

**МОДЕЛЬ ДВУХМЕРНОГО ГРАФИТОВОГО СЛОЯ\***

*П. Е. Товстик<sup>1</sup>, Т. П. Товстик<sup>2</sup>*

1. С.-Петербургский государственный университет,  
д-р физ.-мат. наук, профессор, Peter.tovstik@mail.ru

2. Институт Проблем машиноведения РАН,  
канд. физ.-мат. наук, ст. научн. сотр., tovstik\_t@mail.ru

**Введение.** В последние годы бурное развитие нанотехнологий привело к необходимости исследовать не только электронные и оптические, но и упругие и прочностные свойства наноразмерных структур. С открытием новых механических и физических свойств материалов, имеющих структурные элементы нанометрового масштаба, повысился интерес к моделированию таких материалов на микроскопическом масштабном уровне. Метод молекулярной динамики с развитием вычислительной техники становится инструментом для разработки нанотехнологий в механике материалов. Континуальная механика также описывает объекты всё более уменьшающиеся в размерах. Актуальными становятся задачи сравнения континуального и дискретного описаний деформации сплошной среды [1–5].

Возможности механики в вопросах описания микромира далеко не исчерпаны и не исследованы. Об этом говорит появившаяся недавно работа [6], в которой методами механики получены спектры ряда известных двухатомных молекул, с достаточной точностью совпадающие с экспериментальными значениями. При этом потенциал взаимодействия между атомами найден средствами классической механики. Таким образом, задача квантовой механики решена методом классической механики.

Книга [5] содержит описание эффективных методов и результатов компьютерного моделирования при сильном деформировании и разрушении твёрдых тел, а также обширную библиографию. Моделирование методом динамики частиц требует введения потенциалов взаимодействия частиц, т. е., модели межатомной связи.

Существование однослойных нанотрубок свидетельствует о необходимости учета моментного взаимодействия между атомами. В противном случае слой атомов, формирующий нанотрубку, не имел бы изгибной жесткости, а, стало быть, однослойная трубка была бы неустойчива.

В статье [2] получены выражения для макроскопических тензоров жесткости через тензоры жесткости межатомных связей и показано, что для слоя графита поперечная межатомная связь сравнима с продольной, что возможно только при наличии моментных взаимодействий на микроуровне. В работе [4] была получена модель моментного межатомного взаимодействия для описания графитового слоя. С использованием длинноволнового приближения осуществлен переход к континуальной модели кристаллической решетки и найдены параметры потенциала межатомных связей, позволяющие моделировать графитовый слой.

В нашей работе проводятся исследования свойств плоского графитового слоя, построенного по модели [4]. Построена плотность упругой энергии как функция деформаций при аффинном преобразовании решетки. Рассматриваются деформации, напряже-

---

\*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №07.01.00250).

© П. Е. Товстик, Т. П. Товстик, 2009

ния и устойчивость эквивалентной двумерной сплошной среды. При малых деформациях среда изотропна, а при больших — анизотропна. Для исследования устойчивости построен акустический тензор и используется динамический критерий, заключающийся в существовании стационарных волн деформации. Отмечено, что положительная определенность второй вариации потенциальной энергии не может служить критерием устойчивости. В трехмерном пространстве деформаций построена область устойчивости, в которой деформации имеют порядок 0.12–0.15.

**1. Плоская решетка с парным моментным взаимодействием между частицами.** Рассмотрим бесконечную двумерную решетку частиц, каждая из которых имеет три степени свободы: декартовы координаты  $x, y$  и угол поворота  $\varphi$ . Парное моментное взаимодействие между частицами описывается потенциалом (см. [4])

$$U_0(x_2, y_2, \varphi_2; x_1, y_1, \varphi_1) = \bar{U}_0(r, \gamma, \kappa) = \Pi_0(r) + \Pi_1(r) \sin(3\gamma) \sin\left(\frac{3\kappa}{2}\right), \quad (1.1)$$

$$\Pi_0(r) = D_1 \left[ \left(\frac{\rho}{r}\right)^{12} - 2\left(\frac{\rho}{r}\right)^6 \right], \quad \Pi_1(r) = D_2 \left(\frac{\rho}{r}\right)^m,$$

