МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ В. Н. КАРАЗІНА
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ
КОМП'ЮТЕРНОЇ ФІЗИКИ ТА ЕНЕРГЕТИКИ

Кафедра інформаційних технологій в фізико-енергетичних системах

Пояснювальна записка

до дипломної роботи

за освітньо-кваліфікаційним рівнем бакалавр

«Використання сингулярних інтегральних рівнянь для розв'язання неоднорідних задач математичної фізики»

Виконав: студент 6 курсу, групи НФ-63
Сергій РОБЕЙКО
Спеціальність:
«Прикладна фізика та наноматеріали»
Керівник: ст.викл. Єгор НЄМЧЕНКО

Рецензент:

Харків - 2022

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Харківський національний університет імені В.Н.Каразіна

Навчально-науковий інститут комп'ютерної фізики та енергетики
Кафедра інформаційних технологій в фізико-енергетичних системах
Рівень вищої освіти (освітньо-кваліфікаційний рівень) магістр
Спеціальність 105 Прикладна фізика та наноматеріали

ЗАТВЕРДЖУЮ
Завідувач кафедри

_____ Руслан СУХОВ
підпис
"____"_____2022 року

З А В Д А Н Н Я
НА ДИПЛОМНУ РОБОТУ (ПРОЕКТ)

Робейка Сергія Сергійовича
(прізвище, ім'я, по батькові студента)

1. Тема роботи «Використання сингулярних інтегральних рівнянь для неоднорідних задач математичної фізики».

керівник роботи старший викладач Нємченко Єгор Констянтинович.
(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом по університету від "03 " жовтня 2022 року №4201-5/1669

2. Строк подання студентом роботи 24.11.2022 року

3. Перелік питань, які потрібно розробити

Використання сингулярних інтегральних рівнянь для розв'язання неоднорідних задач математичної фізики. Моделювання процесу дії зовнішних сил на репрезантивний об'ємний елемент ВНТ. Дослідження деформованого стану ВНТ. Методи моделювання МСЕ та МГЕ .

4. План роботи

№ з/п	Назви етапів роботи
1.	Принципова схема нанотрубки.
2.	Вибір методу моделювання.
3.	Визначення параметрів ВНТ .
4.	Розрахунок граничного інтегрального рівняння , вектор деформації та вектор напружень.
5.	Проведення моделювання композицій ВНТ .
6.	Оформлення пояснювальної записки.

5. Дата видачі завдання_____

Студент _____ Сергій РОБЕЙКО

підпис

Керівник роботи _____ Єгор НЄМЧЕНКО

підпис

Перелік скорочень та абревіатур

ГІР-граничне інтегральне рівняння.

МГЕ-метод граничних елементів.

МСЕ- метод скінченних елементів.

РОЕ- репрезантивний об’ємний елемент.

ОВНТ- одностінні вуглецеві нанотрубки.

БВНТ- багатостінні вуглецеві нанотрубки.

РЕФЕРАТ

Робота на тему «Використання сингулярних інтегральних рівнянь для неоднорідних задач математичної фізики» виконана студентом другого курсу магістратури Робейко Сергієм Сергійовичем.

Робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновка та переліка посилань. Виконана робота за обсягом займає 59 сторінок, з них 46 сторінок основна частина, яка має 4 розділи; 3 таблиць, 22 ілюстрацій та 48 використаних джерел.

Здійснено розрахунок граничного інтегрального рівняння та проведено моделювання вуглецевої нанотрубки за допомогою методів скінченних елементів та методів граничних елементів.

Дана робота присвячена розв’язанню сингулярних інтегральних рівнянь та дослідженню фізичних явищ , які відбуваються з нанотрубкою при дії на неї зовнішніх сил при деформованому стані.

Метою даної дипломної роботи є розкриття особливостей, фізичних властивостей та моделювання дії зовнішніх сил на вуглецеву нанотрубку.

Ключові слова: Вуглецева нанотрубка, метод граничних елементів МГЕ, граничне інтегральне рівняння ГІР, метод скінченних елементів МСЕ, деформований стан,принципова схема нанотрубки.

ABSTRACT

The work on the topic "The use of singular integral equations for inhomogeneousproblems of mathematical physics" was performed by the second year master student Robeiko Serhii .

The work consists of an introduction, four chapters, conclusion and a list of references. The completed work occupies 59 pages, of which 46 pages are the main part, which has 4 sections; 3 tables, 22 illustrations and 48 references.

The boundary integral equation is calculated and the carbon nanotube is modeled using finite element and boundary element methods.

This work is devoted to the solution of singular integral equations and the study of physical phenomena that occur with a nanotube under the action of external forces in a deformed state.

The purpose of this thesis is to reveal the features, physical properties and modeling of external forces on carbon nanotube.

Keywords: Carbon nanotube, boundary element method BEM, boundary integral equation BIE, finite element method FEM, deformed state, schematic diagram of nanotube.

ЗМІСТ

ВСТУП	5
РОЗДІЛ 1. ПРИЗНАЧЕННЯ, КЛАСИФІКАЦІЯ, КОНСТРУКТИВНІ ОСОБЛИВОСТІ НАНОТРУБОК.	6
1.1 .Конструктивні особливості ВНТ.	6
1.2 Класифікація та структура.	11
1.3 Властивості та призначення.	12
РОЗДІЛ 2. ПРОЦЕДУРА МОДЕЛЮВАННЯ	14
2.1 Молекулярна потенціальна енергія.	14
2.2 Модель Фермі.	15
2.3 Еквівалентно-Континуальна модель.	16
2.4 Репрезантивний об’ємний елемент.	17
2.5 Модель молекулярної механіки.	18
2.6 Граничні умови.	18
РОЗДІЛ 3. ОСНОВНІ РІВНЯННЯ ТЕОРІЇ ПРУЖНОСТІ.	28
3.1 Тензор деформації.	28
3.2 Тензор напруження.	31
3.3 Закон Гука.Вільна енергія.Рівняння рівноваги.	36
РОЗДІЛ 4.КОНТИНУАЛЬНІ МОДЕЛІ МОДЕЛІ КОМПОЗИТІВ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК З ВИКОРИСТАННЯМ МЕТОДУ ГРАНИЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ.	38
4.1 Формула МГЕ для композитів на основі ВНТ.	38
4.2 Чисельні приклади.	41
4.3 Обговорення.	48
ВИСНОВКИ	51
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	52

Вступ

Людина завжди прагне покращити умови свого життя. Для цього у первісному суспільстві використовували різні трудові пристосування, а з часом приручили диких тварин. Тварини почали бути корисними для людського суспільства.

З плином часу, змінювались потреби, а також і самі люди, змінювався увесь світ. Багато хто із людей не уявляють свого життя без науки, техніки, медицини та інших сучасних досягнень цивілізації.

Іншим прогресивним кроком у розвитку людства є - нанотехнології. Особливо мікроскопічні системи, які зможуть використовувати команди людини.

Прогрес в технічній галузі веде нас до розробки швидких, компактніших, потужніших та складніших машин. Межею таких розробок можна рахувати машини молекулярного розміру. Технології створені за допомогою атомів, ковалентно зв'язаних, є дуже потужними, маленькими та швидкими. Створенням, розробкою і керуванням такими машинами займається молекулярна нанотехнологія. Ця галузь відкриває безпрецедентні, невідомі раніше можливості для взаємодії людини з цим світом.

Метою даної дипломної роботи є розкриття особливостей, фізичних властивостей та моделювання дії зовнішніх сил на вуглецеву нанотрубку.

Актуальність полягає в тому що, ми дізнаємося яке навантаження може витримати наша нанотрубка, змоделюємо цей процес та в майбутньому це покращить фізичні характеристики нанотрубки для використання в промислових масштабах галузей енергетики , медицини та інших цілях.

РОЗДІЛ 1. ПРИЗНАЧЕННЯ, КЛАСИФІКАЦІЯ, КОНСТРУКТИВНІ ОСОБЛИВОСТІ НАНОТРУБОК.

1.1 Конструктивні особливості вуглецевих нанотрубок.

Одностінні вуглецеві нанотрубки (ОВНТ) [1, 2] являють собою смуги графенових листів (моношарів графіту) [3], згорнутих одна в одну смуг листів графену (моношарів графіту) [4], згорнуті у циліндри. Ці структури стійкі, якщо діаметр трубки становить 5-20 Å.

Схема утворення нанотрубки наведена на рис. 1.1.

