

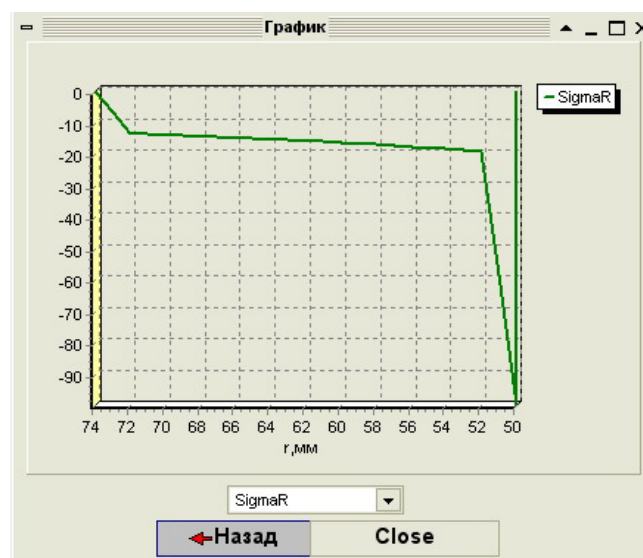


Рисунок 2 – Зависимость $\sigma_r^{(k)}$ от r

Литература

1. Xia M., Kemmochi K., Takayanagi H. *Analysis of filament-wound fiber-reinforced sandwich pipe under combined internal pressure and thermomechanical loading* // Comp. Structures. – 2001. – № 51. – P 273 – 283.
2. Можаровский В. В., Марьин С. А., Марьина Н. А. *Напряженно-деформированное состояние слоистых цилиндрических труб* // Вестник ХНТУ. – 2008, № 2 (31). – С.304 – 309.

ВЛИЯНИЕ НЕВАЛЕНТНЫХ СВЯЗЕЙ НА УПРУГИЕ ПАРАМЕТРЫ ГРАФЕНА

Нагорный Ю. Е., Репченко В. И.

Белорусский государственный университет, Минск, проспект Независимости, 4

Nagorny.yury@gmail.com

Введение. Расширение сферы применения наноразмерных структур в науке, технике, промышленности вызвало появление новой отрасли знаний – наноматериаловедения. Использование наночастиц в качестве элементов конструкций и устройств, армирующих добавок в композиционных материалах естественно подразумевает знание их механических свойств. Наиболее простой регулярной структурой, на примере которой могут быть отслежены многие закономерности механического поведения наноразмерных систем связанных атомов является графен. На сегодняшний день, несмотря на значительное число теоретических и экспериментальных работ, посвященных исследованию механического поведения графена приходится констатировать, что пока получена лишь самая общая информация [1]. Фактически, определены лишь упругие параметры, характеризующие растяжение-сжатие. Теоретические исследования ведутся в приближении поля центральных сил (ПЦС) или валентно-силового поля (ВСП), где учитываются силы воздействия на атом лишь ближайших соседей. Однако анализ простейших одномерных задач показыва-

ет, что учет воздействия на атом только ближайших соседей недостаточен, так как погрешность в этом случае может достигать десятков процентов [2]. Такие же оценки приводятся в теории колебательных спектров молекул, где были разработаны модели ПЦС и ВСП [3].

Таким образом, актуальной является задача повышения точности определения упругих параметров графена путем перехода к использованию все более точных моделей, учитывающих силы, с которыми на атом действуют его более удаленные соседи. В связи с этим естественно перейти от симметричного структурного элемента, включающего четыре атома (центральный и три соседних с ним), к элементу с десятью атомами (центральный и его ближайшее окружение).