где (см. рис. 1а)

$$r = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2}, \quad x_2 - x_1 = r \cos \theta, \quad y_2 - y_1 = r \sin \theta, \quad (1.2)$$

$$\gamma = \theta - (\varphi_1 + \varphi_2)/2, \quad \kappa = \varphi_2 - \varphi_1.$$

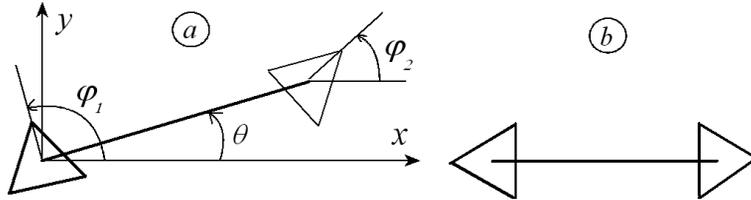


Рис. 1. Две частицы: а) углы, б) устойчивое положение равновесия.

Первое слагаемое в (1.1) есть потенциал Леннарда—Джонса, а второе слагаемое описывает моментное взаимодействие между частицами. При  $\Pi_1 = 0$  моментное взаимодействие отсутствует и устойчивое равновесное положение двух изолированных частиц будет при  $r = \rho$ . Предполагая провести исследование в безразмерных переменных, считаем  $\rho = D_1 = 1$ . Примем значения  $D_2$  и  $m$ , наиболее близко соответствующие графитовому слою [4]:

$$D_2 = -\frac{1}{1.26}, \quad m = 12. \quad (1.3)$$

В этом случае существует множество устойчивых равновесных положений двух частиц при  $r = 0.76872$ , отличающихся друг от друга тем, что углы  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  определены с точностью до слагаемых, кратных  $2\pi/3$ . При  $\theta = 0$  (см. рис. 1б) будет

$$\varphi_1 = \pi/3 + 2k\pi/3, \quad \varphi_2 = 2k\pi/3, \quad k = 0, 1, 2. \quad (1.4)$$

Остальные равновесные положения ( $\varphi_1 = \varphi_2 = 0$ ;  $\varphi_1 = \varphi_2 = \pi/3$ ;  $\varphi_1 = 0, \varphi_2 = \pi/3$ ) неустойчивы.

Частицы с потенциалом (1.1) могут образовывать устойчивую бесконечную решетку из правильных шестиугольников с расстоянием между частицами  $r_0 = 0.75831$  (в размерных величинах  $r_{0*} = 0.1395$  нм). Целью нашего анализа является рассмотрение аффинных деформаций этой решетки, определение возникающих при этом внутренних усилий и исследование устойчивости положений равновесия после деформации.

**2. Аффинная деформация решетки.** После аффинной деформации правильные шестиугольники превратятся в одинаковые шестиугольники с параллельными противоположными сторонами (см. рис. 2). Найдем возможные равновесные формы этих шестиугольников.

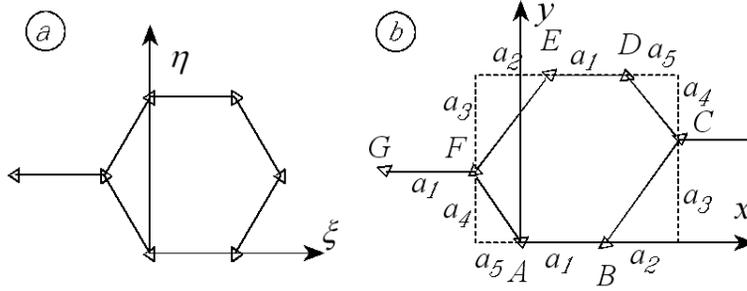


Рис. 2. Повторяющаяся ячейка: недеформированное (a) и деформированное (b) положение.

