения (1.1), (1.2) и соотношения упругости (1.7) представим в виде:

$$\frac{N^{(k+1)} - N^{(k)}}{\alpha} = \frac{m}{a} \frac{\partial^2 u_1^{(k)}}{\partial t^2}, \quad (2.8)$$

уравнения движения

$$\frac{Q^{(k+1)} - Q^{(k)}}{\alpha} = \frac{m}{a} \frac{\partial^2 u_2^{(k)}}{\partial t^2},$$

$$\frac{L_3^{(k+1)} - L_3^{(k)}}{\alpha} + \frac{1}{2} Q^{(k)} + \frac{1}{2} Q^{(k+1)} = \frac{I_3}{a} \frac{\partial^2 \omega_3^{(k)}}{\partial t^2} \quad (2.9)$$

соотношения упругости

$$N^{(k)} = c_1 a \frac{u_1^{(k)} - u_1^{(k-1)}}{a}, \quad (2.10)$$

$$Q^{(k)} = c_2 a \left[ \frac{u_2^{(k)} - u_2^{(k-1)}}{a} - \frac{1}{2} (\omega_3^{(k)} + \omega_3^{(k-1)}) \right], \quad (2.11)$$

$$L_3^{(k)} = c_3 a \frac{\omega_3^{(k)} - \omega_3^{(k-1)}}{a}.$$

Переходя к пределу, когда  $\alpha \rightarrow 0$ , получим уравнения движения, соотношения упругости и геометрические соотношения для континуальной модели:

уравнения движения

$$\frac{\partial N}{\partial x} = \tilde{\rho} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial x} = \tilde{\rho} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}, \quad \frac{\partial L_3}{\partial x} + Q = \tilde{I} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial t^2}; \quad (2.13)$$

соотношения упругости

$$N = \tilde{c}_1 \varepsilon_x, \quad (2.14)$$

$$Q = \tilde{c}_2 \gamma, \quad L_3 = \tilde{c}_3 \chi, \quad (2.15)$$

геометрические соотношения

$$\varepsilon_x = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (2.16)$$

$$\gamma = \frac{\partial w}{\partial x} - \Omega, \quad \chi = \frac{\partial \Omega}{\partial x}. \quad (2.17)$$

Уравнения (2.12), (2.14) и (2.16) относятся к продольным колебаниям, а уравнения (2.13), (2.15) и (2.17) – к изгибным колебаниям. К этим группам уравнений следует присоединить начальные и граничные условия.

Для продольных колебаний как начальные условия, при  $t = 0$ , задаются значения для  $u$  и  $\frac{\partial u}{\partial t}$ , а для изгибных колебаний в начале движения задаются значения для  $w, \Omega$  и  $\frac{\partial w}{\partial t}, \frac{\partial \Omega}{\partial t}$ .

При  $x = 0$  или  $x = l$  задаются следующие граничные условия: 1) условия для перемещений и свободного поворота, например, если один из этих краев жестко закреплен:

$$u = 0 \quad (2.18)$$

для продольных колебаний,

$$w = 0, \quad \Omega = 0 \quad (2.19)$$

для изгибных колебаний.

2) для свободного края:

$$N = 0 \quad (2.20)$$

для продольных колебаний,

$$Q = 0, \quad L = 0 \quad (2.21)$$

для изгибных колебаний.

Могут быть граничные условия смешанного вида.

Следует сказать, что уравнения движения (2.12), (2.13) и граничные условия (2.20), (2.21) можем получить и на основе принципа Гамильтона (1.10), (2.3) для континуальной модели.

