ИССЛЕДОВАНИЕ СОБСТВЕННЫХ КОЛЕБАНИЙ СЛОИСТОЙ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ, ОНОВАННОЕ НА НЕЛОКАЛЬНОЙ ТЕОРИИ ОБОЛОЧЕК

А. Н. Шейко

ВВЕДЕНИЕ

Уникальные свойства углеродных нанотрубок (УНТ) возбудили огромный интерес к их исследованию. Известно, что существуют два подхода к исследованиям УНТ: на основе атомарных или молекулярных моделей, а также моделей классической механики сплошных сред. Оба метода имеют некоторые недостатки [1]. Атомистическое моделирование требует больших затрат вычислительных ресурсов и для анализа объектов относительно больших размеров не подходит. В то же время применимость методов классической механики сплошных сред к наноразмерным объектам вызывает сомнения [2, 3]. Неудачные попытки применить классические модели для изучения механических свойств наноразмерных структур частично объясняются тем, что классические континуальные модели не учитывают присущие зависимости от микроструктуры материала.

В связи с ограниченностью применения континуальной модели к наноразмерным структурам, появились работы, в которых используется нелокальная упругая модель при анализе механических свойств наноразмерных объектов. Нелокальная теория упругости, впервые была предложена Эрингеном [4,5]. Предполагается, что напряженное состояние в данной точке является функцией деформаций в каждой точке тела.

Результаты анализа динамического поведения УНТ предсказываемые моделью нелокальной упругой цилиндрической оболочки были сопоставлены с результатами полученными молекулярной динамикой и показали хорошую согласованность в широком диапазоне частот [6].

Учитывая недостатки существующих методов расчета наноразмерных объектов, в данной работе приведены уравнения движения многостенной углеродной нанотрубки, учитывающие эффект нелокальности. Проведен анализ влияния учета данного эффекта на собственные частоты УНТ. Ранее, была опубликована статья посвященная исследованию движения УНТ на основании нелокальной теории упругости [7], однако, в ней использовалась модель, не учитывающая начальные напряжения, создаваемые внешними силами.

СИСТЕМА КООРДИНАТ

Многостенную углеродную нанотрубку будем моделировать как механическую систему, состоящую из N концентрически вложенных цилиндрических оболочек. Пусть L, R_n и h_n (n =1, 2, …, N) – длина, радиус срединной поверхности n-ой трубки и ее эффективная толщина соответственно. На срединной поверхности n-ой оболочки введем ортогональную систему координат x, φ с ортами $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2$, где x – осевая координата, а φ – угол как показано на рис. 1.

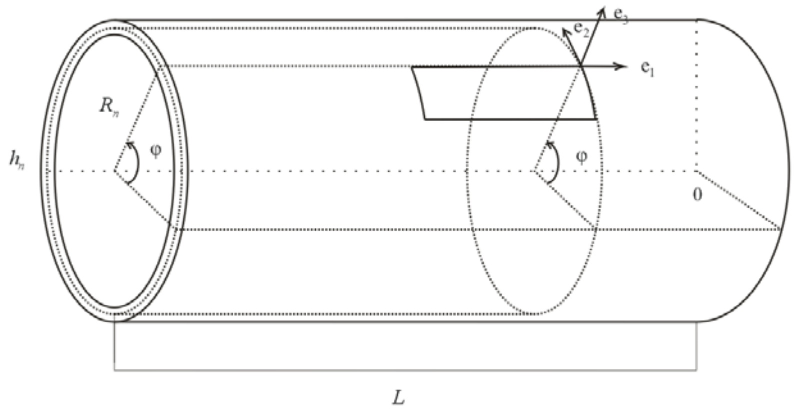

Рис. 1. Криволинейная система координат на поверхности *n*-ой трубки. Усилия и моменты

УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ В УСИЛИЯХ

Углеродная нанотрубка моделируется изотропной цилиндрической оболочкой уравнениями типа Флюгге [8]. Данная модель учитывает начальные напряжения, создаваемые внешними силами.

Запишем математическую модель, описывающую движение цилиндрической оболочки с начальными напряжениями. Учет взаимного влияния соседних стенок УНТ осуществляется введением в уравнения движения сил Ван-дер-Ваальса.

$$\frac{\partial T_{n,1}}{\partial x} + T_{n,1}^0 \frac{\partial^2 u_{n,1}}{\partial x^2} - \rho_n h_n \frac{\partial^2 u_{n,1}}{\partial t^{*2}} = 0,$$

$$\frac{\partial^2 M_{n,1}}{\partial x^2} + \frac{1}{R_n} T_{n,1} - T_{n,1}^0 \frac{\partial^2 u_{n,1}}{\partial x^2} - \frac{1}{R_n^2} T_{n,2}^0 u_{n,3} + q_{n,3}^{vdW} - \qquad (1)$$

$$-\rho_n h_n \frac{\partial^2 u_{n,3}}{\partial t^{*2}} = 0, \quad n = 1, 2, \ldots, N.$$

где ρ_n – удельная масса n-ой трубки, t – время, $T_{n,1}^0, T_{n,2}^0$ – начальные напряжения в соответствующих направлениях, $q_{n,3}^{vdW}$ – сила Ван-дер-Ваальса в радиальном направлении, h_n – эффективная толщина соответствующего слоя.

