УДК 539.3

Г. И. МИХАСЕВ, М. Г. БОТОГОВА, Е. С. ФИЛОНЧИК

ОЦЕНКА ОСЕСИММЕТРИЧНОГО НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ, ВНЕДРЕННОЙ В НЕОДНОРОДНУЮ УПРУГУЮ СРЕДУ, ОСНОВАННАЯ НА НЕЛОКАЛЬНОЙ ТЕОРИИ ОРТОТРОПНЫХ ОБОЛОЧЕК

Рассмотрена одностенная углеродная нанотрубка, находящаяся в неоднородной упругой среде, свойства которой изменяются вдоль оси трубки. Трубка находится под действием постоянной осевой силы и испытывает нормальное внешнее давление, зависящее от осевой координаты. Углеродная нанотрубка представляется тонкой ортотропной цилиндрической оболочкой, уравнения для которой записываются с учетом нелокальной континуальной теории Эрингена. Реакция неоднородной упругой среды учитывается в рамках винклеровского основания с коэффициентом постели, зависящим от осевой координаты. Было установлено, что при сжатии трубки осевой силой наибольшее отклонение атомов от исходного положения имеет место в окрестности параллели, на которой реакция окружающей матрицы наиболее слабая.

Ключевые слова: углеродная нанотрубка (УНТ); винклеровское основание; нелокальная континуальная теория Эрингена; основное напряженно-деформированное состояние в УНТ; краевой эффект; параметр нелокальности.

The estimation of membrane stresses in a single-walled carbon nanotube embedded in a nonhomogeneous elastic matrix is performed. The surrounding elastic medium is modeled as Winkler's foundation with a variable spring constant depending on the axial coordinate. The carbon nanotube is represented by a thin orthotropic cylindrical shell, the constitutive equations being written with the use of Eringen's non-local theory of elasticity. The tube is subjected to external normal pressure and axial forces. The axisymmetric strain-stress state is found as the superposition of a membrane stress state and an edge effect generated by the parameter of non-locality.

Key words: carbon nanotube; Winkler's foundation; Eringen's non-local theory of elasticity; membrane stress state; edge effect; parameter of non-locality.

Широкое использование углеродных нанотрубок (УНТ) в качестве армирующих элементов или наполнителей при создании композиционных материалов [1] делает актуальной задачу расчета напряжений, возникающих в трубке под действием внешних сил. Достоверная оценка начальных напряжений в УНТ с учетом особенностей (неоднородностей) в структуре матрицы необходима для решения и других задач, имеющих самостоятельный научный и прикладной интерес: определение прочностных характеристик самой трубки, нахождение критических усилий, приводящих к потере устойчивости в матрице [2, 3], исследование динамических характеристик (собственных частот и форм колебаний) с учетом взаимодействия атомов УНТ и окружающей упругой среды [4]. Например, в работе [4] показано, что наличие ослабляющих включений (молекул инородного вещества) в упругой матрице может порождать аномальные собственные формы колебаний трубки. Данные формы, характеризующиеся сильной локализацией в окрестности некоторой «слабой» линии, возникают при действии растягивающих осевых сил и не свойственны макроразмерным оболочкам [5], контактирующим с упругой средой. Как показано в [4], обнаружение данных мод стало возможным благодаря учету нелокальных эффектов в законе физического состояния [6, 7].

Постановка задачи. Разрешающие уравнения

Рассмотрим одностенную углеродную нанотрубку (УНТ) длиной L и радиусом R, находящуюся в неоднородной упругой среде, свойства которой изменяются вдоль ее оси. Трубка находится под действием постоянной осевой силы T_1° и испытывает нормальное внешнее давление $q_3(x)$, зависящее от осевой координаты x.

В работе [8] показано, что независимо от хиральности одностенная УНТ может быть представлена ортотропной упругой оболочкой с погрешностью порядка $O\left[\left(a/R\right)^2\right]$, где $a \approx 0{,}142$ нм – характерный внутренний размер решетки. Следуя [8, 9], далее будем моделировать УНТ упругой ортотропной цилиндрической оболочкой, имеющей эффективную толщину h с упругими параметрами E_i, ν_i, G, где E_1, E_2 – модули Юнга в направлениях осевой и окружной координат x и φ соответственно, ν_1, ν_2 – коэффициенты Пуассона, характеризующие поперечное сокращение (растяжение) при растяжении (сжатии) в направлениях x и φ соответственно, а G – модуль сдвига. В силу симметрии имеем $E_2\nu_1 = E_1\nu_2$. Соотношения для вычисления упругих параметров в зависимости от диаметра и хиральности трубки представлены в [9].