Все частицы находятся в одинаковых условиях. Поэтому как в недеформированном, так и в деформированном положении будем вычислять потенциальную энергию  $U$  взаимодействия одной из частиц (например, частицы  $A$  с координатами  $x = y = 0$ ,  $\varphi_0$ ) с остальными частицами:

$$U = \sum_i U_0(x_i, y_i, \varphi_i; 0, 0, \varphi_0), \quad (2.1)$$

где суммирование распространяется на те частицы, взаимодействие которых с частицей  $A$  целесообразно учитывать (в силу (1.1) и (1.2) с ростом расстояния  $r$  между частицами силы взаимодействия быстро убывают).

После деформации все ячейки имеют форму шестиугольников с параллельными противоположными сторонами и согласованными с  $\varphi_0$  углами  $\varphi_i$  ( $\varphi_i = \varphi_0 + k\pi/3$ ). Пусть  $x, y$  — декартовы координаты частицы, имевшей до деформации координаты  $\xi, \eta$ , и одна из сторон шестиугольника параллельна оси  $x$ . Форма ячейки описывается шестью параметрами

$$a_i, \quad i = 1, \dots, 5, \quad \varphi_0, \quad (2.2)$$

(где размеры  $a_i$  показаны на рис. 2b). Имеют место формулы

$$\begin{aligned} 1 + \varepsilon_1 &= \frac{\partial x}{\partial \xi} = \frac{2a_1 + a_2 + a_5}{3r_0}, & \omega_1 &= \frac{\partial y}{\partial \xi} = \frac{a_3 - a_4}{3r_0}, \\ 1 + \varepsilon_2 &= \frac{\partial y}{\partial \eta} = \frac{a_3 + a_4}{\sqrt{3}r_0}, & \omega_2 &= \frac{\partial x}{\partial \eta} = \frac{a_2 - a_5}{\sqrt{3}r_0}, \end{aligned} \quad (2.3)$$

связывающие размеры  $a_i$  ячейки с компонентами градиента деформации  $\mathbf{T}$ :

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 1 + \varepsilon_1 & \omega_2 \\ \omega_1 & 1 + \varepsilon_2 \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Нелинейные деформации решетки  $\varepsilon_{ij}$  считаем заданными:

$$\varepsilon_{11} = \varepsilon_1 + \frac{1}{2}(\varepsilon_1^2 + \omega_1^2), \quad \varepsilon_{22} = \varepsilon_2 + \frac{1}{2}(\varepsilon_2^2 + \omega_2^2), \quad \varepsilon_{12} = \omega_1(1 + \varepsilon_2) + \omega_2(1 + \varepsilon_1). \quad (2.5)$$

В силу формул (2.3) деформации  $\varepsilon_{ij}$  являются функциями размеров ячейки  $a_i$ :

$$\varepsilon_{jk} = \varepsilon_{jk}(a_i). \quad (2.6)$$

Для вычисления координат  $x_i, y_i, \varphi_i$  частиц в потенциале (2.1) необходимо найти величины  $a_i$  и угол  $\varphi_0$ . Величины  $a_i$  в силу формул (2.3) и (2.5) удовлетворяют трем уравнениям (2.6). Не любая форма деформированной ячейки является равновесной. Три других ограничения, накладываемые на шесть величин (2.2), вытекают из трех условий равновесия частицы  $A$ . Для записи этих условий введем малые проекции перемещения и поворот  $(x_1, y_1, \varphi_1)$  частицы  $A$ . Тогда потенциал (2.1) примет вид

$$U = \sum_{i \neq 1} U_0(x_i, y_i, \varphi_i; x_1, y_1, \varphi_0 + \varphi_1). \quad (2.7)$$

Условия равновесия частицы  $A$  имеют вид

$$F_x = -\frac{\partial U}{\partial x_1} = 0, \quad F_y = -\frac{\partial U}{\partial y_1} = 0, \quad M = -\frac{\partial U}{\partial \varphi_1} = 0, \quad (2.8)$$

где  $F_x, F_y$  и  $M$  — проекции силы и момент, действующие на частицу  $A$ .