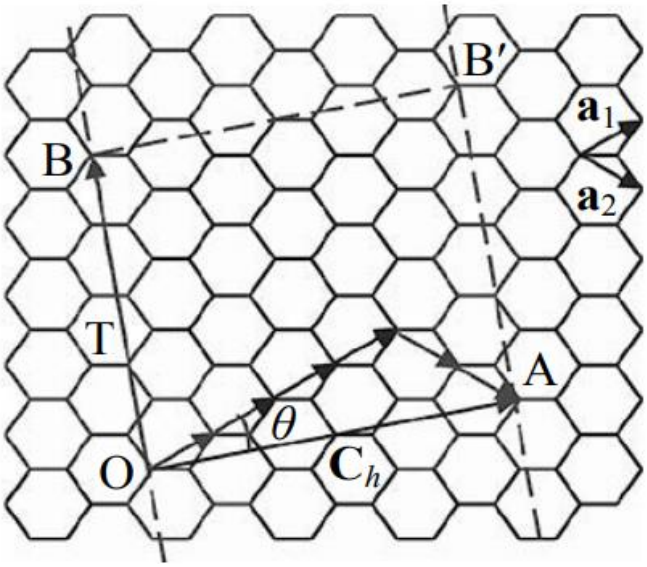


Рис.1.1 Схема формування одностінної вуглецевої нанотрубки

Для того, щоб отримати одностінну нанотрубку, необхідно вирізати смугу з уявної графенової [1] площини і з'єднати її краї так, щоб точка B перейшла в точку B′, а точка O - у точку A. При цьому трубка, визначена створюється вектор згортки:

$$C_h = 4a_1 + 2a_2 \qquad (1.1)$$

де a_1 і a_2 - базисні вектори кристалографічних осей графітового шару.

У загальному випадку:

$$C_h = na_1 + ma_2 \quad (1.2)$$

де n і m - цілі числа, які визначають число базисних векторів, з яких складається вектор згортки.

Даний вектор визначає довжину кола трубки і перпендикулярний її осі. Таким чином, геометрію нанотрубки можна однозначно задати двома індексами: числами n та m.

Другий спосіб завдання ОВНТ - за діаметром та кутом згортки θ(кут між вектором згортки C_h і базисним вектором a_1).

Якщо покласти n ≥ m, то завдяки симетрії графіту усі можливі геометрії нанотрубки задаються кутом згортки $0 \leq \theta \leq 30°$. Кут та діаметр згортки пов’язані з індексами m, n за такими формулами:

$$d = \frac{a_0\sqrt{n^2+nm+m^2}}{\pi} \quad (1.3)$$

$$\cos\theta = \frac{2_n+m}{2\sqrt{n^2+nm+m^2}} \quad (1.4)$$

де $a_0 = 2{,}46$ Å - період кристалічної решітки графена, d - діаметр нанотрубки, n і m - індекси нанотрубки [1].

Існують два специфічні типи геометрії одностінної нанотрубки: за n = m (θ = 30°) нанотрубка називається "крісло", а при m = 0 (θ = 0) - "зіґзаґ" (рис. 1.2 і 1.3). Найменування дано за характерним виглядом країв трубок, що виходять у цих випадках. Усі інші нанотрубки називаються хіральними, оскільки мають спіральність із різними кутами закручування спіралі.

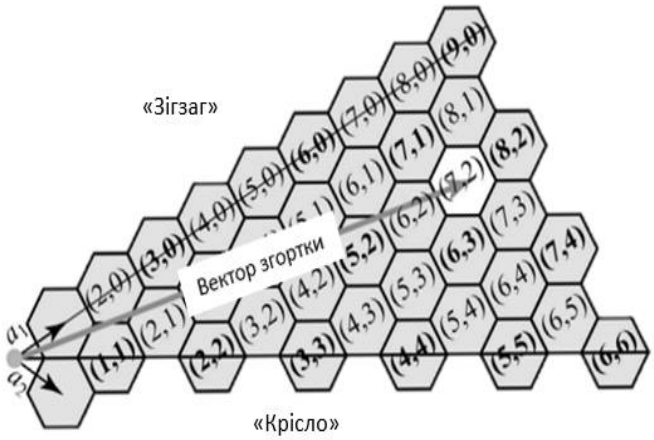


Рис.1.2 Схема формування різних нанотрубок

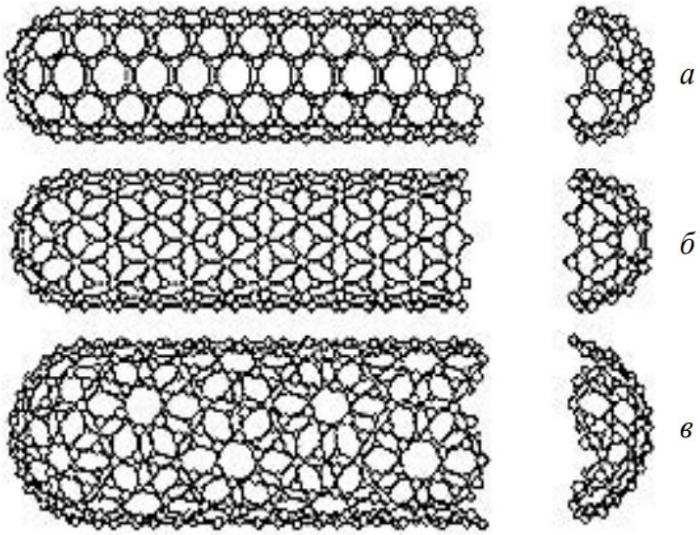


Рис.1.3 Моделі одностінних нанотрубок: (а) $\theta = 30^{\circ}$ «крісло»,

(б) $\theta = 0$ "зігзаг",(в) хіральна нанотрубка

До теперішнього часу залишається відкритим питання, хто перший виявив і дослідив вуглецеві нанотрубки [5]. Однак відомо, що одні з перших згадок про вуглецеві структури, що мають "правильну ниткоподібну форму", відносяться до 1952 року [6]. У цій роботі досліджувалася структура сажі, що утворюється під час термічного розкладання оксиду вуглецю на залізному

контакті. Згодом розвиток просвічувальної електронної мікроскопії дозволив досягти необхідної роздільної здатності, що дає змогу наочно продемонструвати структуру синтезованого матеріалу.

У відомій роботі 1991 року Суміо Іджіми [7] було досліджено сажу, отриману як побічний продукт під час синтезу фулеренів [8]. При цьому було виявлено багатостінні вуглецеві нанотрубки, що складаються з різного числа концентричних графенових шарів. Багато в чому ця робота послужила поштовхом для широкого дослідження вуглецевих нанотрубок. Цілеспрямований синтез одностінних нанотрубок було вперше здійснено в 1996 році в групі Смоллі методом каталітичного лазерного випаровування графіту, де як каталізатор було використано суміш Co-Ni [9]. Крім лазерної абляції [9-11], одним із перших методів синтезу ОВНТ є електродуговий метод [12].

В більшості сучасних методів синтезу ОВНТ, таких як каталітичний піроліз вуглецевмісних газів (CVD - Chemical Vapor Deposition) [13-15], розкладання CO при високому тиску (HiPco - High Pressure CO Decomposition) [16, 17] та аерозольний метод [18], як каталізатор використовують частинки металів.

За будь-якого методу синтезу утворюються ОВНТ різних геометрій і діаметрів. Метод синтезу визначає наявність переважаючих геометрій і ширину розподілу нанотрубок за діаметрами. Оскільки електронна структура одностінної вуглецевої нанотрубки залежить від її діаметра і геометрії, для отримання нанотрубок з однаковими властивостями необхідно синтезувати нанотрубки ідентичної геометрії. Досі жоден метод синтезу не дає змоги отримати такі результати. Проте створення каталізатора і підбір температурних параметрів дають змогу істотно скоротити набір синтезованих геометрій ОВНТ [19, 20]. Важливим завданням з точки зору застосування ОВНТ у наноелектроніці є синтез виключно напівпровідникових нанотрубок (без домішки металевих) [21]. Одностінні вуглецеві нанотрубки можуть бути синтезовані дуговим методом у розряді постійного струму [12].

Дуговий метод був запропонований і використовувався для отримання фулеренів і багатошарових вуглецевих нанотрубок [22]. Завдяки модифікації цього методу став можливим синтез виключно одностінних нанотрубок. Схема та фотографія установки для синтезу нанотрубок у розряді постійного струму наведено на рис. 1.4,1.5. Вона являє собою собою вакуумну камеру зі стінками, що охолоджуються водою, і катодом.