Если формулы геометрических соотношений (2.16), (2.17) подставить в соотношения упругости (2.14), (2.15) и полученные выражения подставить в уравнения движения (2.12), (2.13), придем к следующим уравнениям (относительно функции  $u = u(x, t)$  при продольных колебаниях  $w(x, t)$ ,  $\Omega(x, t)$  – при изгибных колебаниях):

уравнение продольных колебаний

$$\tilde{c}_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \tilde{\rho} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}; \quad (2.22)$$

уравнения изгибных колебаний

$$\tilde{c}_2 \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - \frac{\partial \Omega}{\partial x} \right) = \tilde{\rho} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}; \quad (2.23)$$

$$\tilde{c}_3 \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x^2} + \tilde{c}_2 \left( \frac{\partial w}{\partial x} - \Omega \right) = \tilde{I} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial t^2}.$$

Модель (2.12), (2.14), (2.16), (2.18) или (2.20) для продольных колебаний цепочки атомов, а модель (2.13), (2.15), (2.17), (2.19) или (2.21) для изгибных колебаний цепочки атомов представляют, соответственно, одномерные-континуальные («стержневые») модели для колебаний цепочки атомов. Уравнения этих моделей не содержат понятие толщины этих «стержней». Это весьма важный результат для наноматериалов, в частности для графина (если считать, что материал расположен в плоскости  $xz$  и все атомы синхронно двигаются относительно оси  $z$ , а колебания проходят в плоскости  $xu$ : по  $x$  – продольные, а по  $u$  – изгибные).

Уравнения (2.22) для продольных колебаний цепочки атомов или (2.23) для изгибных колебаний цепочки атомов можно сравнить с соот-

ветствующими уравнениями простейших моделей колебаний микрополярных тонких стержней.

**3. Уравнения для простейшей прикладной теории микрополярных упругих тонких стержней с независимыми полями перемещений и вращений. Сравнение построенных моделей и определение микрополярных упругих постоянных.** В работах [17, 18] на основе асимптотического подхода построен простейший вариант прикладной теории микрополярных упругих тонких стержней для задач статики и динамики, а в работе [19] изучены конкретные задачи их свободных колебаний. Определяющая система уравнений прикладной теории микрополярных упругих тонких стержней при свободных колебаниях выражаются следующим образом:

уравнение для продольных колебаний

$$E \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \quad (3.1)$$

где  $E$  – модуль Юнга, а  $\rho$  – объёмная плотность массы материала; изгибные колебания

$$\frac{4\mu\alpha}{\mu + \alpha} \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - \frac{\partial \Omega}{\partial x} \right) = \rho \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}, \quad (3.2)$$

$$B \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x^2} + \frac{4\mu\alpha}{\mu + \alpha} \left( \frac{\partial w}{\partial x} - \Omega \right) = I \frac{\partial^2 \Omega}{\partial t^2},$$

где  $\mu$  – классический модуль сдвига,  $\alpha$  – микрополярный модуль сдвига,  $B$  – микрополярная упругая постоянная для исследуемого материала,  $I$  – объёмная плотность момента инерции.

Как можно убедиться, уравнения (2.22) и (3.1), а также (2.23) и (3.2) внешне вполне схожи. Основное отличие состоит в том, что в уравнениях (2.22), (2.23)  $\tilde{\rho}$  представляет собой линейную плотность массы,  $\tilde{I}$  – линейную плотность момента инерции, а в уравнениях (3.1), (3.2)  $\rho$  – объёмная плотность массы,  $I$  – объёмная плотность момента инерции. Понятно, что в левых частях этих уравнений коэффициенты тоже будут физически разными.

Чтобы осуществить сравнение уравнений (2.22) и (3.1), а также (2.23) и (3.2), примем, что представительный объём для рассматриваемого материала – куб размером  $a$ , тогда  $\frac{\tilde{\rho}}{a^2}$  представит собой приближённую величину объёмной плотности материала, а  $\frac{\tilde{I}}{a^2}$  – объёмной плотности момента инерции.