Реакцию неоднородной упругой среды будем учитывать в рамках винклеровского основания [4] с коэффициентом постели $c_3(x)$. Безмоментные уравнения равновесия УНТ с учетом сил реакции упругой матрицы получаются из общих уравнений равновесия, выведенных в статье [10]. Для случая осесимметричного деформированного состояния они принимают простой вид:

$$\frac{\partial^2 M_1}{\partial x^2} + \frac{T_2}{R} - c_3^* u_3 - q_3^* = 0, \; \frac{\partial T_1}{\partial x} = 0, \tag{1}$$

где T_1, T_2 – *микроскопические* мембранные усилия, возникающие в осевом и окружном направлениях соответственно; $u_3(x)$ – нормальный прогиб трубки, моделирующий отклонение атомов от нейтрального положения.

Ставя граничные условия $T_1 = T_1^\circ$ на краях трубки $x = 0, L$, находим, что мембранное усилие $T_1 = T_1^\circ$ – постоянная величина в любом ее сечении.

Введем в рассмотрение макроскопические (классические) мембранные усилия $T_1^{(m)}$, $T_2^{(m)}$, соответствующие микроскопическим напряжениям T_1, T_2. Согласно нелокальной континуальной теории Эрингена [7] данные напряжения связаны соотношениями

$$\Im\left(T_1, T_2\right) = \left(T_1^{(m)}, T_2^{(m)}\right), \tag{2}$$

где $\Im$ – дифференциальный оператор, который в случае осесимметричного напряженно-деформированного состояния имеет вид

$$\Im = 1 - \left(e_0 a\right)^2 \frac{d^2}{dx^2}, \tag{3}$$

где a – ранее введенные внутренний характерный размер решетки УНТ, а e_0 – материальная константа нелокальности. Согласно Эрингену e_0 = 0,39. Однако Л. Судак [11] полагает, что данный параметр должен быть на порядок больше.

Уравнения физического состояния для макроскопической ортотропной цилиндрической оболочки имеют вид [12]

$$T_1^{(m)} = \frac{hE_1}{1-\nu_1\nu_2}\left(\frac{\partial u_1}{\partial x} - \frac{\nu_2}{R}u_3\right), \; T_2^{(m)} = \frac{hE_2}{1-\nu_1\nu_2}\left(\nu_1\frac{\partial u_1}{\partial x} - \frac{u_3}{R}\right), \tag{4}$$

$$M_1^{(m)} = \frac{-h^3 E_1}{12\left(1-\nu_1\nu_2\right)}\frac{\partial^2 u_3}{\partial x^2},$$

где u_1 – тангенциальные перемещения точек нейтральной поверхности трубки.

Замечание. Нелокальный закон физического состояния (2) – (4) в дифференциальной форме не учитывает реальные размеры (наличие краев) нанотрубки, а позволяет принять во внимание лишь деформации в окрестности точки, в которой находятся напряжения и которая удалена от ее краев.

Учитывая то, что $T_1 = T_1^\circ$ – константа, из первого уравнения (4) находим

$$\frac{\partial u_1}{\partial x} = \frac{1-\nu_1\nu_2}{hE_1}T_1^\circ + \frac{\nu_2}{R}u_3. \tag{5}$$

Введем следующие обозначения:

$$u_1 = RU, \; u_3 = RW, \; x = Rs, \; \mu = \frac{a}{R}, \; \mu_1^4 = \frac{h^2}{12R^2}, \; \mu_1 = \mu\kappa, \; \kappa \cong 1, \tag{6}$$

$$c_3^* = \frac{hE_1}{R^2\left(1-\nu_1\nu_2\right)}c_3, \; c_3 \cong 1, \; q_3^* = \frac{hE_1}{R\left(1-\nu_1\nu_2\right)}q.$$

Подставляя (4) – (6) в первое уравнение (1), приходим к неоднородному дифференциальному уравнению относительно безразмерного радиального перемещения W:

$$\mu^4\kappa^4\frac{d^4W}{ds^4}+\in\left[W-\nu_1\left(t_1^\circ+\nu_2W\right)\right]+\Xi_e\left[c_3W+q\right]=0, \tag{7}$$

где $\Xi_e=1-\mu^2e_0^2\,d^2/ds^2$, $\in=E_1/E_2$, $t_1^\circ=\left(1-\nu_1\nu_2\right)T_1^\circ/\left(hE_1\right)$ – безразмерная осевая сила.