Дуговий розряд запалюється між двома вертикально розташованими електродами - катодом і анодом. Графітовий катод (діаметр 20 мм) зафіксований. Порожнистий анод (зовнішній діаметр 6 мм) заповнюється порошками Ni і Y2O3 і подрібненим графітом у співвідношенні 1:1:2 за вагою відповідно. У міру згоряння для збереження 2-мм відстані між електродами анод можна переміщати вертикально за допомогою крокового двигуна. Синтез проводять у гелієвій атмосфері за тиску 500-700 торр. 700 торр. Напруга прикладена безпосередньо до електродів.Струм дугового розряду можна змінювати в межах 45-195 А [23].

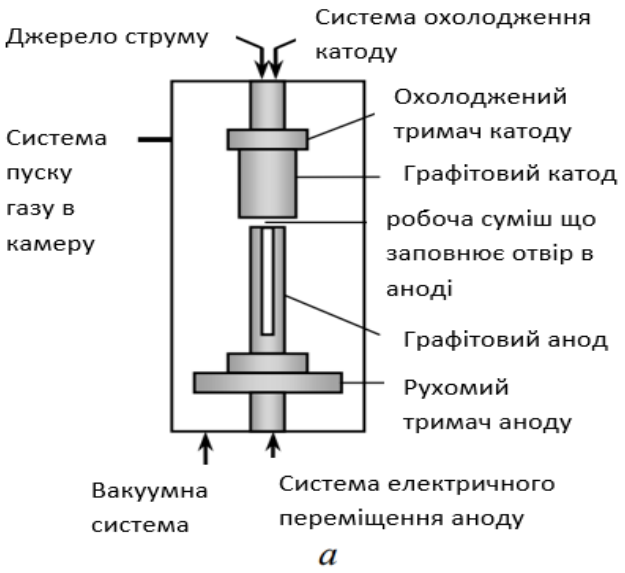


Рис.1.4 Схема (а) установки для синтезу одностінних вуглецевих нанотрубок методом дугового розряду



б

Рис.1.5 Фотографія (б) установки для синтезу одностінних вуглецевих нанотрубок методом дугового розряду

1.2 Класифікація та структура

Вуглецеві нанотрубки – циліндричні структури діаметром від одного до декількох десятків нанометрів, що складаються з однієї або декількох згорнутих в трубку гексагональних графітових площин (графенів) і закінчуються зазвичай напівсферичною голівкою. Нанотрубки класифікують на одностінні, багатостінні.[24]

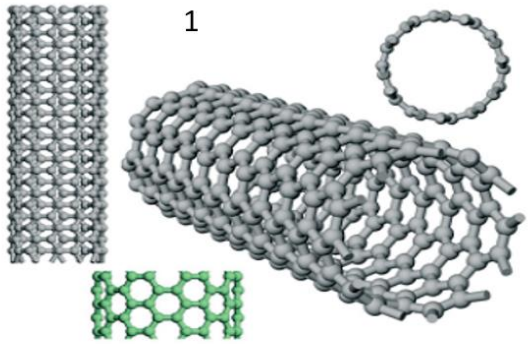


Рис.1.6 (1) Одностінні нанотрубки

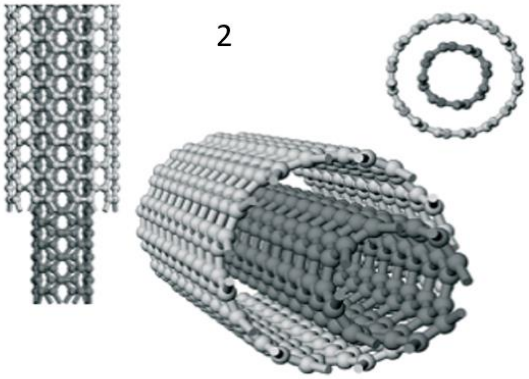


Рис.1.7 (2) Багатостінні нанотрубки

1.3 Властивості та призначенння.

Вуглецеві нанотрубки мають ряд властивостей, які слід відмітити:

1. Фізико-технічні властивості. Ці властивості обумовлені високою міцністю вуглець-вуглецевих зв'язків, сітчастою гексагональною будовою і відсутністю дефектів, а також тим, що довжина нанотрубок в десятки разів перевищує діаметр. Нанотрубки в 10 разів міцніші і в 6 разів легші за сталь.

2.Електричні властивості. Ці властивості нанотрубок пов'язані з тим, що атоми вуглецю мають потрійну координацію, а тому нанотрубки – це ароматичні системи, у яких три із чотирьох валентних електронів беруть участь в утворенні сигма(σ)-зв'язків, а четвертий утворює пі(π)-зв'язок. Саме пі(π)-електрони завдяки слабким зв'язкам переносять заряд [25].

3. Оптичні властивості. Через те, що напівпровідникові нанотрубки є напівпровідниками, в них проходить рекомбінація електроннодіркових пар, що призводить до ефективного вивільнення фотона – випромінювальної рекомбінації. Тому нанотрубки включені в число матеріалів оптоелектроніки.

Унікальні властивості вуглецевих нанотрубок обумовлюють їх перспективне використання в ряді галузей: як армуючих добавок в композиційних матеріалах, для одержання електропровідних композиційних

полімерів, як добавка в метали для одержання надпровідникових матеріалів, компонент холодних емісійних катодів в дисплеях, якісно нове джерело світла, напівпровідникові транзистори з p-n переходами, для виробництва особливих марок графіту, пористого графіту, сировина для виробництва теплоізоляційних матеріалів, як сорбен.

РОЗДІЛ 2. ПРОЦЕДУРА МОДЕЛЮВАННЯ

Пропонований метод моделювання наноструктурних матеріалів з використанням еквівалентного континууму викладений нижче. Оскільки підхід використовує енергетичні терміни, які пов'язані з молекулярною механікою моделювання, спочатку дається короткий опис молекулярної механіки, а потім викладено суть еквівалентно-фермової та еквівалентно-континуальної моделі розвитку.

2.1 Молекулярна потенннціальна енергія.

Важливою складовою в молекулярній механіці розрахунків наноструктури матеріалу є опис сил між окремими атомами. Цей опис характеризується силовим полем. У найбільш загальному вигляді повна молекулярна потенціальна енергія, E^{nsm}, для наноструктурованого матеріалу описується сумою багатьох індивідуальних внесків енергії:

$$E^{nsm} = \sum E^{\rho} + \sum E^{\theta} + \sum E^{\tau} + \sum E^{\omega} + \sum E^{vdW} + \sum E^{el} \qquad (2.1)$$

де $E^{\rho}, E^{\theta}, E^{\tau}, E^{\omega}$ - це енергії, які пов'язані з розтягуванням зв'язку, зміною кута, крученням та інверсією, відповідно. [26] Енергії незв'язаної взаємодії складаються з ван-дер-ваальсової, E^{vdW}, та електростатичного, E^{el}, доданків. Сумування відбувається за всіх відповідних взаємодій у розглянутому об'ємі наноструктурованого матеріалу.

Для цих енергетичних доданків можуть бути використані різні функціональні форми в залежності від конкретного матеріалу та умов навантаження, що розглядаються [27]. Отримання точних параметрів силового поля зводиться до підбору набору експериментальних або розрахункових даних до прийнятої функціональної форми, зокрема, силових констант і структури рівноваги. У ситуаціях, коли експериментальні дані або недоступні, або їх дуже важко виміряти, квантово-механічні розрахунки можуть бути джерелом інформації для визначення силового поля.

2.2 Модель Фермі.

Для спрощення розрахунку повної молекулярної потенціальної енергії молекулярних моделей зі складною молекулярною структурою та умовами навантаження проміжна модель може бути використана для заміни молекулярну модель.

Внаслідок природи молекулярних силових полів, проміжна модель може бути використана для представлення енергій, заданих рівнянням (2.1), де кожен елемент фермі представляє сили між двома атомами.

Таким чином, Фермова модель дозволяє описати механічну поведінку наноструктурованої системи щоб бути точно змодельованою з точки зору переміщень атомів. Таке механічне представлення поведінки решітки служить проміжним етапом у зв'язуванні молекулярного потенціалу з еквівалентно-континуальною моделлю.

У Фермової моделі кожен елемент фермі відповідає хімічному зв'язку або значній незв'язаній взаємодії. Потенціал розтягування кожного зв'язку відповідає розтягуванню відповідного елемента фермі. Традиційно атоми в кристалічній решітці розглядаються як маси, які утримуються на місці атомними силами, які нагадують пружні пружини [28]. Тому для моделювання хімічних зв'язків згинання елементів фермі не потрібне, а передбачається, що кожне з'єднання фермі є штифтовим, а не фіксованим.

