

УПРУГИЕ СВОЙСТВА ПЛОСКИХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПРУЖИН

В. А. Кельин

В природе существует довольно много химических соединений, представляющих длинные молекулярные цепочки. Это, например: полимеры, биологические молекулы типа ДНК, РНК. Часть из них имеет плоскую зигзагообразную (Рис. 1.) форму. Типичная структура: парафин[1, с. 61].

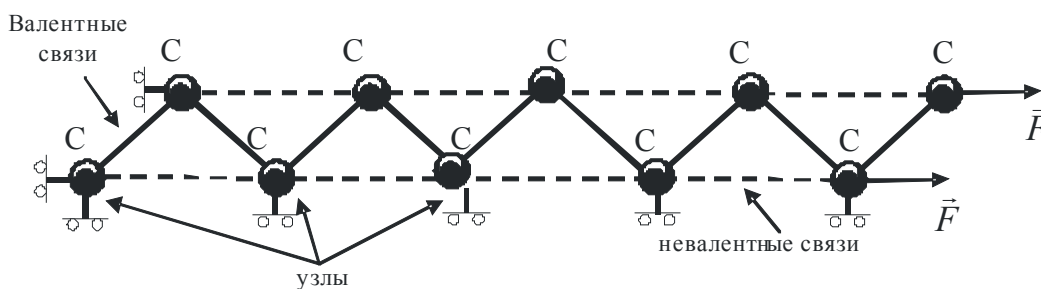


Рис. 1. Плоская зигзагообразная молекула, схема нагружения

Представляет интерес определить упругие свойства такой структуры в связи с тем, что она может иметь большую длину и быть вдоль этого направления «компактной», но поперечный размер остается в наномасштабе.

Ставится задача, проведя аналогию со стержнем, определить смещение атомов и по ним рассчитать модуль Юнга как коэффициент пропорциональности между продольным смещением последнего атома и приложенной силой, и коэффициент Пуассона, как отношение относительной поперечной деформации к продольной.

Проводилось дискретное моделирование в рамках МКЭ с использованием элементов в виде упругого отрезка (его матрица жесткости приведена в [2]), что соответствует приближению поля центральных сил (ПЦС). Учитывались валентные связи и самые короткие из невалентных. На Рис. 2. показана сетка, соответствующая дискретной системе и нумерация элементов и степеней свободы (в скобках).

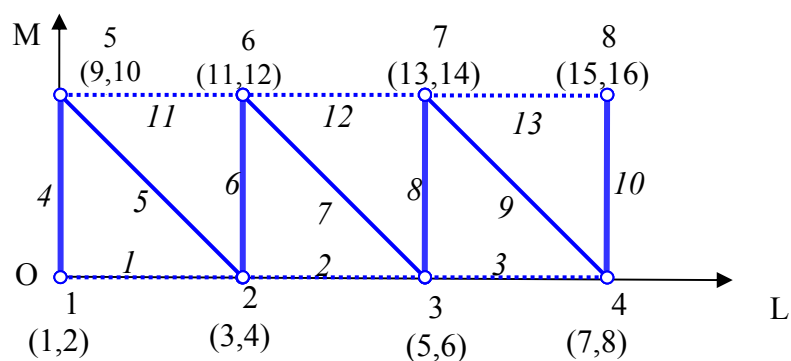


Рис. 2. Молекула в целочисленных координатах

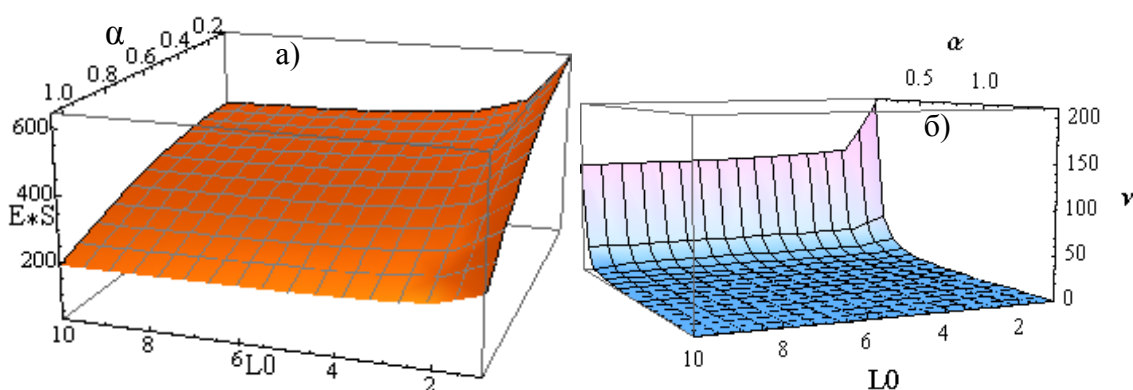


Рис. 3. Графики зависимостей модуля Юнга: а) и коэффициента Пуассона б) от угла α и длины молекулы L_0 .