Заметим, что при R = 0,75 нм величину $\mu=a/R$ можно рассматривать как малый параметр [4]. Таким образом, уравнение (7) есть сингулярно возмущенное дифференциальное уравнение с переменными коэффициентами. Его решение будем искать в виде суперпозиции

$$W=w_0(s)+w_{\text{кр}}(s),$$

где $w_0(s)$ – медленная функция переменной s, описывающая основное напряженно-деформированное состояние в УНТ; а $w_{\text{кр}}(s)$ – интегралы краевого эффекта – функции, быстро затухающие при удалении от краев трубки. Заметим, что данные интегралы не имеют ничего общего с интегралами краевого эффекта, возникающими в макроскопической оболочке и описывающими чисто моментное напряженно-деформированное состояние [13]. Функция $w_{\text{кр}}(s)$ порождается исключительно учетом наноразмерного масштаба (константы e_0 в нелокальном законе физического состояния Эрингена).

Функцию $w_0(s)$ будем искать в виде ряда

$$w_0(s)=w_{00}(s)+\mu^2w_{02}(s)+\ldots\,. \tag{8}$$

Подставляя ряд (8) в уравнение (7) и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях μ, находим

$$w_{00}=\frac{\in\nu_1t_1^\circ-q}{\in\left(1-\nu_1\nu_2\right)+c_3}, \tag{9}$$

$$w_{02}=\frac{1}{\in\left(1-\nu_1\nu_2\right)+c_3}\left[e_0^2q''+e_0^2c_3''\;w_{00}+2e_0^2c_3'w_{00}'+e_0^2c_3w_{00}''\right]. \tag{10}$$

Штрих в (10) и ниже означает дифференцирование по координате s.

Интегралы краевого эффекта будем искать в виде

$$w_{\text{кр}}=\sum_{k=0}^{\infty}\mu^kw_k^{\text{кр}}(s)e^{\frac{1}{\mu}\int\lambda(s)ds}. \tag{11}$$

Подставляя (11) в (7) и приравнивая коэффициенты при степени μ^0, получим уравнение

$$\kappa^4\lambda^4-e_0^2c_3(s)\lambda^2+\left(\varepsilon+c_3(s)\right)=0, \tag{12}$$

где $\varepsilon=\in\left(1-\nu_1\nu_2\right)$.

Приравнивая коэффициенты при μ^1, получим дифференциальное уравнение

$$\left(4\kappa^4\lambda^3-2\lambda e_0^2c_3(s)\right)\frac{dw_0^{\text{кр}}}{ds}=\left(2\lambda e_0^2c_3'(s)-6\kappa^4\lambda'\lambda^2+c_3e_0^2\lambda'\right)w_0^{\text{кр}},$$

из которого определяем

$$w_0^{\text{кр}}(s)=Ce^{\frac{-e_0^2}{2}\int\frac{c_3'ds}{e_0^2c_3-2\kappa^4\lambda^2}}\Big/\sqrt{\left|\lambda\left(e_0^2c_3-2\kappa^4\lambda^2\right)\right|}. \tag{13}$$

Пусть выполняется условие $e_0^4c_3^2-4\kappa^4\left(\varepsilon+c_3\right)\le 0$. Данное неравенство соответствует тому случаю, когда жесткость УНТ больше жесткости матрицы, в которой она находится. Тогда все корни уравнения (12) будут комплексными:

$$\lambda_1=b_1(s)+ib_2(s);\ \lambda_2=b_1(s)-ib_2(s);\ \lambda_3=-b_1(s)+ib_2(s);\ \lambda_4=-b_1(s)-ib_2(s),$$

$$b_1(s)=\sqrt{\frac{e_0^2c_3+\kappa^2\sqrt{\in+c_3}}{2\kappa^4}},\ b_2(s)=\sqrt{\frac{-e_0^2c_3+\kappa^2\sqrt{\in+c_3}}{2\kappa^4}}.$$

С учетом (8), (13) функция W в первом приближении имеет вид

$$W=w_{00}(s)+\frac{1}{\sqrt[4]{d_1(s)d_2^2(s)}}e^{\frac{1}{\mu}\int_l^s b_1(x)dx}\left(C_1e^{i\frac{e_0^2}{2}\int_l^s c_3'(x)/d_1(x)dx}+C_2e^{-i\frac{e_0^2}{2}\int_l^s c_3'(x)/d_1(x)dx}+o(\mu)\right)+$$

