

## БИФУРКАЦИЯ МНОГОСЛОЙНОЙ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ, ЛЕЖАЩЕЙ В УПРУГОЙ МАТРИЦЕ, ПРИ ОСЕВОМ СЖАТИИ

Михасев Г.И., Ботогова М.Г., Бальцевич А.В.

*Based on the theory of nonlocal continuum mechanics, a model on the column buckling of multi-walled carbon nanotubes is presented. The interaction between the nanotube walls is described in the terms of the van der Waals forces. The nanotube is arranged in the elastic isotropic medium.*

Многослойные углеродные нанотрубки отличаются от традиционных упругих балок своей полый многослойной структурой и действующими между ними межмолекулярными силами ван-дер-Ваальса. Силы ван-дер-Ваальса между соседними трубками имеют решающее влияние на механическое поведение углеродных нанотрубок. Так как сжатые вдоль оси углеродные нанотрубки имеют важные механические свойства, исследование осевого прогиба с учетом сил ван-дер-Ваальса представляет большой интерес. В данной статье, представлена нелокальная упругая модель бифуркации сжатой вдоль оси многослойной углеродной нанотрубки.

Рассмотрим слоистую нанотрубку, лежащую в упругой среде. Воспользуемся уравнениями [1]:

$$EI_1 \frac{d^4 W_1(x)}{dx^4} = p(x)_{12} + N_1 \frac{d^2 W_1(x)}{dx^2} - (e_0 a)^2 \left[ \frac{d^2 p(x)_{12}}{dx^2} + N_1 \frac{d^4 W_1(x)}{dx^4} \right]; \quad (1)$$

$$EI_2 \frac{d^4 W_2(x)}{dx^4} = [p(x)_{23} - p(x)_{12}] + N_2 \frac{d^2 W_2(x)}{dx^2} - (e_0 a)^2 \left[ \frac{d^2}{dx^2} [p(x)_{23} - p(x)_{12}] + N_2 \frac{d^4 W_2(x)}{dx^4} \right];$$

$$EI_n \frac{d^4 W_n(x)}{dx^4} = [p(x)_n - p(x)_{(n-1)n}] + N_n \frac{d^2 W_n(x)}{dx^2} - (e_0 a)^2 \left[ \frac{d^2}{dx^2} [p(x)_n - p(x)_{(n-1)n}] + N_n \frac{d^4 W_n(x)}{dx^4} \right];$$

где индексы 1, 2, ...n использованы для обозначения внутреннего слоя, соседних слоев и внешнего слоя соответственно,  $p(x)_{(n-1)n}$  – силы Ван-дер-Ваальса между соседними слоями. Силы Ван-дер-Ваальса определяются по формуле [1]:

$$p(x)_{12} = c_{12} [W_2(x) - W_1(x)]; \quad (2)$$

$$p(x)_{23} = c_{23} [W_3(x) - W_2(x)];$$

$$p(x)_{(n-1)n} = c_{(n-1)n} [W_n(x) - W_{n-1}(x)],$$

$$p(x)_n = -kW_n(x).$$

Здесь  $c_{(n-1)n}$  – константы, независящие от приложенной осевой силы,  $\kappa$  – коэффициент винклеровского основания в упругой среде,  $W_i(x)$  – прогиб  $i$ -го слоя нанотрубки.

