

## РАВНИТЕЛЬНЫЙ ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ МЕХАНИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ НАНОТРУБКИ В СЛУЧАЕ ПРИМЕНЕНИЯ РАЗНЫХ МЕХАНИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Нагорный Ю.Е., Репченков В.И., Чижик С.А.

*It was developed computer model of single-walled carbon nanotube on basis of valence-force-field approach. One performed computational experiments to determine mechanical characteristics (linear elasticity modulus, crosscut compression coefficient, shear modulus) according nanotube dimensions. One realized comparison present results with results obtained within Urey-Bradley model. Qualitative distinctions in behaviour of modules are found out.*

В основе описания наноструктур углерода, состоящих из правильных шестиугольников, лежит фрагмент из четырёх атомов в виде трёхлучевой звезды (рис. 1).

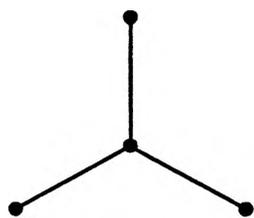


Рис. 1

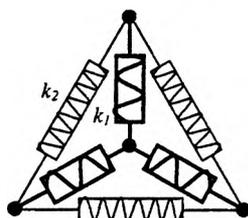


Рис. 2

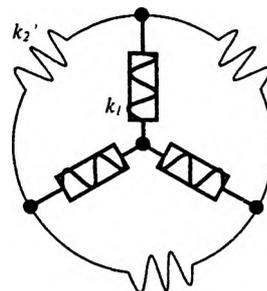


Рис. 3

Предположим, что взаимодействуют между собой только ближайшие и расположенные через один атомы. Все они идентичны и при малых смещениях возникающие в системе силы могут быть выражены через два параметра, которые называются силовыми коэффициентами. На рис. 2, 3 изображены механические модели соответствующие такой ситуации. Первая (рис. 2) состоит из шести одномерных упругих элементов с жёсткостями  $k_1$  и  $k_2$ . Вторая (рис. 3) включает в себя наряду с одномерными упругими элементами угловые элементы с жёсткостью  $k_2'$ . Связь между постоянными  $k_2$  и  $k_2'$  может быть установлена через условие равенства потенциальной энергии запасённой в элементах при одинаковых смещениях.

В работе [1] проведено численное исследование механических свойств однослойной плоской наноструктуры углерода – графена. Выяснилось, что упругие коэффициенты рассчитанные с применением разных моделей существенно отличаются друг от друга. Они по разному зависят от размеров наноструктуры.

Ниже аналогичное исследование проведено для нанотрубки регулярного строения с границами типа “зигзаг”. На рис. 4–6 приведены соответственно графики коэффициента продольной упругости (модуль Юнга), коэффициента поперечной жёсткости (коэффициент Пуассона) и модуля сдвига. Первые два получены при растяжении трубки, последний – при её кручении. Графики слева взяты из работы [2].