Необходимо заметить также, что выделение отдельных механизмов силового воздействия атомов друг на друга является довольно грубым приближением. Функция реальной потенциальной энергии ядер в атомной системе не является аддитивной. Однако при решении практических задач, как правило, используются так называемые парные потенциалы, упрощающие расчеты. Все сказанное выше справедливо и для графена. В положении равновесия функция потенциальной энергии при достаточно малых смещениях q_i может быть разложена в ряд Тейлора:

$$U_{\{q_k\}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 U}{\partial q_i \partial q_j} q_i q_j \quad (1)$$

Каждому слагаемому или совокупности слагаемых, как показано в теории молекулярных спектров, могут быть поставлены в соответствие механические модели [2, 4]. Простейшими являются упругий отрезок, который применяется для описания валентной связи, и упругий угол определяющий взаимодействие направленных валентностей. С точки зрения классической механики в системе материальных точек, моделирующей ядра многоатомной структуры, валентные связи ничем не выделены, а значит, и другие связи можно в рамках приближения (1) моделировать простейшими моделями. Конечно, такие связи гораздо слабее, поскольку интенсивность взаимодействия между атомами главным образом определяется расстоянием. Однако в совокупности оказываемое этими силами влияние на интегральные механические свойства может быть существенно [2].

Рассмотрим парные взаимодействия в десятиатомном элементе. Отрезков, соединяющих атомы в нем, насчитывается 45, причем можно выделить 6 типов, которые отличаются длинами. Самые короткие, соответствуют валентным связям и имеют обозначение тип 1. Отличие размеров невалентных связей относительно невелико. Это позволяет предположить, что их жесткости сравнимы по величине. Далее при вычислениях они варьируются в пределах от 0 до 10 Дж/м², что составляет примерно 1.5 % от значения 652,13 Дж/м² для силовой постоянной валентного отрезка (С-С связь) [5]. Предположение о пределах изменения жесткостей дополнительных связей подтверждается анализом табличных данных по силовым постоянным молекул, сравнимых по

размерам и числу атомов с рассматриваемым десятиатомным фрагментом графена, в частности молекулы бензола [6]. В данной работе также используется значение $8,76 \cdot 10^{-19}$ Дж/рад² для жесткости валентного угла [5].

Виртуальные испытания. Испытаниям подвергалась прямоугольная пластинка размером 8×9 шестиугольных ячеек. За основу взята силовая модель графена в приближении ВСП для четырехатомного фрагмента. В нее поочередно включались дополнительные упругие отрезки (это возможно в силу аддитивности гармонического потенциала). В качестве схемы нагружения было выбрано одноосное растяжение вдоль направления “зигзаг”. При вычислении коэффициента Пуассона в качестве толщины пластины графена принималось $h=0.34$ нм – межслоевое расстояние в решетке графита. Математическая модель реализована в пакете «Mathematica 8.0».

Из результатов расчетов видно, что максимальное изменение модуля Юнга при включении дополнительной связи может составлять от ~ 7 %, для самого короткого дополнительного упругого отрезка (тип 2), до ~ 25 % в случае включения отрезка с самой большой длиной (тип 6). Связи второго и третьего типа оказывают почти одинаковое воздействие на величину модуля Юнга. Также наблюдается то, что с ростом длины элемента возрастает и его влияние на упругий модуль, при том же значении жесткости. Когда одновременно включаются все новые элементы, их совокупное воздействие приводит к приросту модуля на ~ 73 %. Отметим и близкую к линейной зависимость всех поправок.

Коэффициент Пуассона при учете дополнительных линейных связей изменяется незначительно. Самое малое приращение, всего на 1 %, наблюдается, как и для модуля Юнга, при включении самого короткого элемента. Максимальное же изменение, порядка 5 %, на этот раз дает уже элемент четвертого типа. В тоже время, отрезок, который давал максимальное увеличение модуля Юнга, занимает только третье место по вкладу в рост коэффициента Пуассона. Кроме того, наблюдается ситуация, когда введение элемента не только не увеличивает коэффициент поперечного сжатия, а наоборот приводит к его уменьшению. Это имеет место при включении в схему расчета элемента третьего типа. Одновременное же воздействие всех упругих отрезков приводит росту коэффициента Пуассона только на 9 %. Это заметно меньше, чем изменение модуля Юнга.