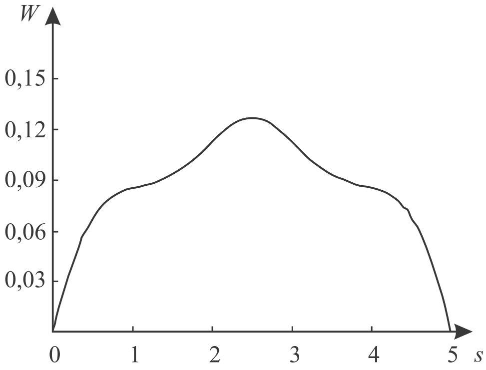
$$+\frac{1}{\sqrt[4]{d_1(s)d_2^2(s)}} e^{\frac{-1}{\mu}\int_0^s b_1(x)dx}\left(C_3 e^{i\frac{e_0^2}{2}\int_0^s c_3'(x)/d_1(x)dx} + C_4 e^{-i\frac{e_0^2}{2}\int_0^s c_3'(x)/d_1(x)dx} + o(\mu)\right),$$

где $d_1(s) = -\left(e_0^4 c_3^2 - 4\kappa^4\left(\varepsilon + c_3\right)\right)$; $d_2(s) = \sqrt{\in + c_3}\,/\,\kappa^2$, а константы C_1, C_2, C_3, C_4 определяются из граничных условий.

Пример. Рассмотрим шарнирно-опертую одностенную углеродную нанотрубку. Граничные условия в данном случае записываются в виде

$$W = W'' = 0 \text{ при } s = 0,\ l.$$

Были выполнены расчеты для следующих параметров [4, 9]: $E_1 = E_2 = E = 1{,}058$ ТПа, $\nu_1 = \nu_2 = \nu = 0{,}270$, $h = 0{,}31$ нм, $R = 1{,}5$ нм, $a = 0{,}142$ нм, $e_0 = 0{,}39$, $l = 5$, $c_3 = 1 - \beta e^{-\alpha s^2}$, $\beta = 0{,}5$, $\alpha = 1$, $t_1^\circ = 1$, $q = 0$. Распределение безразмерного прогиба W нанотрубки (отклонение атомов от исходного положения) вдоль осевой координаты представлено на рисунке.



Зависимость прогиба W от координаты s

Как видно, при сжатии трубки осевой силой T_1° наибольшее отклонение атомов от исходного положения имеет место в окрестности параллели, на которой реакция окружающей матрицы является наиболее слабой. Данное обстоятельство необходимо учитывать при дальнейшем исследовании потери устойчивости сжимаемой осевыми силами УНТ, находящейся в неоднородной упругой среде.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Baughman R. H., Zakhidov A. A., der Heer W. A. Carbon nanotubes – route toward application // Science. 2002. Vol. 297. P. 787–792.

2. Murmu T., Pradhan S. C. Buckling analysis of a single-walled carbon nanotube embedded in an elastic medium based on nonlocal elasticity and Timoshenko beam theory and using DQM // Physica E. 2009. Vol. 41. P. 1232–1239.

3. Ghorbanpour Arani A., Kolahchi R., Khoddami Maraghi Z. Nonlinear vibration and instability of embedded double-walled boron nitride nanotubes based on nonlocal cylindrical shell theory // Appl. Math. Modelling. 2013. Vol. 37. P. 7685–7707.

4. Mikhasev G. I. On localized modes of free vibrations of single-walled carbon nanotubes embedded in nonhomogeneous elastic medium // Z. Angew. Math. Mech. 2014. Vol. 94 (1/2). P. 130–141.

5. Михасев Г. И., Товстик П. Е. Локализованные колебания и волны в тонких оболочках. М., 2009.

6. Eringen A. C. On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves // J. Appl. Phys. 1983. Vol. 54. P. 4703–4710.

7. Eringen A. C. Nonlocal Continuum Field Theories. New York, 2002.

8. Peng J., Wu J., Hwang K. C., Song J., Huang Y. Can a single-wall carbon nanotube be modeled as a thin shell? // J. Mech. Phys. Solids. 2008. Vol. 56. P. 2213–2224.

9. Chang T. A molecular based anisotropic shell model for single-walled carbon nanotubes // J. Mech. Phys. Solids. 2010. Vol. 58. P. 1422–1433.

10. Михасев Г. И. Уравнения движения многостенной углеродной нанотрубки, основанные на нелокальной теории ортотропных оболочек // Докл. НАН Беларуси. 2011. Т. 55 (6). С. 119–123.

11. Sudak L. J. Column buckling of multiwalled carbon nanotubes using nonlocal continuum mechanics // J. Appl. Phys. 2003. Vol. 94 (11). P. 7281–7287.

12. Амбарцумян С. А. Общая теория анизотропных оболочек. М., 1974.

13. Гольденвейзер А. Л. Теория упругих тонких оболочек. М., 1976.

Поступила в редакцию 16.09.2014.

Геннадий Иванович Михасев – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой био- и наномеханики.

Марина Георгиевна Ботогова – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры био- и наномеханики.

Евгений Сергеевич Филончик – студент 5-го курса механико-математического факультета.