Подставляя (1) в (2) получим следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned}
& EI_1 \left( 1 + \frac{(e_0 a)^2}{EI_1} N_1 \right) \frac{d^4 W_1(x)}{dx^4} = c_{12} [W_2(x) - W_1(x)] + N_1 \frac{d^2 W_1(x)}{dx^2} - \\
& - (e_0 a)^2 c_{12} \left[ \frac{d^2 W_2(x)}{dx^2} - \frac{d^2 W_1(x)}{dx^2} \right]; \\
& EI_2 \left( 1 + \frac{(e_0 a)^2}{EI_2} N_2 \right) \frac{d^4 W_2(x)}{dx^4} = c_{23} [W_3(x) - W_2(x)] - c_{12} [W_2(x) - W_1(x)] + \\
& + N_2 \frac{d^2 W_2(x)}{dx^2} - (e_0 a)^2 \left[ c_{23} \left[ \frac{d^2 W_3(x)}{dx^2} - \frac{d^2 W_2(x)}{dx^2} \right] - c_{12} \left[ \frac{d^2 W_2(x)}{dx^2} - \frac{d^2 W_1(x)}{dx^2} \right] \right]; \\
& \dots\dots\dots \\
& EI_{n-1} \left( 1 + \frac{(e_0 a)^2}{EI_{n-1}} N_{n-1} \right) \frac{d^4 W_{n-1}(x)}{dx^4} = c_{(n-1)n} [W_n(x) - W_{n-1}(x)] - \\
& - c_{(n-1)(n-2)} [W_{n-1}(x) - W_{n-2}(x)] + N_{n-1} \frac{d^2 W_{n-1}(x)}{dx^2} - \\
& - (e_0 a)^2 \left[ c_{(n-1)n} \left[ \frac{d^2 W_n(x)}{dx^2} - \frac{d^2 W_{n-1}(x)}{dx^2} \right] - c_{(n-1)(n-2)} \left[ \frac{d^2 W_{n-1}(x)}{dx^2} - \frac{d^2 W_{n-2}(x)}{dx^2} \right] \right]; \\
& EI_n \left( 1 + \frac{(e_0 a)^2}{EI_n} N_n \right) \frac{d^4 W_n(x)}{dx^4} = -k W_n(x) - c_{(n-1)n} [W_n(x) - W_{n-1}(x)] + \\
& + N_n \frac{d^2 W_n(x)}{dx^2} - (e_0 a)^2 \left[ -k \frac{d^2 W_n(x)}{dx^2} - c_{(n-1)n} \left[ \frac{d^2 W_n(x)}{dx^2} - \frac{d^2 W_{n-1}(x)}{dx^2} \right] \right].
\end{aligned} \tag{3}$$

Рассмотрим в качестве примера однослойную и двухслойную нанотрубки.  
Для однослойной нанотрубки:

$$\left[ EI + (e_0 a)^2 N \right] \frac{d^4 W(x)}{dx^4} = -k W(x) + N \frac{d^2 W(x)}{dx^2} + k \frac{d^2 W(x)}{dx^2}. \tag{4}$$

Здесь  $a$  – межатомарное расстояние;  $e_0$  – константа нелокальности, определяющая материал;  $E$  – эффективный модуль Юнга нанотрубки;  $I$  – момент инерции поперечного сечения нанотрубки;  $N$  – осевая сила, приложенная к нанотрубке.

Запишем  $W(x)$  в виде:

$$W(x) = C \sin\left(\frac{\pi n x}{l}\right), \quad \lambda = \frac{\pi n}{l}. \tag{5}$$

Коэффициент винклеровского основания в упругой среде

$$k = \alpha \frac{\pi n R}{l}, \quad \alpha = \frac{2E_0(1-\nu_0)}{(1+\nu_0)(3-4\nu_0)}, \tag{6}$$

где  $E_0$  – модуль Юнга упругой среды;  $\nu_0$  – коэффициент Пуассона упругой среды.

При подстановке (5) и (6) в уравнение (4) получаем следующее уравнение

$$\left[ EI + (e_0 a)^2 N \right] \lambda^4 + \lambda^2 (N + (e_0 a)^2 \alpha R \lambda) + \alpha R \lambda = 0. \tag{7}$$

Из (7) выражаем силу  $N$

$$N = - \left( \frac{EI \lambda^2}{1 + (e_0 a)^2 \lambda^2} + \frac{\alpha R}{\lambda} \right). \tag{8}$$

Исследуем функцию  $N'_\lambda$  на минимум

$$N'_\lambda = \frac{-2EI\lambda}{(1+(e_0a)^2\lambda^2)^2} + \frac{\alpha R}{\lambda^2} = 0. \quad (9)$$

Введем следующие обозначения

$$\xi = (e_0a)^2; \theta = \frac{EI}{\alpha}, \text{ где } \xi \ll 1. \quad (10)$$