Введем *макроскопические* напряжения, которые связаны с перемещениями следующим образом:

$$T_{n,1}^{(m)} = \frac{E_n h_n}{1-\nu_n^2}\left(\frac{\partial u_{n,1}}{\partial x} - \frac{\nu_n}{R_n} u_{n,3}\right), T_{n,2}^{(m)} = \frac{E_n h_n}{1-\nu_n^2}\left(\nu_n \frac{\partial u_{n,1}}{\partial x} - \frac{1}{R_n} u_{n,3}\right),$$
$$M_{n,1}^{(m)} = \frac{-E_n h_n^3}{12(1-\nu_n^2)} \frac{\partial^2 u_{n,3}}{\partial x^2}, \; n = 1,2,...,N. \tag{2}$$

В соответствии с нелокальной континуальной теорией Эрингена [4], адаптированной для цилиндрической оболочки [9], *микроскопические* и *макроскопические* напряжения связаны соотношениями:

$$L\left(T_{n,1}, T_{n,2}, M_{n,1}\right) = \left(T_{n,1}^{(m)}, T_{n,2}^{(m)}, M_{n,1}^{(m)}\right), \; n = 1,2,...,N. \tag{3}$$

где L – дифференциальный оператор, действующий по формуле:

$$L = 1 - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{4}$$

Здесь a=0,142нм – ранее введенный внутренний характерный размер решетки нанотрубки, а e_0 – материальная *константа нелокальности.*

Таким образом, на основании соотношений (2), (3) и (4) можно получить уравнения связывающие перемещения и микроскопические напряжения. Далее подействовав оператором (4) на равенства (1), учитывая (2), получим уравнения движения в перемещениях:

$$\frac{E_n h_n}{1-\nu_n^2}\left(\frac{\partial^2 u_{n,1}}{\partial x^2} - \frac{\nu_n}{R_n}\frac{\partial u_{n,3}}{\partial x}\right) + T_{n,1}^0 \frac{\partial^2 u_{n,1}}{\partial x^2} - (e_0 a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(T_{n,1}^0 \frac{\partial^2 u_{n,1}}{\partial x^2}\right) = 0,$$
$$\frac{-E_n h_n^3}{12(1-\nu_n^2)}\frac{\partial^4 u_{n,3}}{\partial x^4} + \frac{1}{R_n}\frac{E_n h_n}{1-\nu_n^2}\left(\nu_n \frac{\partial u_{n,1}}{\partial x} - \frac{1}{R_n} u_{n,3}\right) - T_{n,1}^0 \frac{\partial^2 u_{n,3}}{\partial x^2} +$$
$$+(e_0 a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(T_{n,1}^0 \frac{\partial^2 u_{n,3}}{\partial x^2}\right) - \frac{1}{R_n^2} T_{n,2}^0 u_{n,3} + \frac{1}{R_n^2}(e_0 a)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}(T_{n,2}^0 u_{n,3}) - \tag{5}$$
$$-q_{n,3}^{vdW} + (e_0 a)^2 \frac{\partial^2 q_{n,3}^{vdW}}{\partial x^2} - \rho_n h_n \frac{\partial^2 u_{n,3}}{\partial t^{*2}} + \rho_n h_n (e_0 a)^2 \frac{\partial^4 u_{n,3}}{\partial x^2 \partial t^{*2}} = 0,$$

$$n = 1, 2, ..., N.$$

На основании построенной модели, в таблице представлены значения собственных частот одностенной углеродной нанотрубки, для случая шарнирного опирания ее краев. Значения собственных частот построены в зависимоти от числа полуволн в осевом направлении m и коэффициента нелокальности e_0. Параметры для нанотрубки взяты из [7]. Длина принята равной двадцати радиусам, коэффициент постели равен нулю. Начальные напряжения не учитываются.

Таблица

Собственные частоты одностенной УНТ от числа полуволн в осевом направлении и коэффициента нелокальности

Ω $(\times 10^{13}$ Гц)					
m / e_0	1	5	10	15	20
0	2.9198	3.0557	4.6904	6.9308	9.2061
0.39	2.9197	3.0528	4.6728	6.8726	9.0699
3.9	2.9089	2.8021	3.5388	4.2159	4.5876

Анализируя полученные данные заключаем, что учет параметра e_0 в законе физического состояния Эрингена приводит к заметному снижению собственных частот колебаний УНТ. Данный эффект усиливается с ростом числа полуволн в осевом направлении.

Литература

1. *Xu M.*, Free transverse vibrations of nano-to-micron scale beams, Proc. R. Soc. A. 462, 2977 ″ U2995, (2006).
2. *Sun C. T.* and *Zhang H.* Size-dependent elastic moduli of platelike nanomaterials, J. Appl. Phys. 93, 1212–1218 (2003).
3. *Lu J.* Elastic properties of carbon nanotubes and nanoropes, Phys. Rev. Lett. 79, 1297 (1997).Technol. 63, 1607–1616 (2003).
4. *Eringen A. C.* On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves, J. Appl. Phys.
5. *Eringen A.C.* Nonlocal continuum field theories (Springer, New-York, 2002).
6. *Wang L., Hu H* and *Guo W.* Validation of the non-local elastic shell model for studing longitudinal waves in single-walled carbon nanotubes, Nanotechnology 17, 1408–1415 (2006).
7. *Михасев Г. И.*, *Шейко А. Н.* Вывод уравнений движения многостенной улеродной нанотрубки с использованием нелокальной континуальной теории ортотропных цилиндрических оболочек. // Теоретическая и прикладная механика. Вып 27: Межд. научно-технический сборник. Мн.: БНТУ, 2012. С. 70–77
8. *Flügge W.* Statik und Dynamik der Schalen (Springer, Berlin, 1934). 54, 4703–4710 (1983).
9. *Usuki T.* and *Yogo K.* Beam equations for multi-walled carbon nanotubes derived from Flügge shell theory, Proc. R. Soc. A 465, 1199–1226 (2009).