Используем следующую последовательность вычислений. Три из шести величин (2.2), а именно  $a_1, a_2, \varphi_0$ , будем определять из уравнений (2.8). Считая заданными величины  $a_1, a_2, \varepsilon_{ij}$ , семь величин  $a_3, a_4, a_5, \varepsilon_i, \omega_i$  находим из системы уравнений (2.3), (2.5). Эта система легко решается методом итераций. Перепишем ее в виде итерационной схемы:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^{(n+1)} &= \sqrt{1 + 2\varepsilon_{11} - \omega_1^{(n)2}} - 1, & \varepsilon_2^{(n+1)} &= \sqrt{1 + 2\varepsilon_{22} - \omega_2^{(n)2}} - 1, \\ a_5^{(n+1)} &= 3r_0(1 + \varepsilon_1^{(n)}) - 2a_1 - a_2, & \omega_2^{(n+1)} &= \frac{a_2 - a_5^{(n)}}{r_0\sqrt{3}}, & \omega_1^{(n+1)} &= \frac{\varepsilon_{12} - \omega_2^{(n)}(1 + \varepsilon_1^{(n)})}{1 + \varepsilon_2^{(n)}}, \\ a_3^{(n+1)} &= \left(\sqrt{0.75}(1 + \varepsilon_2^{(n)}) + 1.5\omega_1^{(n)}\right)r_0, & a_4^{(n+1)} &= \left(\sqrt{0.75}(1 + \varepsilon_2^{(n)}) - 1.5\omega_1^{(n)}\right)r_0, \end{aligned}$$

причем итерации следует начинать со значений  $\varepsilon_i^{(0)} = \omega_i^{(0)} = 0$ .

После определения величин  $a_i$  координаты вершин шестиугольника на рис. 2b получаем непосредственно, а координаты остальных точек деформированной решетки находим из условий периодичности. В результате потенциал (2.1) оказывается функцией шести величин  $U = U(\varepsilon_{ij}, a_1, a_2, \varphi_0)$ , причем величины  $\varepsilon_{ij}$  считаем заданными, а величины  $a_1, a_2, \varphi_0$  находим из условий (2.8) равновесия точки  $A$ . После определения величин  $a_1, a_2, \varphi_0$  потенциал  $U$  в деформированном состоянии становится функцией трех параметров деформации  $\varepsilon_{ij}$ , т. е.  $U = U(\varepsilon_{ij})$ .

**3. Деформационные свойства решетки.** Будем рассматривать решетку как двухмерную сплошную среду, упругие свойства которой определяются потенциалом

$U = U(\varepsilon_{ij})$ . В связи с тем, что упругая энергия  $U$  отнесена к одной частице, плотность энергии  $U_*$ , отнесенная к единице площади до деформации, пропорциональна  $U$ :

$$U_* = BU. \quad (3.1)$$

В размерных переменных коэффициент пропорциональности  $B$  имеет вид

$$B = \frac{1}{2}D_1S, \quad S = \frac{3\sqrt{3}}{4}r_{0*}^2, \quad (3.2)$$

где  $S$  — площадь, приходящаяся на одну частицу до деформации,  $D_1$  и  $\rho$  — те же, что и в формуле (1.1). Множитель  $1/2$  связан с тем, что в потенциале (1.1) участвуют две частицы. Ниже нас будут интересовать относительные величины, поэтому множитель  $B$  опускаем.

Производные

$$K_{ij} = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ij}} \quad (3.3)$$

дают компоненты энергетического тензора напряжений Кирхгофа [7], а вторые производные

$$C_{ijkl} = \frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}} \quad (3.4)$$

определяют коэффициенты жесткости среды.

Для вычисления производных функции  $U(x)$  используется численное дифференцирование типа

$$\begin{aligned} \left. \frac{dU}{dx} \right|_{x=0} &= \frac{U(h) - U(-h)}{2h} + \frac{U(-2h) - 2U(-h) + 2U(h) - U(2h)}{12h}, \\ \left. \frac{d^2U}{dx^2} \right|_{x=0} &= \frac{U(h) + U(-h) - 2U(0)}{h^2} - \frac{U(-2h) - 4U(-h) + 6U(0) - 4U(h) + U(2h)}{12h^2}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