Тогда из (9), с учетом (10), получаем

$$R\xi^2\lambda^4 - 2\theta\lambda^3 + 2R\xi\lambda^2 + R = 0. \quad (11)$$

Решение уравнения (11) представим в виде асимптотического ряда

$$\lambda = \lambda_0 + \lambda_1\xi + \lambda_2\xi^2 + \lambda_3\xi^3 + \dots$$

Приравнявая коэффициенты при одинаковых степенях  $\xi$ , в нулевом приближении получаем

$$\xi^0: \quad -2\theta\lambda_0^3 + R = 0. \quad (12)$$

Из (12) определяем

$$\lambda_{0,1,2,3} = \sqrt[3]{\frac{R}{2\theta}}. \quad (13)$$

Подставляя (13) в (8) получаем следующие значения N

$$N_{1,2,3} = -\frac{2^{1/3} R \left( EI + \alpha\theta \left( 2 + 2^{1/3} (e_0a)^2 \left( \frac{R}{\theta} \right)^{2/3} \right) \right)}{2^{1/3} (e_0a)^2 R + 2\theta \left( \frac{R}{\theta} \right)^{1/3}}. \quad (14)$$

Для поиска 4-го корня используем следующую замену:

$$\lambda = \frac{x}{\xi^v}. \quad (15)$$

Подставим (15) в (11) и получим следующее уравнение

$$R\xi^{2-4v}x^4 - 2\theta\xi^{-3v}x^3 + 2R\xi^{1-2v}x^2 + R = 0. \quad (15')$$

Определим  $v$ , приравнявая степени при  $\xi$  двух первых слагаемых. Получим  $v = 2$ .

Пусть  $x = x_0 + x_1\xi + x_2\xi^2 + x_3\xi^3 + \dots$

Тогда из нулевого приближения, подставляя  $x$  в (15'), получим

$$x_0 = \frac{2\theta}{R}; \lambda_{0,1} = \frac{2\theta}{R\xi^2}. \text{ Следовательно } N_4 = -\left( \frac{\alpha(e_0a)^4 R^2}{2\theta} + \frac{4EI\theta^2}{4\theta^2(e_0a)^2 + R^2(e_0a)^8} \right).$$

Для расчета используем следующие данные:

$h = 3.4 \cdot 10^{-10}$  м – толщина нанотрубки;  $R = 10^{-9}$  м – радиус внутренней полой части нанотрубки;  $e_0 = 0,39$ ;  $a = 1,42 \cdot 10^{-10}$  м; длина нанотрубки  $l = 100 \cdot 10^{-9}$  м.

Рассматриваются 3 различные упругие среды: сталь, свинец и кварцевое стекло. Для стали:  $E_0 = 20,6 \cdot 10^{10}$  Н/м<sup>2</sup>,  $\nu_0 = 0,28$ ; для свинца:  $E_0 = 1,6 \cdot 10^{10}$  Н/м<sup>2</sup>,  $\nu_0 = 0,44$ ; для кварцевого стекла:  $E_0 = 7,5 \cdot 10^{10}$  Н/м<sup>2</sup>,  $\nu_0 = 0,17$ .

Подставив все данные в уравнения (11) и (13), получаем следующие результаты:

Сталь:  $N_{1,2,3} = -6,15229 \cdot 10^{-7}$  Н,  $N_4 = -7,40452 \cdot 10^{-4}$  Н;

Свинец:  $N_{1,2,3} = -1,15575 \cdot 10^{-7}$  Н,  $N_4 = -7,40452 \cdot 10^{-4}$  Н;

Кварцевое стекло:  $N_{1,2,3} = -3,18282 \cdot 10^{-7}$  Н,  $N_4 = -7,40452 \cdot 10^{-4}$  Н.

$N_4$  имеет больший порядок чем  $N_{1,2,3}$  и практически не зависит от вида упругой среды. Следовательно, при  $N_{1,2,3}$  происходит потеря устойчивости однослойной трубки.

На рисунке 1 представлены графики зависимости минимальной силы, при которой происходит потеря устойчивости от радиуса нанотрубки при фиксированной длине.

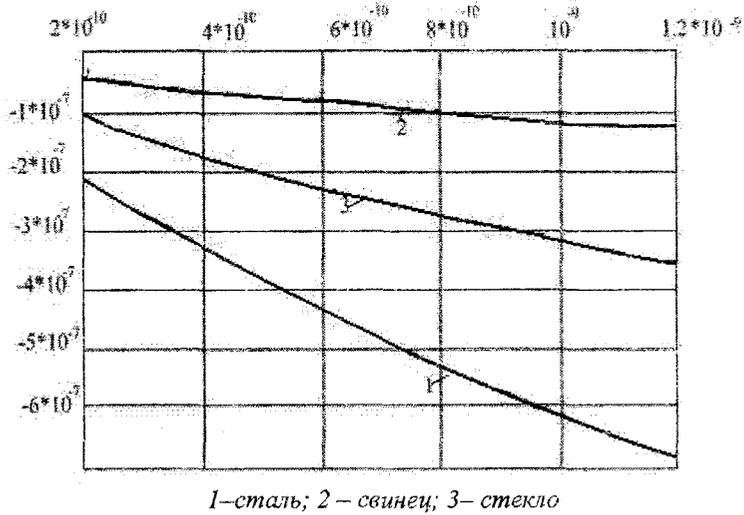


Рисунок 1

На рисунке 2 представлены графики зависимости количества волн от радиуса полой части нанотрубки при фиксированной длине.