Результаты расчетов показаны на Рис. 3. а), б); вдоль горизонтальных осей откладывается значение угла α и длина цепочки. Из графика а) видно, что модуль Юнга изменяется в 3,3 раза. Причем более существенна зависимость от угла α . Чтобы понять причину этого, выпишем и проанализируем аналитическое решение для ячейки минимальной длины, состоящей из 4-х атомов:

$$E = \frac{8l_0 \cos \alpha}{S \left(\frac{1}{k_2} + \frac{2}{k_1 \cos^2 \alpha + 2k_2} \right)}. \quad (1.1)$$

Отсюда видно, что скобка, стоящая в знаменателе изменяется мало, и, следовательно, значения модуля определяются функцией $\cos \alpha$ на интервале $(0; \pi/3)$. Такой интервал выбран из условия, что длина невалентной связи всегда больше, чем длина валентной. На Рис. 4. а) приведен график функции (1.1).

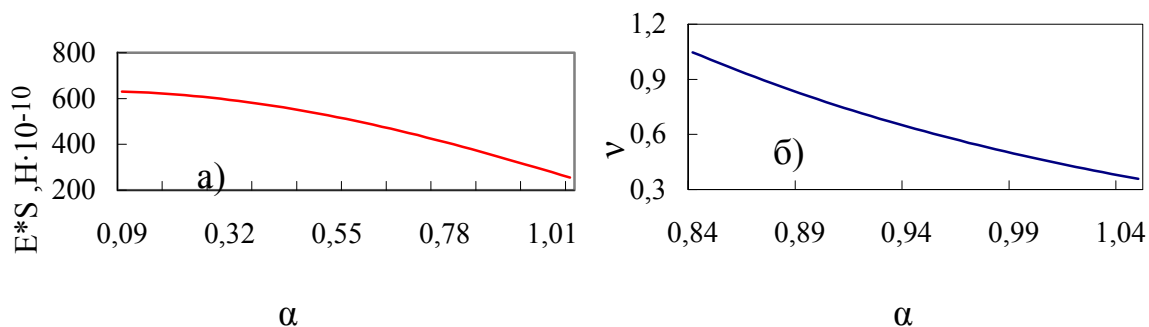


Рис. 4. Зависимость модуля Юнга а) и коэффициента Пуассона б) от угла для ячейки

Аналогично, формула для коэффициента Пуассона имеет вид:

$$\nu = \frac{2 \cos^2 \alpha}{\sin^2 \alpha} \cdot \frac{\left(1 + \frac{k_2}{k_1 \cos^2 \alpha}\right)}{\left(1 + \frac{4k_2}{k_1 \cos^2 \alpha}\right)}. \quad (1.2)$$

Главную зависимость от α , очевидно, дает функция $\sin^2 \alpha$, стоящая в знаменателе, поэтому при очень малых углах коэффициент Пуассона неограниченно возрастает, отсюда можно сделать вывод, что, скорее всего, в этом проявляется ограниченная применимость самого простого приближения – приближения ПЦС. На Рис. 4. б) изображен график функции (1.2) на интервале $48^\circ < \alpha < 60^\circ$, где коэффициент Пуассона принимает “приемлемые” значения.

Литература

1. *Китайгородский А. И.* Молекулярные кристаллы. М., 1971.
2. *Репченков В. И., Нагорный Ю. Е.* Линейная упругость молекулярных и наноразмерных систем: учеб.-метод. пособие для студентов мех.-мат. фак. спец. 1-31 03 02 «Механика». В 3 ч. Ч. 2 / БГУ, Минск. 2010.

ВЛИЯНИЕ ВНУТРЕННЕЙ СТРУКТУРЫ МАТЕРИАЛА НА НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ

Т. А. Макаева

ВВЕДЕНИЕ

Исследования последних лет убедительно показали, что при деформировании объектов сложного внутреннего строения существенную роль играют локальные деформации, обусловленные относительными перемещениями и деформациями его структурных составляющих. Оче-