При отсутствии начальных деформаций ( $\varepsilon_{ij} = 0$ ) среда изотропна. Это подтверждается тем, что модуль Юнга  $E = 475$  и коэффициент Пуассона  $\nu = 0.241$  удалось подобрать таким образом, чтобы одновременно были выполнены соотношения

$$C_{1111} = C_{2222} = \frac{E}{1 - \nu^2} = 504, \quad C_{1122} = \frac{E\nu}{1 - \nu^2} = 122, \quad C_{1212} = \frac{E}{2(1 + \nu)} = G = 191. \quad (3.6)$$

Если в сумме (2.1) удерживать достаточно большое число слагаемых, соотношения (3.6) выполняются с высокой степенью точности (а не только с тремя десятичными знаками, которые удержаны в (3.6)). Таблица 1 иллюстрирует нарушение изотропии, если в сумме (2.1) брать  $N = 12$  или  $N = 3$  частиц, ближайших к частице  $A$ .

Таблица 1. Зависимость коэффициентов жесткости от числа учитываемых частиц

$N$	$C_{1111} = C_{2222}$	$C_{1122}$	$C_{1212}$	$E$	$\nu$	$G$
$\infty$	504	122	191	475	0.241	191
12	510	124	192	480	0.243	193
3	538	134	194	504	0.250	202

Таблица 2. Зависимость коэффициентов жесткости от начальной деформации

$\varepsilon_{11}$	$\varepsilon_{22}$	$\varepsilon_{12}$	$C_{1111}$	$C_{2222}$	$C_{1212}$	$C_{1122}$	$C_{1112}$	$C_{2212}$
0	0	0	504	504	191	122	0	0
0.1	0	0	27	415	59	26	0	0
0	0.1	0	301	42	93	46	0	0
0	0	0.1	643	535	207	193	-237	-117

В первой строке таблицы 1 повторена информация, содержащаяся в формулах (3.6). В последнем столбце таблицы 1 приведен модуль сдвига  $G$ , вычисленный по формуле  $G = E/(2(1 + \nu))$ . Для изотропного материала должно быть  $G = C_{1212}$ , что при  $N = 12$  и при  $N = 3$  не имеет места.

При наличии начальной деформации среда становится анизотропной. Степень анизотропии иллюстрируется в таблице 2 и на рис. 3.

Первая строка соответствует отсутствию начальной деформации. Сравнение второй и третьей строк говорит о том, что при наличии начальной деформации коэффициенты жесткости решетки в направлениях  $x$  и  $y$  различны.

При построении таблицы 2 и далее расчеты проводились при достаточно большом числе  $N$  удерживаемых в сумме (2.7) слагаемых. В связи с использованием численного дифференцирования значения потенциала  $U$  в (3.5) нужно знать с высокой точностью для получения нужного числа верных знаков в результате. Например, при построении области устойчивости в п. 5 для получения трех верных десятичных знаков было наложено ограничение  $\sqrt{(x_i - x_1)^2 + (y_i - y_1)^2} < 40$ , при котором сумма (2.7) содержит  $N = 6729$  слагаемых.

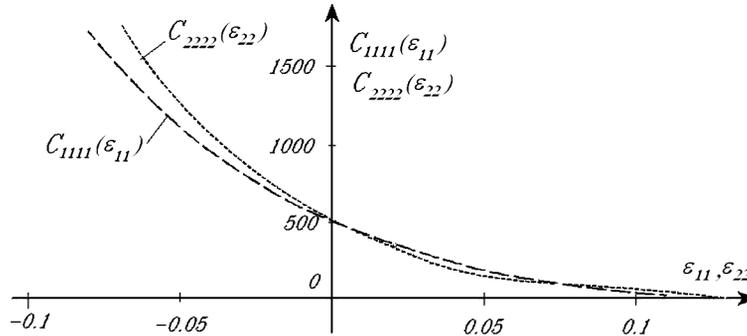


Рис. 3. Жесткости при больших деформациях.