Енергія механічної деформації, Λ^t моделі фермі виражається у вигляді:

$$\Lambda^{\mathrm{t}} = \sum_{\mathrm{n}} \sum_{\mathrm{m}} \frac{\mathrm{A}_{\mathrm{m}}^{\mathrm{n}} \mathrm{Y}_{\mathrm{m}}^{\mathrm{n}}}{2\mathrm{R}_{\mathrm{m}}^{\mathrm{n}}} (\mathrm{r}_{\mathrm{m}}^{\mathrm{n}} - \mathrm{R}_{\mathrm{m}}^{\mathrm{n}})^2 \qquad (2.2)$$

де A_m^n і Y_m^n - площа поперечного перерізу та модуль Юнга відповідно стержня фермі m типу n; $\mathrm{R}_{\mathrm{m}}^{\mathrm{n}}$, $\mathrm{r}_{\mathrm{m}}^{\mathrm{n}}$ є недеформовані і деформовані довжини елементів фермі та розтягненням стержня m елементу фермі типу n.

Для того, щоб представити хімічну поведінку за допомогою фермовою моделлю, рівняння (2.2) необхідно прирівняти до рівняння (2.1) у фізично значущим чином. Кожне з двох рівнянь є сумою енергій для окремих ступенів свободи.

Основна складність при підстановці полягає в уточненні рівняння (2.2), яке має тільки члени розтягування, для рівняння (2.1), в якому є також дисперсія кута зв'язку та кручення. Не можна зробити узагальнення для подолання цих труднощів для кожної наноструктурованої системи. Здійсненне рішення повинно бути визначено для конкретного наноструктурованого матеріалу в залежності від геометрії, умов навантаження і ступеня точності, яка потрібна в моделі.

2.3 Еквівалентно-континуальна модель.

Протягом багатьох років дослідники розробляли методи моделювання великомасштабних фермових конструкцій з використанням еквівалентних континуальних моделей [29-34]. Ці дослідження показують, що різні методи та припущення були використані для розробки еквівалентних континуальних моделей, які адекватно представляють фермові конструкції.

В загальному випадку еквівалентно-континуальна модель визначається як континуум, який має наступні характеристики:

1. Фермові решітки зі штирьовими з'єднаннями моделюються як класичні континууми, де не потрібно робити жодних припущень щодо мікрополярності [35] континууму.

2. Враховуються локальні деформації.

3. Розподіл температури, навантаження та граничні умови суцільної моделі імітують розподіл температури, навантаження та граничні умови фермової моделі.

4. Однакова кількість енергії термопружної деформації зберігається в обох моделях при деформації однаковими умовами статичного навантаження.

Параметри еквівалентно-континуальної моделі, такі як пружні властивості та геометрія, визначаються на основі наведених вище характеристик.

У деяких випадках енергія деформації суцільного середовища, може бути легко аналітично і порівнюється безпосередньо з рівнянням (2.2) для отримання еквівалентної енергії деформації континууму (2.2) для отримання еквівалентно-континуальних властивостей. В інших випадках, особливо зі складною геометрією та деформаціями, для визначення параметрів континууму необхідно використовувати чисельні методи. Після того, як властивості еквівалентно-континуальної моделі визначені, механічну поведінку більших структур, що складаються з наноструктурованого матеріалу, можна передбачити використовуючи стандартний інструментарій механіки суцільних середовищ.

2.4 Репрезентативний об'ємний елемент.

Для зменшення обчислювального часу, пов'язаного з моделюванням графенового листа, був використаний репрезентативний об'ємний елемент РОЕ (рис.2.1). Обраний (РОЕ) дозволяє врахувати кожну ступінь свободи атома вуглецю, пов'язану з розтягуванням зв'язків, а також варіацію кута зв'язку та зміною кута зв'язку в гексагональному кільці, щоб бути повністю змоделюваним за допомогою фермової та континуальної скінченно-елементної моделі з вузловими зміщеннями ступенів свободи.

Крім того, цей (РОЕ) дозволяє точно узгодити переміщення на межі запропонованих хімічної, фермової та континуальної моделей між собою. Крім того, макроскопічні умови навантаження суцільної графенової пластини можуть бути легко зведені до періодичних граничних умов, які накладаються на РОЕ.

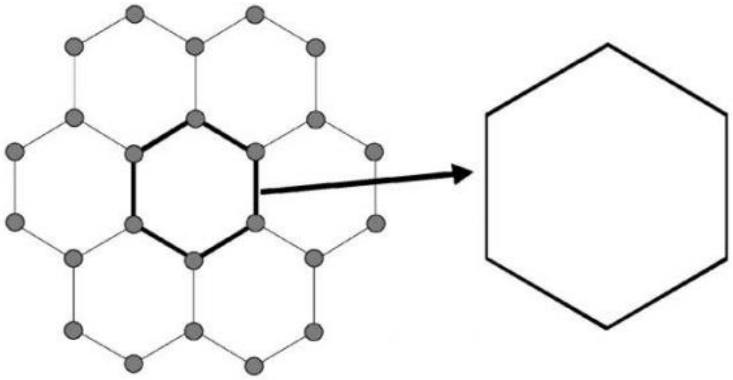


Рис.2.1 Репрезентативний об’ємний елемент графенового листа

2.5 Модель молекулярної механіки.

Конкретні форми енергетичних доданків у рівнянні (2.1), що використовуються в цьому прикладі, були взяті з силового поля AMBER Коллмана і співробітників [36,37]. У зв'язку з характером матеріалу та умов навантаження в даній роботі, були враховані лише розтягнення зв'язків та варіації кута зв'язку. Кручення, інверсія та незв'язані взаємодії вважалися незначними для випадку графенової ґратки, що зазнає малих деформацій.

Для цього прикладу молекулярна потенціальна енергія графенового листа зі зв'язками вуглець-вуглець виражається у вигляді суми простих гармонічних функцій:

$$E^g = \sum_m K_m^\rho \, (\rho_m - \rho_m)^2 + \sum_m K_m^\theta \, (\theta_m - \theta_m)^2 \qquad (2.3)$$

де члени ρ_m і θ_m відносяться до недеформованої міжатомної відстані зчеплення m і недеформованого куту зчеплення m, відповідно. Величини ρ_m і θ_m довжина зв'язку та кут після розтягування відповідно (див. рис. 2.2). K_m^ρ та K_m^θ це силові константи пов'язані з розтягуванням і кутовою дисперсією зв'язку та кута зв'язку m, відповідно.

Використовуючи параметри силового поля AMBER [36], силові константи, використані в даному прикладі, становлять:

$$K^{\rho} = 46900 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}\cdot\text{nm}^2} = 3.26 \cdot 10^{-7} \frac{\text{nJ}}{\text{bond}\cdot\text{nm}^2}$$

$$K^{\theta} = 63 \frac{\text{kcal}}{\text{mol}\cdot\text{rad}^2} = 4.38 \cdot 10^{-10} \frac{\text{nJ}}{\text{angle}\cdot\text{rad}^2} \qquad (2.4)$$

Рівноважна довжина зв'язку ρ_m становить 0.140nm, а недеформований кут зв'язку θ_m становить 120°.

Щоб виразити механічну енергію деформації Λ^t моделі фермі в термінах змінного фермового об'єднання кутів, які задаються в молекулярній механіці $(\theta_m - \theta_m)$ POE був змодельований з додатковими стрижнями між майже сусідніми з'єднаннями, щоб представити взаємодію між відповідними атомами вуглецю (рис. 2.2).

Для того, щоб представити хімічну модель, яка має розтягнення зв'язків та змінні кути як ступені свободи, за допомогою моделі фермі, яка має тільки ступені свободи розтягування вводяться два типи пружних стержнів, a і b, які входять до складу фермового POE.

В якості альтернативи для моделювання зміни кута зв'язку може бути використаний торсійний елемент пружини, однак при цьому кількість ступенів свободи кожного з'єднання ферми (і складність моделі) значно збільшується. Енергія механічної деформації Λ^t дискретної фермової системи, зображеної на рис.2.2, виражається у вигляді рівняння (2.2) :

$$\Lambda^{t} = \sum_{m} \frac{A_m^a Y_m^a}{2R_m^a} (r_m^a - R_m^a)^2 + \sum_{m} \frac{A_m^b Y_m^b}{2R_m^b} (r_m^b - R_m^b)^2 \qquad (2.5)$$

де надрядкові індекси відповідають типам стрижнів a та b, відповідно. Порівнюючи рівняння (2.3) і (2.5), видно, що член розтягування зв'язку в рівнянні (2.3) може бути пов'язаний з першим членом рівняння (2.5) для стержнів типу a:

$$K_m^{\rho} = \frac{A_m^a Y_m^a}{2R_m^a} \qquad (2.6)$$

де передбачається, що $\rho_m = r_m^a$ і $\rho_m = R_m^a$.