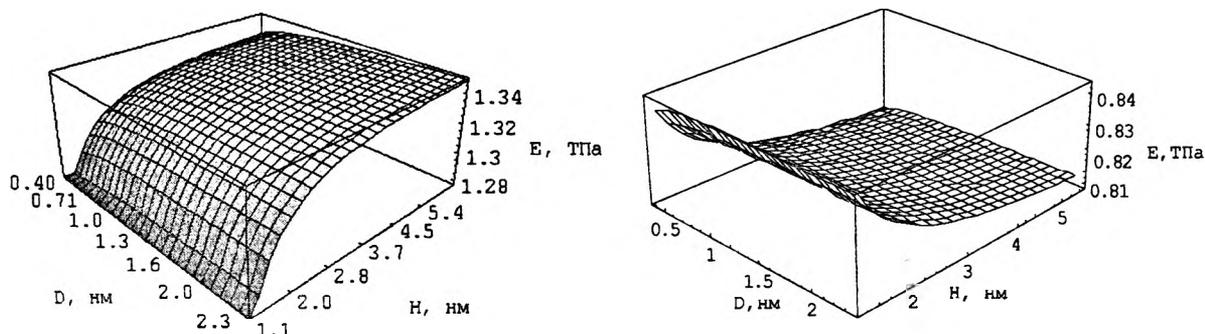


Рис. 4. Модуль продольной упругости

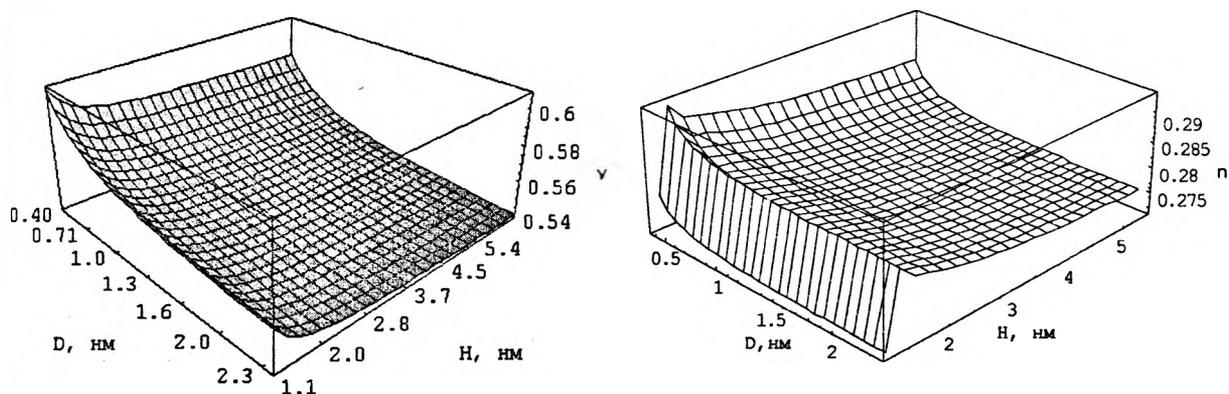


Рис. 5. Коэффициент поперечного сжатия

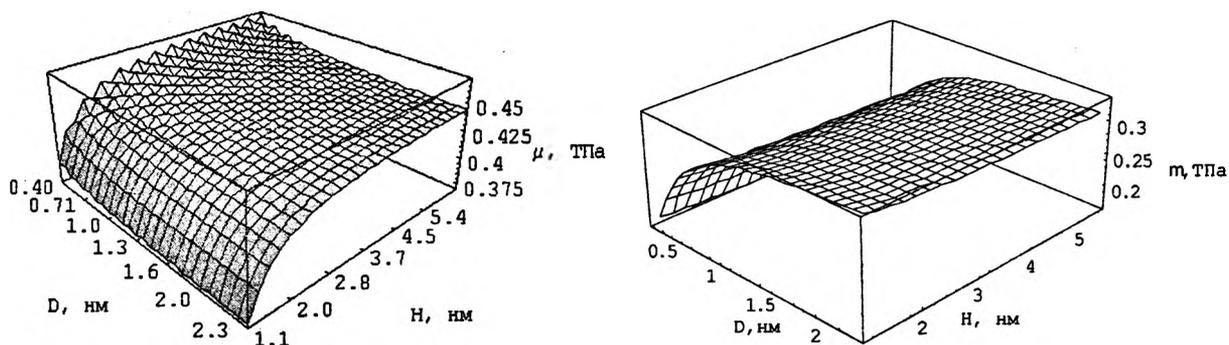


Рис. 6. Модуль сдвига

Наибольшее отличие наблюдается для модуля продольной упругости и модуля сдвига. В случае применения первой модели (рис. 2) оба упругих коэффициента мало зависят от диаметра нанотрубки. Значительно возрастая при изменении её высоты:  $1,28 < E_1 < 1,34$  ТПа;  $0,375 < \mu_1 < 0,45$  ТПа. Расчёты на основе второй модели (рис. 3) приводят к совершенно другим результатам. Теперь модуль Юнга не возрастает, а убывает с увеличением высоты. Причём изменяется в других пределах — от 0,84 ТПа до 0,81 ТПа. Модуль сдвига наоборот практически не зависит от высоты и растёт с увеличением диаметра нанотрубки. Предел изменения также отличается:  $0,2 < \mu_2 < 0,3$  ТПа. Коэффициент поперечного сжатия в обеих моделях ведёт себя сходным образом. Однако значения для второй модели вдвое меньше, чем в случае первой ( $0,54 < \nu_1 < 0,6$  против  $0,275 < \nu_2 < 0,295$ ).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Нагорный, Ю.Е., Репченко, В.И., Сыроежкин, С.В., Чижик, С.А. Расчет механических свойств графена в модели валентно-силового поля // Теоретическая и прикладная механика. – Минск, 2007. – Вып. 22. – С. 182–186.
2. Майсевич, Е.С., Сыроежкин, С.В. Зависимость механических свойств однослойной нанотрубки с границами типа “зигзаг” от линейных размеров // Известия национальной академии наук Беларуси. Серия физ.-тех. наук. – 2005. – № 5. – С. 104–106.