На рис. 3 показаны зависимости жесткостей  $C_{1111}(\varepsilon_{11})$  и  $C_{2222}(\varepsilon_{22})$  в направлениях осей  $x$  и  $y$ . При сжатии  $C_{2222}$  больше, чем  $C_{1111}$ , а при растяжении знак разности  $C_{2222} - C_{1111}$  меняется. При некоторых значениях деформации коэффициенты жесткости обращаются в нуль:

$$C_{1111}(\varepsilon_{11}) = 0 \quad \text{при} \quad \varepsilon_{11} = 0.110; \quad C_{2222}(\varepsilon_{22}) = 0 \quad \text{при} \quad \varepsilon_{22} = 0.132, \quad (3.7)$$

а при дальнейшем росте деформаций становятся отрицательными, что связано с особенностями потенциала  $\Pi_0(r)$  в (1.1).

**4. Устойчивость решетки после аффинной деформации.** Рассматривается устойчивость двумерной сплошной среды, эквивалентной по упругим свойствам ре-

шетке частиц с парным потенциалом взаимодействия (1.1). Упругие свойства определяются потенциалом  $U(\varepsilon_{ij})$ . Вопрос о выходе частиц из плоскости не рассматривается.

Уравнения равновесия в проекциях на оси до деформации имеют вид [7]

$$\nabla_{\xi} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{f} = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial p_{ij}}{\partial \xi_i} + f_j = 0, \quad j = 1, 2, \quad (4.1)$$

где  $p_{ij}$  — компоненты тензора напряжений Пиолы, связанные с напряжениями Кирхгофа (3.3) формулами

$$\mathbf{P} = \mathbf{K} \cdot \mathbf{T}^T \quad \text{или} \quad p_{ij} = K_{ip} \frac{\partial x_j}{\partial \xi_p} = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ip}} \left( \delta_{jp} + \frac{\partial u_j}{\partial \xi_p} \right), \quad (4.2)$$

причем  $(\xi_1, \xi_2) = (\xi, \eta)$ ,  $(x_1, x_2) = (x, y) = (\xi_1 + u_1, \xi_2 + u_2)$ , а  $u_1, u_2$  — проекции перемещения частицы,  $\delta_{jp}$  — символ Кронекера,  $\mathbf{T}$  — градиент деформации (2.4), а верхний индекс  $T$  означает транспонирование. Через  $f_j$  в (4.1) обозначены проекции на оси интенсивности внешней нагрузки до деформации. Здесь и далее предполагается суммирование по неммым индексам.

Для исследования устойчивости среды рассмотрим уравнения в вариациях для системы (4.1), положив  $u_i = u_i^0 + v_i$ . В тензорной записи эти уравнения имеют вид [8, 9]

$$\nabla_{\xi} \left( \left( \left( \frac{\partial^2 U}{(\partial \mathbf{E})^2} \right)_0 \cdot \tilde{\mathbf{E}} \right) \cdot \mathbf{T}_0 + \left( \frac{\partial U}{\partial \mathbf{E}} \right)_0 \cdot \tilde{\mathbf{T}} \right) + \tilde{\mathbf{f}} = 0, \quad (4.3)$$

где  $\mathbf{E}$  — тензор деформации Коши—Грина, индекс 0 у производных энергии по тензору  $\mathbf{E}$  и у тензора  $\mathbf{T}$  отмечает, что величины вычисляются при  $v_i = 0$ . Вариации  $\tilde{\mathbf{E}}$  и  $\tilde{\mathbf{T}}$  тензоров  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{T}$  вычисляются по формулам

$$\tilde{\mathbf{E}} = \frac{1}{2} \left( \tilde{\mathbf{T}}^T \mathbf{T}_0 + \mathbf{T}_0^T \tilde{\mathbf{T}} \right), \quad \tilde{\mathbf{T}} = \left\{ \frac{\partial v_i}{\partial \xi_j} \right\}. \quad (4.4)$$

В качестве вариации внешней нагрузки возьмем силы инерции

$$\tilde{f}_k = -\rho_0 \frac{\partial^2 v_k}{\partial t^2}, \quad (4.5)$$

где величина  $\rho_0$  пропорциональна массе частицы. Для исследования устойчивости коэффициент пропорциональности значения не имеет.

В развернутой записи система уравнений (4.3) имеет вид

$$A_{ij}^{kl} \frac{\partial^2 v_l}{\partial \xi_i \partial \xi_j} - \frac{\partial^2 v_k}{\partial t^2} = 0, \quad k = 1, 2, \quad (4.6)$$

где  $A_{ij}^{kl}$  — акустический тензор (четвертого ранга) [9].