Однак, другі доданки в рівняннях (2.3) і (2.5) не можуть бути пов'язані безпосередньо. Для того, щоб прирівняти константи, кут хімічного зв'язку повинен бути виражений через пружне розтягнення елементів ферми типу b.

Для простоти можна припустити, що задані умови навантаження складаються тільки з малих пружних деформацій, хоча в загальному випадку запропонований підхід до моделювання може бути застосований і до більших деформацій. Таке припущення не є надмірним спрощенням для графенового листа, оскільки деформації для високожорстких лінійно-пружних матеріалів, що піддаються багатьом практичним умовам навантаження є досить малими.

Для того, щоб виразити модуль Юнга стержнів типу b через силову константу кута зв'язку, була встановлена залежність між зміною кута зв'язку і відповідною зміною довжини елемента ферми типу b необхідна. Якщо припустити, що зміни кута зв'язку малі, то це легко показати (див. рис. 2.3):

$$\theta_m - \square_m \approx \frac{2(r_m^b - R_m^b)}{R_m^a} \qquad (2.7)$$

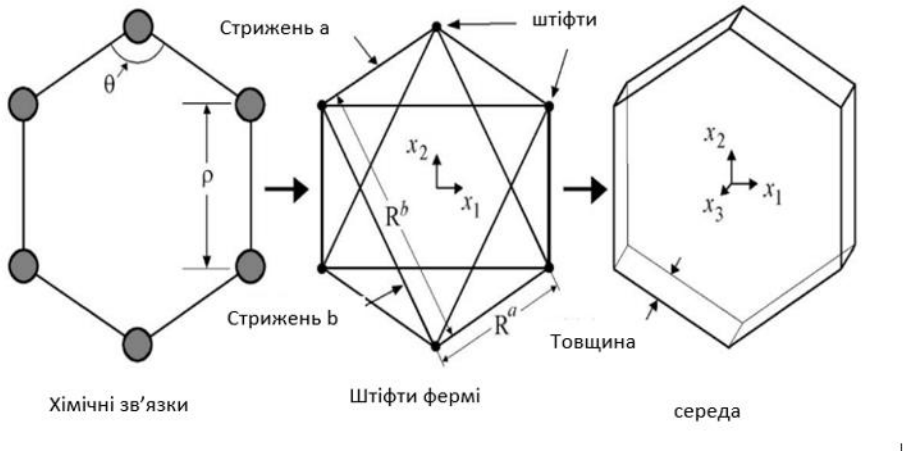


Рис.2.2 Репрезентативні об'ємні елементи для хімічної, фермової та середовищної моделей

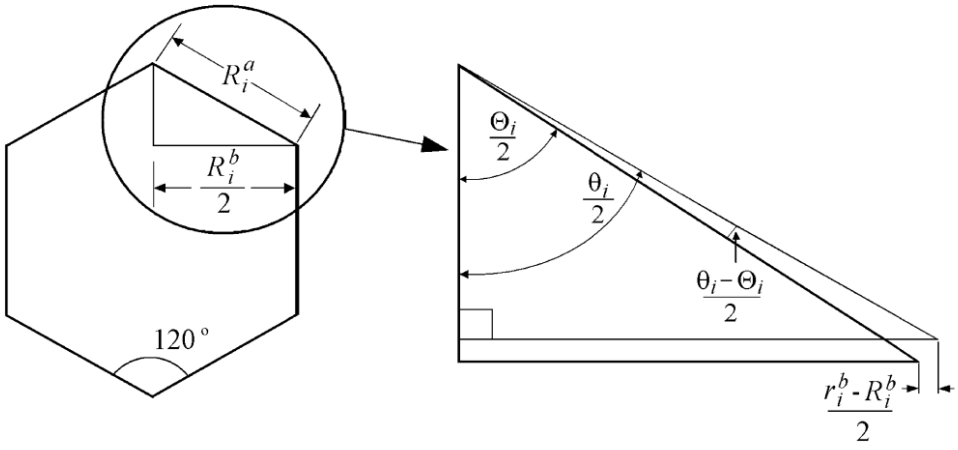


Рис.2.3 Схема деформованої геометрії репрезентативного об'ємного елемента

Права частина рівняння (2.7) в чотири рази більша правої частини рівняння (2.6), наведеної Одегардом та ін. [38]. Така розбіжність пояснюється покращенням припущень, використаних для виведення рівняння (2.7) в даному дослідженні.

Підстановка рівняння (2.7) в рівняння (2.3) та (2.5) призводить до наступної апроксимації:

$$K_m^\theta = \frac{R_m^b A_m^b Y_m^b}{24} \tag{2.8}$$

Таким чином, модулі Юнга для двох типів стержнів рівні:

$$Y_m^a = \frac{2K_m^\rho R_m^a}{A_m^a}$$

$$Y_m^b = \frac{24K_m^\theta}{R_m^b A_b^m} \tag{2.9}$$

Тоді енергія деформації моделі фермі може бути виражена через силові константи:

$$\Lambda^t = \sum_m K^\rho (r_m^a - R_m^a)^2 + \sum_m \frac{12K^\theta}{(R_m^b)^2} (r_m^b - R_m^b)^2 \tag{2.10}$$

Працюючи з припущеннями, обговореними в цій статті, наступним кроком у зв'язуванні молекулярної та континуальної моделей є заміна еквівалентно-фермової моделі на еквівалентно-суцільну пластину скінченної товщини (рис.2.2). Для даного прикладу передбачається, що фермова і суцільна моделі еквівалентні, коли енергія пружних деформацій, запасена в обох моделях, є рівною при однакових граничних умовах переміщень.

Значення товщини пластини, що призводить до рівних енергій деформацій є прийнятою ефективною товщиною графенового листа. В той час як механічні властивості елементів фермі були визначені, як описано вище, властивості графенового листа були взяті з літературних джерел. Значення для плоских механічних властивостей графіту були виміряні макроскопічно, тобто без будь-яких припущень щодо товщини графенового листа.

Для даного прикладу значення модуля Юнга та коефіцієнта Пуассона об'ємного графіту становлять відповідно [26]:

$$\mathrm{Y}^{\mathrm{g}} = 1008\mathrm{GPa} \text{ і } \nu = 0.145$$

Для спрощення вважатимемо, графіт ізотропним, оскільки позаплощинні деформації тут не розглядаються. Враховуючи, що немає узгоджених даних про властивості окремого графенового листа, ці властивості ґрунтуються на площинних властивостях об'ємного графіту.

2.5 Граничні умови.

З метою визначення ефективної товщини пластини, як для фермової, так і для суцільної моделі були застосовані трьом наборам умов навантаження.

Для кожного набору умов навантаження було визначено відповідну ефективну товщину. Умови навантаження відповідають трьом основним плоским деформаціям пластини, тобто рівномірному осьовому розтягу вздовж осей x_1 і x_2та чистому зсуву навантаження в площині x_1 і x_2. Для одновісної

деформації вздовж напрямку x_2 (випадок навантаження I) на РОЕ можуть бути накладені наступні граничні умови (рис. 2.4) [38]:

$$u_1 = -v\varepsilon x_1 \qquad u_2 = \varepsilon x_2 \qquad u_3 = -v\varepsilon x_3 \tag{2.11}$$

де компоненти зміщення паралельні відповідним координатам РОЕ. Повна енергія деформації може бути розрахована за допомогою [39]:

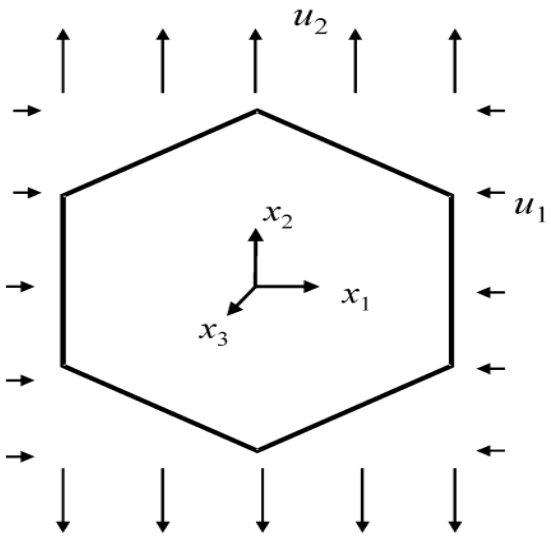


Рис.2.4 Варіант навантаження I: подовження вздовж x_2

$$\Lambda^c = \frac{VY^g}{2(1+v)}\left[\frac{v}{1-2v}\varepsilon_{kk}{}^2 + \varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij}\right] \tag{2.12}$$