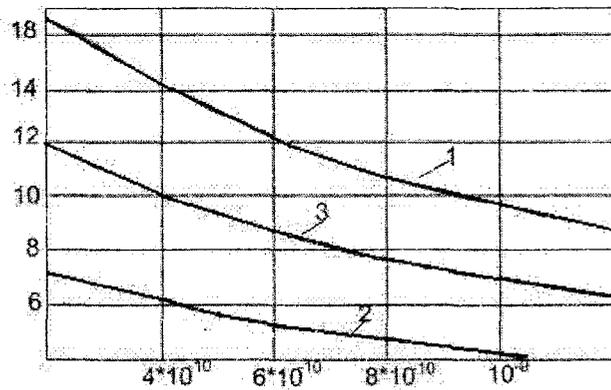


Рисунок 2

Рассмотрим уравнения, описывающие устойчивость двуслойной нанотрубки (рисунок 3) на упругом основании в случае осевого сжатия:

$$\left[ EI_1 + (e_0 a)^2 N_1 \right] \frac{d^4 W_1(x)}{dx^4} = c_{12} [W_2(x) - W_1(x)] + N_1 \frac{d^2 W_1(x)}{dx^2} - (e_0 a)^2 c_{12} \left[ \frac{d^2 W_2(x)}{dx^2} - \frac{d^2 W_1(x)}{dx^2} \right] \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \left[ EI_2 + (e_0 a)^2 N_2 \right] \frac{d^4 W_2(x)}{dx^4} = & -k W_2(x) - c_{12} [W_2(x) - W_1(x)] + \\ & + N_2 \frac{d^2 W_2(x)}{dx^2} - (e_0 a)^2 \left[ -k \frac{d^2 W_2(x)}{dx^2} - c_{12} \left[ \frac{d^2 W_2(x)}{dx^2} - \frac{d^2 W_1(x)}{dx^2} \right] \right] \end{aligned}$$

Пусть граничные условия имеют вид:  $W_1(x) = W_2(x) = 0$  при  $x = 0, l$ .

Тогда

$$W_1(x) = C \sin\left(\frac{\pi n x}{l}\right), W_2(x) = D \sin\left(\frac{\pi n x}{l}\right). \quad (18)$$

Поставляя (18) в (17), получим

$$\begin{aligned} [EI_1 + (e_0 a)^2 N_1] C \left(\frac{n\pi}{l}\right)^4 &= c_{12} [D - C] - N_1 C \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 + (e_0 a)^2 c_{12} [D - C] \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2, \\ [EI_2 + (e_0 a)^2 N_2] D \left(\frac{n\pi}{l}\right)^4 &= -kD - c_{12} [C - D] - \\ &- N_2 D \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 - (e_0 a)^2 \left[ kD \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 + c_{12} (D - C) \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (19)$$

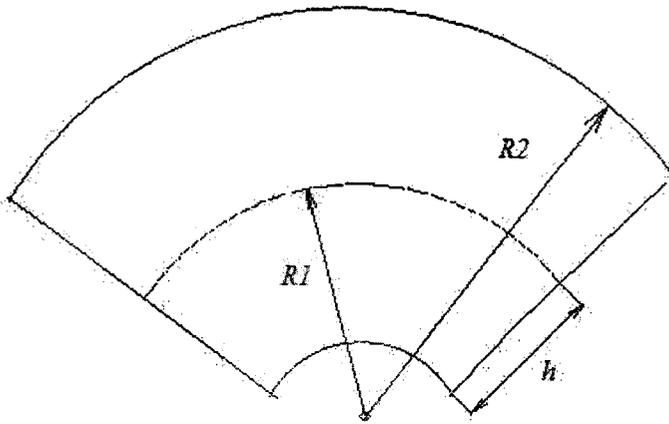


Рисунок 3

Положим  $N_1 = A_1 \sigma$ ,  $N_2 = A_2 \sigma$ . Здесь  $A_1, A_2$  – площадь поперечного сечения слоя 1, 2 соответственно,  $\sigma$  – напряжение, возникающее в результате осевого сжатия. (предполагается, что оно одинаково для всего поперечного сечения).