Имея в виду использовать динамический критерий устойчивости, рассмотрим решение системы (4.6) в виде распространяющейся волны

$$v_k = v_k^0 \exp\{i(p_1 \xi_1 + p_2 \xi_2 - \omega t)\}, \quad k = 1, 2, \quad i = \sqrt{-1}. \quad (4.7)$$

Если при некоторых волновых числах  $p_1, p_2$  величина  $\lambda = \rho_0 \omega^2$ , определяемая из уравнения

$$d(\lambda) = \begin{vmatrix} a^{11} - \lambda & a^{12} \\ a^{21} & a^{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0, \quad a^{kl} = A_{11}^{kl} p_1^2 + 2A_{12}^{kl} p_1 p_2 + A_{22}^{kl} p_2^2, \quad (4.8)$$

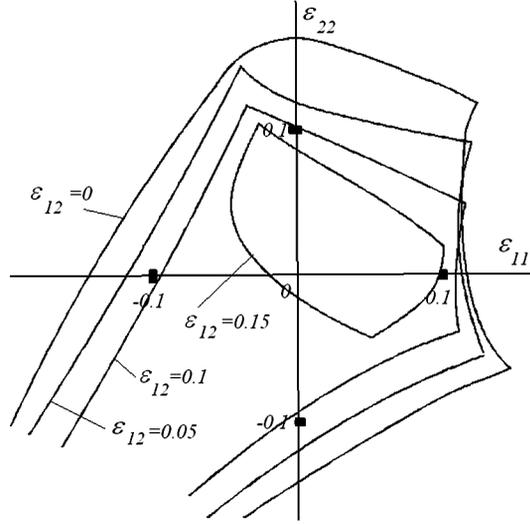


Рис. 4. Область устойчивости.

оказывается неположительной, то среда неустойчива, ибо распространение волны сопровождается ростом амплитуды. Критерием устойчивости в силу  $a^{12} = a^{21}$  является положительная определенность трех функций

$$g_1(p_1, p_2) = a^{11}, \quad g_2(p_1, p_2) = a^{22}, \quad g_3(p_1, p_2) = a^{11}a^{22} - (a^{12})^2. \quad (4.9)$$

Приведем выражения для компонентов акустического тензора, необходимых в силу (4.8) для проверки выполнения условий устойчивости (4.9):

$$\begin{aligned} A_{11}^{11} &= t_1^2 C_{1111} + 2t_1\omega_2 C_{1112} + \omega_2^2 C_{1212} + K_{11}, \\ A_{11}^{12} &= (t_1 t_2 + \omega_1 \omega_2) C_{1112} + t_1 \omega_1 C_{1111} + t_2 \omega_2 C_{1212}, \\ A_{12}^{11} &= t_1^2 C_{1112} + t_1 \omega_2 (C_{1122} + C_{1212}) + \omega_2^2 C_{2212} + K_{12}, \\ A_{12}^{12} &= (t_1 t_2 + \omega_1 \omega_2) (C_{1122} + C_{1212}) / 2 + t_1 \omega_1 C_{1112} + t_2 \omega_2 C_{2212}, \\ A_{22}^{11} &= t_1^2 C_{1212} + 2t_1 \omega_2 C_{2212} + \omega_2^2 C_{2222} + K_{22}, \\ A_{22}^{12} &= (t_1 t_2 + \omega_1 \omega_2) C_{2212} + t_1 \omega_1 C_{1212} + t_2 \omega_2 C_{2222}, \\ A_{11}^{22} &= t_2^2 C_{1212} + 2t_2 \omega_1 C_{1112} + \omega_1^2 C_{1111} + K_{11}, \\ A_{12}^{22} &= t_2^2 C_{2212} + t_2 \omega_1 (C_{1122} + C_{1212}) + \omega_1^2 C_{1112} + K_{12}, \\ A_{22}^{22} &= t_2^2 C_{2222} + 2t_2 \omega_1 C_{2212} + \omega_1^2 C_{1212} + K_{22}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

Здесь для краткости введены обозначения  $t_1 = 1 + \varepsilon_1$ ,  $t_2 = 1 + \varepsilon_2$ .