де V - об'єм РОЕ, i,j,k=1,2,3 (з використанням сумарних позначень), а компоненти тензора деформації, ε_{ij} , задаються формулами:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right) \tag{2.13}$$

Для РОЕ за умов, наведених у рівнянні (2.11):

$$\Lambda^c = \frac{3\sqrt{3}}{4}(R^a)^2 t Y^g \varepsilon^2 \tag{2.14}$$

де t - товщина суцільної пластини. Для одновісної деформації вздовж напрямку x_1(випадок навантаження II) граничні умови мають вигляд (рис.2.5) [38]:

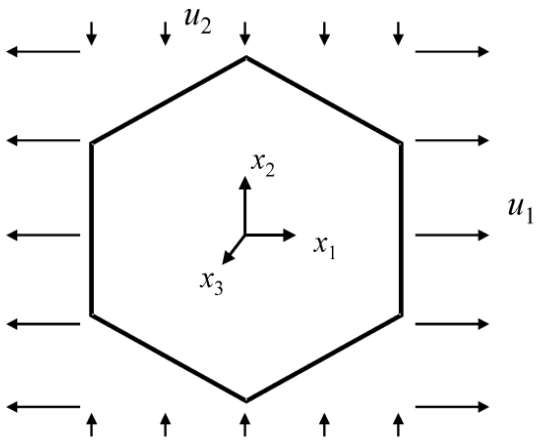


Рис.2.5 Варіант навантаження II: подовження вздовж x_1

$$u_1 = \varepsilon x_1 \quad u_2 = -v\varepsilon x_2 \quad u_3 = -v\varepsilon x_3 \tag{2.15}$$

Повна енергія деформації еквівалентного континууму РОЕ за цієї умови визначається рівнянням (2.14). Для чистої деформації зсуву в площині $x_1 - x_2$ (випадок навантаження III) на РОЕ можуть бути накладені наступні граничні умови (рис.2.6) [38]:

$$u_1 = 0\,,\, u_2 = \gamma x_1\,,\, u_3 = 0 \tag{2.16}$$

Повна енергія деформації еквівалентного континууму РОЕ за цієї умови дорівнює:

$$\Lambda^c = \frac{3\sqrt{3}}{8}(R^a)^2 t \frac{Y^g}{(1+v)}\gamma^2 \tag{2.17}$$

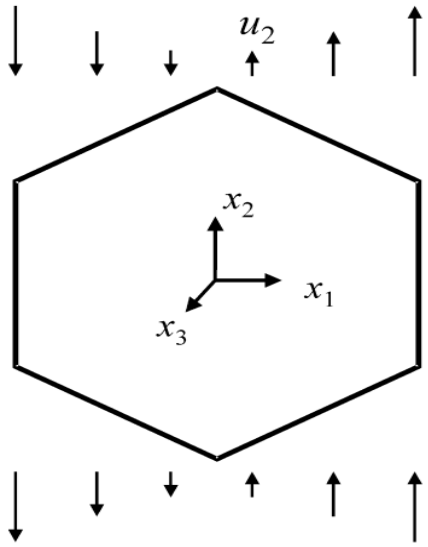


Рис.2.6 Випадок навантаження III: чистий зсув

Енергія деформації моделі фермі була розрахована методом скінченних елементів (ANSYS) для всіх трьох граничних умов. Енергії деформації кожного елемента фермі були підсумовані для отримання загальної енергії деформації для РОЕ. Отримана енергія деформації прирівнювалася до рівняння (2.14) або (2.17) для випадків навантаження I і II або III відповідно, і визначалася відповідна ефективна товщина еквівалентно-континуальної пластини t.

Кожен розтяжний стержень моделювався за допомогою скінченного фермового елемента з двома ступенями свободи в кожному вузлі (переміщення паралельні осям x_1і x_2). Площі поперечних перерізів стержнів типу a ділилися в 2 рази, оскільки ці стержні ділять свою загальну площу з сусідніми РОЕ.

Для випадків навантаження I і II, результуюча ефективна товщина була розрахована на рівні 0,69 нм.

Для випадку навантаження III ефективна товщина склала 0,57 нм. Ці значення значно перевищують загальноприйняте значення для міжплощинної відстані графіту, 0,34 нм, і набагато більше значення, запропонованого Якобсоном та ін. [40] 0,066 нм.

Можна припустити, що при одновісному навантаженні вуглецевої нанотрубки, коли сила і деформація відомі, модуль Юнга визначається за формулою:

$$Y^{nt} \infty (A^{nt})^{-1} \tag{2.18}$$

де A^{nt} - площа поперечного перерізу порожнистого суцільного циліндра з постійним радіусом середньої площини r^c .

Внутрішній радіус r_i^c і зовнішній радіус r_0^c , трубки дорівнюють (Рис.2.7)

$$r_i^c = r^c - \frac{t}{2} \quad r_0^c = r^c + \frac{t}{2} \tag{2.19}$$

де $r^c \geq {}^t/_2$.

Площа поперечного перерізу порожнистогосуцільного циліндра дорівнює:

$$A^{nt} = 2\pi t r^c \tag{2.20}$$

Розраховані площі поперечних перерізів з використанням отриманих вище значень ефективної товщини, наведені в табл. 1.

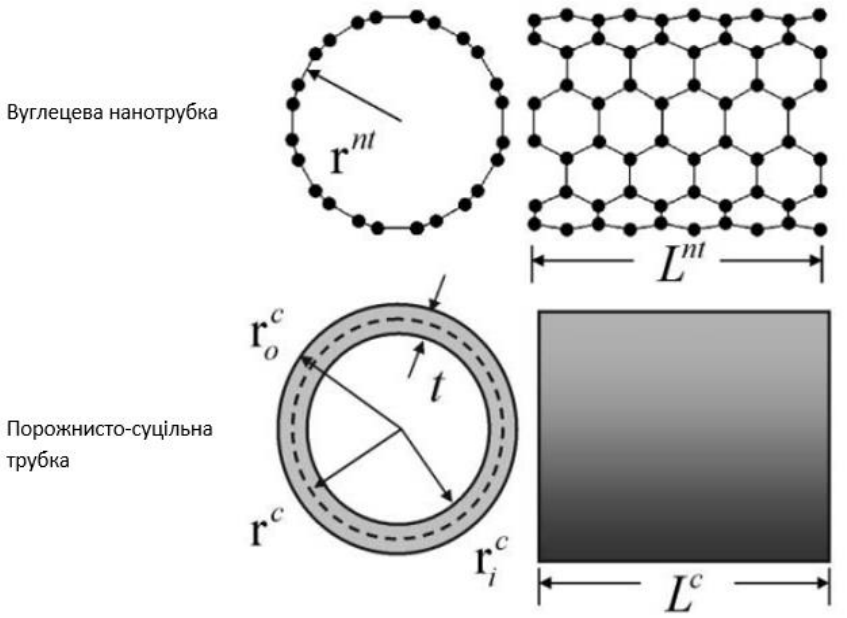


Рис.2.7 Геометрія вуглецевої нанотрубки та порожниста-суцільної трубки

Співвідношення розрахованого модуля Юнга в залежності від ефективної товщини, отримані для трьох випадків навантаження, їх середнє значення, від Якобсона та ін. [40] до модуля Юнга на основі міжплощинних відстаней, також наведені в табл. 1. При цьому передбачалося, що механічні властивості стінки ВНТ дорівнюють властивостям еквівалентної пластинчастої моделі.

Результати, наведені в табл. 1, свідчать про те, що виміряні та розраховані значення механічних властивостей вуглецевих нанотрубок, які залежать від розмірів порожнистої трубки можуть суттєво відрізнятися в залежності від прийнятої геометрії.

Таблиця 1

Відношення розрахованого модуля Юнга для різних товщин стінок СВНТ по відношенню до модуля Юнга, розрахованого з урахуванням міжплощинної відстані.