Исходя из этого уравнения (2.22) и (2.23) представим следующим образом:

уравнение продольных колебаний

$$\frac{\tilde{c}_1}{a^2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \quad (3.3)$$



уравнения изгибных колебаний

$$\frac{\tilde{c}_2}{a^2} \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - \frac{\partial \Omega}{\partial x} \right) = \rho \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}, \quad (3.4)$$

$$\frac{\tilde{c}_3}{a^2} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial x^2} + \frac{\tilde{c}_2}{a^2} \left( \frac{\partial w}{\partial x} - \Omega \right) = I \frac{\partial^2 \Omega}{\partial t^2}.$$

Сравнивая уравнения (3.1) и (3.3), а также (3.2) и (3.4), получим

$$E = \frac{\tilde{c}_1}{a^2}, \quad (3.5)$$

$$\frac{4\mu\alpha}{\mu + \alpha} = \frac{\tilde{c}_1}{a^2}, \quad B = \frac{\tilde{c}_3}{a^2}. \quad (3.6)$$

Формулы (3.5) и (3.6) представляют связи между физическими макропараметрами и микро(нано)параметрами данного материала при продольных и изгибных колебаниях. Формулы (3.6) дают возможность вычислять механические постоянные микрополярного вещества через параметры его атомно-молекулярной структуры.

Ширакский государственный университет им М. Налбандяна  
e-mail: s\_sargsyan@yahoo.com

**Член-корреспондент НАН РА С. О. Саркисян**

### **Дискретная и континуальная (микрополярная) «стержневая» модели атомной цепочки кристаллического материала**

Рассматривается линейная цепочка взаимодействующих атомов. Исходя из того, что взаимодействие между атомами имеет общий характер, т.е. силовое взаимодействие – нецентральное, и кроме того имеет место также моментное взаимодействие, построена дискретная модель атомной линейной цепочки с установлением также принципа Гамильтона. При помощи предельного перехода построена континуальная (непрерывная) модель атомной линейной цепочки, которая представляет собой микрополярную одномерную «стержневую» модель. Устанавливаются принцип Гамильтона для этой континуальной модели, а также соответствие между ранее построенной одномерной простейшей моделью микрополярного стержня с независимыми поворотами и континуальной моделью атомной цепочки, в результате чего получены формулы между микрополярными упругими постоянными и параметрами дискретной модели атомной цепочки.

**ՀՀ ԳԱԱ թղթակից անդամ Ս. Ն. Մարգարյան**

**Նանոբյուրեղային նյութից ատոմային շղթայի դիսկրետ և կոնտինուալ (միկրոպոլյար) «ձողային» մոդելները**

Դիտարկվում է փոխազդեցության մեջ գտնվող ատոմների գծային շղթա: Հաշվի առնելով, որ ատոմների միջև փոխազդեցությունը ընդհանուր բնույթի է (այսինքն՝

ուժային փոխազդեցությունը ոչ կենտրոնական է, ու, բացի այդ, տեղի ունի նաև մոմենտային փոխազդեցություն), կառուցվում է ատոմային զծային շղթայի դիսկրետ մոդելը, որի համար հաստատվում է Համիլտոնի սկզբունքը: Այնուհետև սահմանային անցումի միջոցով կառուցվում է ատոմային զծային շղթայի կոնտինուալ (անընդհատ) մոդելը, որը միկրոպոլյար «ձողային» միաչափ մոդել է: Հաստատվում է նաև այդ կոնտինուալ մոդելի համար Համիլտոնի սկզբունքը: Նախապես կառուցված անկախ պտույտներով միկրոպոլյար ձողի պարզագույն մոդելի և ատոմային շղթայի կոնտինուալ միաչափ մոդելի միջև հաստատվում է համապատասխանություն, որի արդյունքում ստացվում են բանաձևային առնչություններ ձողի միկրոպոլյար առաձգական հաստատունների և ատոմային զծային շղթայի դիսկրետ մոդելի պարամետրերի միջև:

**Corresponding member of NAS RA S. H. Sargsyan**

### **Discrete and Continual (Micropolar) «Beam» Models of the Atomic Chain of the Crystalline Material**

A linear chain of interacting atoms is studied in the present paper. Assuming that the interaction between atoms is common, i.e. force interaction is noncentral and, moreover, moment interaction also takes place, a discrete model of the atomic linear chain is constructed with the establishment of Hamilton principle. Then, using the limiting transition, a continual (continuous) model of the atomic linear chain is constructed, which is a micropolar one-dimensional «beam» model. Hamilton principle for this continual model is also established. A correspondence is established between the previously constructed one-dimensional simplest model of a micropolar beam with independent rotations and the continual model of the atomic chain. As a result, formulas are obtained between the micropolar elastic constants and the parameters of the discrete model of the atomic chain.

### **Литература**

1. *Попов А.М.* Вычислительные нанотехнологии. М. КНОРУС. 2017. 312 с.
2. *Елецкий А.В.* – Успехи физ. наук. 2007. Т. 37. № 3. С. 233-274.
3. Введение в микро- и наномеханику. Математические модели и методы. Под ред. А.И. Потапова. Нижний Новгород. Изд-во ННГТУ. 2010. 303 с.
4. *Yakobson B.I., Brabec C.I., Bernholc J.* – Phys. Rev. Lett. 1996. V. 75. P. 2511-2514.
5. *Ru C.Q.* – Phys. Rev. B. 2000. V. 62. № 15. P. 9973-9976.
6. *Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Фирсова А.Д.* – Доклады РАН. 2003. Т. 391. № 6. С. 764-768.
7. *Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.* – Прикладная математика и механика. 2007. Т. 71. Вып. 4. С. 595-615.
8. *Беринский И.Е., Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.* – Изв. РАН. Механика твердого тела. 2007. № 5. С. 6-16.
9. *Кривцов А.М.* Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М. Физматлит. 2007. 304 с.
10. Теоретическая механика. Упругие и тепловые свойства идеальных кристаллов. Под ред. А.М. Кривцова. СПб. Изд. Политехн. ун-та. 2009. 144 с.
11. *Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.* – Доклады РАН. 2001. Т. 381. № 3. С. 345-347.
12. *Odegard G.M., Gates T.S., Nicholson L.M., Wise K. E.* – NASA Langley Research Center: Technical Memorandum NASA/TM-2001-210863. 2001.

13. *Гольдштейн Р.В., Ченцов А. В.* – Изв. РАН. Механика твердого тела. 2005. № 4. С. 57-74.
14. *Li C. A., Chou T. W.* – Int. J. Solids Struct. 2003. V. 40. P. 2487-2499.
15. *Беринский И.Е.* – Научно-техн. ведомости СПбГПУ. 2010. № 104. С. 13-20.
16. *Wan H., Delale F.* – Meccanica. 2010. V. 45. P. 43-51.
17. *Саркисян С.О.* – Физическая мезомеханика. 2008. Т. 11. № 5. С. 41-54.
18. *Саркисян С.О.* В кн.: Проблемы механики деформируемого твердого тела. Сб., посвященный 85-летию академика НАН Армении С. А. Амбарцумяна. Ереван. Гитутюн. 2007. С. 177-183.
19. *Саркисян С.О., Саркисян А.А.* В: Сб. научных трудов, посвященный 80-летию чл.-кор. АН СССР, академика НАН Армении С. Н. Мергеляна. Ванадзор. Изд-во Ванадзорского педагогического ин-та им. Ов. Туманяна. 2008. С. 5-17.
20. *Жилин П.А.* Теоретическая механика. Фундаментальные законы механики. СПб. Изд-во СПбГПУ. 2003. 340 с.
21. *Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Фирсова А.Д.* Теоретическая механика. Определение эквивалентных упругих характеристик дискретных систем. СПб. Изд-во СПбГПУ. 2004. 32 с.
22. *Грибанов А.И.* – Механика полимеров. 1967. № 4. С. 608-614.
23. *Кормилицын О.П.* Механика материалов и структур нано- и микротехники. М. Академия. 2008. 224 с.