**5. Область устойчивости.** В пространстве деформаций  $\varepsilon_{11}$ ,  $\varepsilon_{22}$ ,  $\varepsilon_{12}$  область устойчивости симметрична относительно плоскости  $\varepsilon_{12} = 0$ . Приведем сначала размеры этой области:

$$\begin{aligned} -0.143 < \varepsilon_{11} < 0.118 & \text{ при } \varepsilon_{22} = \varepsilon_{12} = 0, \\ -0.140 < \varepsilon_{22} < 0.152 & \text{ при } \varepsilon_{11} = \varepsilon_{12} = 0, \\ -0.154 < \varepsilon_{12} < 0.154 & \text{ при } \varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = 0, \end{aligned} \quad (5.1)$$

В частности, сравнение со значениями (3.7) показывает, что положительная определенность матрицы  $\partial^2 \mathbf{U} / \partial \mathbf{E}^2 = \{C_{ijkl}\}$  не может служить критерием устойчивости, ибо нарушение ее положительной определенности может предшествовать потере устойчивости.

На рис. 4 представлены сечения области устойчивости четырьмя плоскостями  $\varepsilon_{12} = 0$ ,  $\varepsilon_{12} = 0.05$ ,  $\varepsilon_{12} = 0.1$  и  $\varepsilon_{12} = 0.15$ . Последнее значение  $\varepsilon_{12}$  близко к максимально возможному значению  $\varepsilon_{12} = 0.154$ .

Границы области устойчивости определяют линии, на которых нарушается положительная определенность хотя бы одной из функций (4.9). Угловые точки линий на рис. 4 связаны с тем, что в этих точках положительная определенность нарушается сразу для двух функций (4.9).

При  $\varepsilon_{12} = 0$  граничной точкой области устойчивости является, по-видимому, точка  $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = -0.5$ , соответствующая неограниченному сближению частиц. Однако в связи с потерей точности приблизиться к этой точке не удалось.

Авторы благодарят Е. А. Иванову, А. М. Кривцова и Н. Ф. Морозова за весьма полезное обсуждение представленных здесь результатов.

## Литература

1. *Иванова Е. А., Кривцов А. М., Морозов Н. Ф., Фирсова А. Д.* Теоретическая механика. Описание механических свойств кристаллических твердых тел на микро- и макроуровне. СПб.: Изд-во СПбГТУ. 2003. 32 с.
2. *Иванова Е. А., Кривцов А. М., Морозов Н. Ф.* Получение макроскопических соотношений упругости сложных кристаллических решеток с учетом моментных взаимодействий на микроуровне // Прикл. матем. и механ. 2007. Т. 71. Вып. 4. С. 595–615.
3. *Бызов А. П., Иванова Е. А.* Математическое моделирование моментных взаимодействий частиц с вращательными степенями свободы // Научно-технические ведомости СПбГПУ. 2007. № 2. С. 260–268.
4. *Беринский И. Е., Иванова Е. А., Кривцов А. М., Морозов Н. Ф.* Применение моментного взаимодействия к построению устойчивой модели кристаллической решетки графита // Изв. РАН, МТТ. 2007. № 5. С. 6–16.
5. *Кривцов А. М.* Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. 304 с.
6. *Ivanova E. A., Krivtsov A. M., Zhilin P. A.* Description of rotational molecular spectra by means of an approach based on rational mechanics // ZAMM. Z Angew. Math. Mech. 2007. Vol. 87, № 2. P. 139–149.
7. *Кошелев А. И., Нарбут М. А.* Лекции по механике деформируемого твердого тела. СПб.: Изд-во С.-Петербург. ун-та, 2003. 276 с.
8. *Елисеев В. В.* Механика упругих тел. СПб.: Изд-во СПбГТУ, 1999. 340 с.
9. *Лурье А. И.* Нелинейная теория упругости. М.: Наука, 1980. 512 с.

Статья поступила в редакцию 19 марта 2009 г.