	Товщина порожнистої стінки(нм).	Порожниста площа поперечного перерізу.	Коефіцієнти модулів Юнга.
Навантаження I і II	0.69	$4.34r^c$	0.49
Навантаження III	0.57	$3.58r^c$	0.60
Середня навантаження I,II,III.	0.65	$4.08r^c$	0.52
Якобсон та ін. (1996)	0.07	$0.44r^c$	4.86
Міжплощинна відстань.	0.34	$2.14r^c$	1.00

РОЗДІЛ 3. ОСНОВНІ РІВНЯННЯ ТЕОРІЇ ПРУЖНОСТІ

3.1.Тензор деформації

Механіка твердих тіл, що розглядаються як суцільні середовища, становить зміст теорії пружності .

Під впливом прикладених сил тверді тіла тією чи іншою мірою деформуються, тобто змінюють свою форму та об'єм. Для математичного опису деформації тіла надходять таким чином. Положення кожної точки тіла визначається її радіус-вектором r (з компонентами $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$) у деякій системі координат[41].

Під час деформування тіла всі його точки, загалом кажучи, зміщуються. Розглянемо яку-небудь певну точку тіла; якщо її радіус-вектор до деформування був r, то в деформованому тілі він матиме деяке інше значення r' (з компонентами x_i'). Зміщення точки тіла під час деформування зобразиться тоді вектором $r' - r$, який ми позначимо за допомогою u:

$$u = x_i' - x_i \tag{3.1}$$

Вектор u називають вектором деформації (або вектором зміщення). Координати x_i' зміщеної точки є, звісно, функціями від координат x_i, тієї ж точки до її зміщення. Тому й вектор деформації є функцією координат x_i. Завдання вектора u як функцій від x_i повністю визначає деформацію тіла.При деформації тіла змінюються відстані між його точками.

Розглянемо які-небудь дві нескінченно близькі точки. Якщо радіус-вектор між ними до деформування був dx_i, то в деформованому тілі радіус-вектор між тими ж двома точками буде $dx_i' = dx_i - du_i$. Сама відстань між точками дорівнювала до деформування:

$$dl = \sqrt{dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2} \tag{3.2}$$

А після деформування :

$$dl' = \sqrt{dx_1'^2 + dx_2'^2 + dx_3'^2} \tag{3.3}$$

Попередньо провівши всі маніпуляції отримуємо кінцевий результат рівняння:

$$dl'^2 = dl^2 + 2u_{ik}dx_i dx_k \tag{3.4}$$

де$u_{ik} = \frac{1}{2}(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l}{\partial x_i}\frac{\partial u_l}{\partial x_k})$ (3.5)

Цими виразами визначається зміна елемента довжини під час деформування тіла. Тензор u_{ik} називають тензором деформації; за своїм визначенням він симетричний:

$$u_{ik} = u_{ki} \tag{3.6}$$

Як і всякий симетричний тензор, можна привести тензор u_{ik} у кожній даній точці до головних осей. Це означає, що в кожній даній точці можна вибрати таку систему координат - головні осі тензора, - в якій з усіх компонент u_{ik} відмінні від нуля тільки діагональні компоненти u_{11}, u_{22}, u_{33}.

Ці компоненти - головні значення тензора деформації - позначимо за допомогою $u^{(1)}, u^{(2)}, u^{(3)}$. Треба, звісно, пам'ятати, що якщо тензор u_{ik} наведено до головних осей у деякій точці тіла, то він недіагональний у всіх інших точках.

Практично майже у всіх випадках деформування тіл деформації виявляються малими. Це означає, що зміна [41] будь-якої відстані в тілі виявляється малою порівняно із самою відстанню. Іншими словами, відносні подовження малі порівняно з одиницею. Нижче ми будемо розглядати всі деформації як малі.

Якщо тіло піддається малій деформації, то всі компоненти тензора деформації, що визначає, як ми бачили, відносні зміни довжин у тілі, є малими.

Що ж стосується вектора деформації, то він може бути в деяких випадках великим навіть за малих деформацій.

Розглянемо, наприклад, довгий тонкий стрижень. Навіть у разі сильного вигину, коли його кінці значно переміститься в просторі, розтягнення і стиснення всередині самого стрижня будуть незначними.

За винятком таких особливих випадків , за малих деформацій є малим також і вектор деформації. Справді, жодне "тривимірне" тіло (тобто тіло, розміри якого не є специфічно малими в жодному напрямку) не може бути, вочевидь, деформоване так, щоб окремі його частини сильно перемістились у просторі, без виникнення в тілі сильних розтягувань і стиснень.

У загальному виразі (3.5) можна знехтувати останнім членом до малої величини другого порядку. Таким чином, у разі малих деформацій тензор деформації визначається виразом:

$$u_{ik} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right) \tag{3.7}$$

Розглянемо який-небудь нескінченно малий елемент об'єму dV і визначимо його величину dV' після деформування тіла. Для цього виберемо в якості осі координат головні осі тензора деформації в розглянутій точці. Тоді елементи довжини dx_1, dx_2, dx_3 уздовж цих осей після деформування перейдуть у $dx_1' = (1 + u^{(1)})dx_1$ і т. д. Об'єм dV є добуток dx_1, dx_2, dx_3, об'єм же dV' дорівнює dx_1', dx_2', dx_3'.

Таким чином, $dV' = dV(1 + u^{(1)} + u^{(2)} + u^{(3)})$.

Але сума $u^{(1)} + u^{(2)} + u^{(3)}$ головних значень тензора є, як відомо, його інваріантом і дорівнює в будь-якій системі координат сумі діагональних компонент $u_{ii} = u_{11} + u_{22} + u_{33}$.

Таким чином,

$$dV' = (1 + u_{ii}) \tag{3.8}$$

Ми бачимо, що сума діагональних компонент тензора деформації дає відносну зміну об'єму $(dV' - dV)/dV$. Часто буває зручним користуватися компонентами тензора деформації не в декартових, а в сферичних або циліндричних координатах.

Наведемо тут для довідок відповідні формули, що виражають ці компоненти через похідні від компонент вектора зміщення в тих самих координатах. У сферичних координатах r, θ, φ маємо

$$u_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r}, u_{\theta\theta} = \frac{1}{r}\frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r}, u_{\varphi\varphi} = \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{u_\theta}{r}\cot\theta + \frac{u_r}{r}, 2u_{\theta\varphi} = \frac{1}{r}\left(\frac{\partial u_\varphi}{\partial \theta} - u_\varphi \cot\theta\right) + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial u_\theta}{\partial \varphi}, 2u_{r\theta}\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial u_\theta}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial u_r}{\partial \theta}, 2u_{\varphi r} = \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial u_r}{\partial \varphi} + \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} - \frac{u_\varphi}{r} \tag{3.9}$$

В циліндричніих координатах r, φ, z

$$u_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r}, u_{\varphi\varphi} = \frac{1}{r}\frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{u_r}{r}, u_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z}, 2u_{\varphi z} = \frac{1}{r}\frac{\partial u_z}{\partial \varphi} + \frac{\partial u_\varphi}{\partial z}, 2u_{rz} = \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r}, 2u_{r\varphi} = \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} - \frac{u_\varphi}{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial u_r}{\partial \varphi} \tag{3.10}$$

3.2.Тензор напруження

У недеформованому тілі розташування молекул відповідає стану його теплової рівноваги. При цьому всі його частини перебувають одна з одною і в механічній рівновазі. Це означає, що якщо виділити всередині тіла який-небудь об'єм, то рівно-діюча всіх сил, що діють на цей об'єм з боку інших частин, дорівнює нулю [41].

При деформуванні ж розташування молекул змінюється і тіло виводиться зі стану рівноваги, в якому воно перебувало спочатку. У результаті в ньому

виникають сили, що прагнуть повернути тіло в стан рівноваги. Ці внутрішні сили, що виникають під час деформування, називаються внутрішніми напруженнями. Якщо тіло не деформоване, то внутрішні напруження в ньому відсутні.

Внутрішні напруження зумовлюються молекулярними силами, тобто силами взаємодії молекул тіла одна з одною. Вельми істотним для теорії пружності є та обставина, що молекулярні сили мають дуже незначний радіус дії. Їхній вплив простягається навколо частинки, що їх створює, лише на відстанях порядку міжмолекулярних. Але в теорії пружності, як у макроскопічній теорії, розглядаються тільки відстані, більші порівняно з міжмолекулярними. Тому "радіус дії" молекулярних сил у теорії пружності слід вважати рівним нулю.

Можна сказати, що сили, які зумовлюють внутрішні напруження, є в теорії пружності силами "близькодіючими", що передаються від кожної точки тільки до найближчих з нею. Звідси випливає, що сили, які чиняться на яку-небудь частину тіла з боку навколишніх її частин, діють тільки безпосередньо через поверхню цієї частини.