Подытоживая все сказанное, приходим к выводу, что экспериментально полученное высокое значение для модуля Юнга нанотрубок равное 3,5 ТПа [7] теоретически вполне допустимо, поскольку валентные связи и межатомные взаимодействия в пределах десятиатомного фрагмента в сумме дают примерно такое же значение.

Литература

1. Елецкий А. В. *Механические свойства углеродных наноструктур и материалов на их основе* / А. В. Елецкий. // Усп. физ. наук. – 2007. – Т. 177, №3. – С. 107 – 112.
2. Zhuravkov M. A. *Finite element modeling of nanoscale structures* / M. A. Zhuravkov, Yu. E. Nagornyi, V. I. Repchenkov // Nanotechnologies in Russia – 2011. – Vol. 6, No. 9 – 10. – P. 597 – 606.

3. Коптев Г. С. *Расчет колебаний молекул* / Г. С. Коптев, Ю. А. Пентин. М.: Изд-во Моск. Ун-та, 1977. – 207 с.
4. Грибов Л. А. *Колебания молекул* / Л. А. Грибов. – М.: Книжный дом «Либриком», 2009. – 544 с.
5. Li C. *A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes* / C. Li, T. – W. Chou // Int J. Solids Struct. – 2003. – V. 40. – P. 2487 – 2499.
6. Грибов Л. А. *Введение в молекулярную спектроскопию* // Л. А. Грибов. – М.: Наука, 1976. – 400 с.
7. Enomoto K. *Measurement of young's modulus of carbon nanotubes by nanoprobe manipulation in a transmission electron microscope* / K. Enomoto, S. Kitakata et al. // Applied Physics Letters. – 2006. – Vol. 88, No. 15. – P. 153115.

О ЧИСЛЕННОМ РЕШЕНИИ ЗАДАЧИ О БИФУРКАЦИИ ТОНКОЙ ГОФРИРОВАННОЙ ОБОЛОЧКИ С УПРУГИМ ЗАПОЛНИТЕЛЕМ ПОД ДЕЙСТВИЕМ НЕОДНОРОДНОГО ГИДРОСТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ

Никонова Т. В.

УО «Витебский государственный технологический университет»
Московский пр-т, 72, 210035, г. Витебск, Беларусь
st.rubon@mail.ru

Рассматривается тонкостенная гофрированная оболочка средней длины L с упругим заполнителем и находящаяся под действием внешнего неоднородного гидростатического давления $Q_n^*(\varphi)$. Гофрированная оболочка моделируется тонкой оболочкой вращения толщиной h , а расстояние от оси вращения до срединной поверхности оболочки, отнесенное к радиусу R , задается функцией

$$B(s) = 1 + \mu F(s), \quad F(s) = \sin(2\pi s/\lambda), \quad \mu = \delta/R, \quad (1)$$

где μ – малый параметр, s – продольная координата, функция $F(s)$ описывает форму начальных отклонений от цилиндрической поверхности, имеет порядок единицы и существенно не возрастает при дифференцировании, δ – высота волны гофра, λ – длина волны гофра, отнесенная к радиусу R .

Воздействие упругого заполнителя принято в качестве дополнительного давления, обусловленного нормальным перемещением w стенок оболочки, в рамках модели Винклера [1].

Для описания локальной бифуркации безмоментного напряженного состояния, используется система полубезмоментных уравнений тонких оболочек [2]:

$$\varepsilon^4 \Delta^2 w + \varepsilon^2 \Lambda \Delta_t w - \Delta_k \Phi + ew = 0, \quad \varepsilon^4 \Delta^2 \Phi + \Delta_k w = 0, \quad (2)$$

$$\Delta = \frac{1}{A_1 A_2} \left(\frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{A_2}{A_1} \frac{\partial}{\partial s} \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{A_1}{A_2} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right),$$