Условия существования ненулевого решения для  $D$  и  $C$  запишутся в виде:

$$\begin{vmatrix} [EI_1 + (e_0 a)^2 \sigma A_1] \left(\frac{n\pi}{l}\right)^4 + c_{12} + \sigma A_1 \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 & -c_{12} - c_{12} (e_0 a)^2 \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 \\ -c_{12} - c_{12} (e_0 a)^2 \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 & [EI_2 + (e_0 a)^2 \sigma A_2] \left(\frac{n\pi}{l}\right)^4 + (c_{12} + k) \left(1 + (e_0 a)^2 \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2\right) + \sigma A_2 \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (20)$$

Формулу (20) можно переписать в виде

$$X \sigma^2 + Y \sigma + Z = 0, \quad (21)$$

где  $X = \frac{A_1 A_2 n^4 \pi^4}{l^8} (l^2 + (e_0 a)^2 n^2 \pi^2)^2$ ;

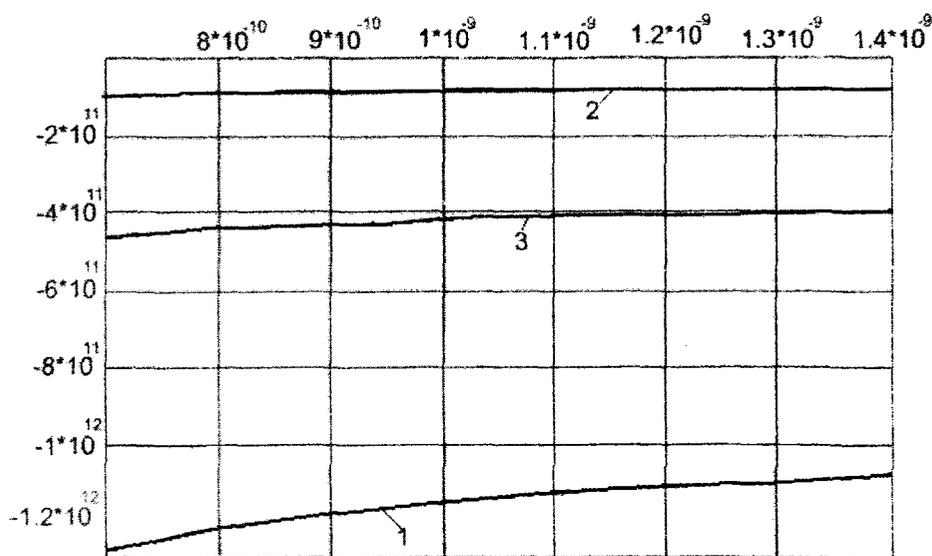
$$Y = \frac{n^2 \pi^2}{l^8} (l^2 + (e_0 a)^2 n^2 \pi^2) \left\{ (A_2 C + A_1 (C + k)) l^4 + A_1 (e_0 a)^2 k l^2 n^2 \pi^2 + E (A_2 I_1 + A_1 I_2) n^4 \pi^4 \right\}$$

$$Z = \frac{1}{l^8} (C k l^8 + (e_0 a)^2 C k l^6 n^2 \pi^2 + E l^4 n^4 \pi^4 (C (I_1 + I_2) + k I_1) + (e_0 a)^2 E l^2 n^6 \pi^6 I_1 + E I_1 I_2 n^8 \pi^8)$$

$$C = c_{12} + c_{12} (e_0 a)^2 \left( \frac{n \pi}{l} \right)^2.$$

Решая квадратное уравнение (21), находим его корни. Минимизируя их по  $n$ , определяем критическое напряжение  $\sigma$  в нанотрубке (см. рисунок 3).

На рисунке 3 представлены графики зависимости напряжения от радиуса  $R_2$  при фиксированной длине. Как видно из рисунка, при увеличении радиуса критическое напряжение уменьшается.



1 – сталь; 2 – свинец; 3 – стекло  
Рисунок 3

## ЛИТЕРАТУРА

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

Поступила 21.12.11