Тут необхідне таке застереження: зроблене твердження несправедливо в тих випадках, коли деформування тіла супроводжується появою в ньому макроскопічних електричних полів [41].

Виділимо в тілі який-небудь об'єм і розглянемо сумарну силу, що діє на нього. З одного боку, ця сумарна сила може бути представлена у вигляді об'ємного інтеграла:

$$\int \boldsymbol{F} dV, \tag{3.11}$$

де **F** - сила, що діє на одиницю об'єму тіла.

З іншого боку, сили, з якими діють одна на одну різні частини самого об'єму, що розглядається, не можуть призвести до явища відмінної від нуля

сумарної рівнодіючої сили, оскільки вони в силу закону рівності дії та протидії в сумі знищують одна одну. Тому шукану повну силу можна розглядати як суму тільки тих сил, які діють на цей об'єм з боку оточуючих його частин тіла.

Але, згідно зі сказаним вище, ці сили діють на об'єм, що розглядається, через його поверхню, і тому результуючу силу можна подати як суму сил, що діють на кожен елемент поверхні об'єму, тобто як певний індекс по цій поверхні.

Таким чином, для будь-якого об'єму тіла кожна з трьох компонентів $\int \boldsymbol{F_i} dV$ рівнодійності всіх внутрішніх напружень може бути перетворена в інтеграл по поверхні цього об'єму [41].

Як відомо з векторного аналізу, інтеграл від скаляра за довільним об'ємом може бути перетворений в інтеграл по поверхні в тому разі, якщо цей скаляр є дивергенцією деякого вектора. У цьому разі ми маємо справу з інтегралом не від скаляра, а від вектора. Тому вектор **F**, повинен бути дивергенцією деякого тензора другого рангу, тобто мати вигляд :

$$F_i = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} \tag{3.12}$$

Тоді сила, що діє на деякий об'єм, може бути написана у вигляді інтеграла по замкнутій поверхні, що охоплює цей об'єм :

$$\int F_i dV = \int \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} dV = \oint \sigma_{ik} df_k \tag{3.13}$$

Звідси знаходимо тензор M_{ik}:

$$M_{ik} = \oint (\sigma_{il} x_r - \sigma_{kl} x_i) df_l + \int (\sigma_{ki} - \sigma_{ik}) dV \tag{3.14}$$

Тензор M_{ik} буде виражений у вигляді інтеграла тільки по поверхні, якщо тензор напружень симетричний,

$$\sigma_{ik} = \sigma_{ki} \tag{3.15}$$

так що об'ємний інтеграл зникає.

Момент сил, що діють на деякий об'єм тіла, представиться тоді у простому вигляді:

$$M_{ik} = \int (F_i x_k - F_k x_i) dV = \oint (\sigma_{il} x_k - \sigma_{kl} x_i) df_l$$

(3.16)

Легко написати тензор напружень у випадку рівномірного всебічного стиснення тіла. За такого стиснення на кожну одиницю поверхні тіла діє однаковий за величиною тиск, спрямований скрізь по нормалі до поверхні всередину об'єму тіла. Якщо позначити цей тиск за допомогою p, то на елемент поверхні df_i, діє сила - pdf_i.

З іншого боку, ця сила, будучи виражена через тензор напружень, повинна мати вигляд $\sigma_{ik} df_k$. Написавши - pdf_i у вигляді - $p\delta_{ik} df_k$, ми бачимо, що тензор напружень за рівномірного всебічного стиснення має такий вигляд:

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik} \qquad (3.17)$$

Усі відмінні від нуля його компоненти дорівнюють просто тиску. У загальному випадку довільної деформації відмінні від нуля також і недіагональні компоненти тензора напружень[41].

Це означає, що на кожен елемент поверхні всередині тіла діє не тільки нормальна до нього сила, а й також і тангенціальні, сколювальні, напруження, які прагнуть зрушити паралельні елементи поверхні один відносно одного [41]. У рівновазі сили внутрішніх напружень повинні взаємно компенсуватися в кожному елементі об'ємі тіла, тобто має бути $F_i = 0$. Таким чином, рівняння рівноваги деформованого тіла мають вигляд:

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} = 0 \qquad (3.18)$$

Якщо тіло перебуває в полі тяжіння, то повинна зникати сума $F + \rho g$сил внутрішніх напружень і сили тяжіння ρg, що діє на одиницю об'єму тіла (ρ-густина), g - вектор прискорення сили тяжіння, спрямований вертикально донизу; рівняння рівноваги в цьому випадку мають вигляд:

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} + \rho g_i = 0$$

(3.19)

Написавши df_kу вигляді $df_k = n_k df$, де n - одиничний вектор, спрямований за зовнішньою нормаллю до поверхні, знаходимо звідси:

$$\sigma_{ik} n_k = P_i \qquad (3.20)$$

Це і є умова, яка має виконуватися на всій поверхні тіла, що перебуває в рівновазі.Скориставшись тим, що $\sigma_{ik} = \sigma_{ki}$ можна написати формулу в симетричному вигляді:

$$\bar{\sigma}_{ik} = \frac{1}{2V} \oint (P_i x_k + P_k x_i) df \qquad (3.21)$$

Таким чином, середнє значення тензора напружень може бути визначено безпосередньо за діючими на тіло зовнішніми силами без попереднього розв'язання рівнянь рівноваги.

Повернемося до наведеного вище доказу симетричності тензора напружень; він потребує уточнення. Поставлену фізичну умову (представленість тензора M_{ik} у вигляді інтеграла тільки по поверхні) буде виконано, не тільки якщо антисиметрична частина тензора σ_{ik}(тобто підінтегральний вираз в об'ємному інтегралі в (3.14) дорівнює нулю, а й якщо вона являє собою деяку повну дивергенцію, тобто якщо

$$\sigma_{ik} - \sigma_{ki} = 2 \frac{\partial}{\partial x_l} \varphi_{ikl}, \varphi_{ikl} = -\varphi_{kil}, \qquad (3.22)$$

де φ_{ikl} - довільний тензор, антисиметричний за першою парою індексів.

У цьому разі цей останній тензор має виражатися через похідні $\frac{\partial u_i}{\partial x_k}$, і відповідно в тендорі напружень виникнуть члени з вищими похідними від вектора зміщення. У межах теорії пружності всі такі члени мають розглядатися як малі вищого порядку й упускатися [41]. З принципового погляду істотно, однак, тензор напружень може бути приведений до симетричного вигляду і без цього. Річ у тім, що визначення цього тензора, згідно з (3.12), неоднозначне - припустиме будь-яке перетворення вигляду

$$\tilde{\sigma}_{ik} - \sigma_{ik} = \frac{\partial}{\partial x_l}\chi_{ikl},\ \chi_{ikl} = -\chi_{ilk} \tag{3.23}$$

Симетричний тензор має вигляд:

$$\tilde{\sigma}_{ik} = \frac{1}{2}(\sigma_{ik} + \sigma_{ki}) + \frac{\partial}{\partial x_l}(\varphi_{ilk} + \varphi_{kli}) \tag{3.24}$$

Дійсно, легко впевнетись ,що різниця $\tilde{\sigma}_{ik} - \sigma_{ik}$ має вигляд(3.23) з тензором :

$$\chi_{ikl} = \varphi_{kli} + \varphi_{ilk} - \varphi_{ikl} \tag{3.25}$$

3.3. Закон Гука. Вільна енергія. Рівняння рівноваги

Для того щоб мати можливість застосовувати загальні термодинамічні співвідношення до тих чи інших конкретних випадків деформацій, необхідно мати вираз для вільної енергії тіла F як функції від тензора деформації. Цей вираз легко отримати, скориставшись малістю деформацій і відповідно до цього розклавши вільну енергію в ряд за ступенями u_{ik}. При цьому ми будемо поки що розглядати тільки ізотропні тіла.

Розглядаючи деформоване тіло, що перебуває при де-якій (постійній уздовж тіла) температурі, ми будемо вважати недеформованим стан тіла за відсутності зовнішніх сил при тій самій температурі (. Тоді при $u_{ik} = 0$ мають бути відсутні також і внутрішні напруження, тобто мають бути $\sigma_{ik} = 0$. Оскільки $\sigma_{ik} = \frac{\partial F}{\partial u_{ik}}$ то звідси випливає, що в розкладенні F за ступенями u_{ik} повинні бути відсутніми лінійні члени [41].

Далі, оскільки вільна енергія є величиною скалярною, то й кожний член у розкладі F теж повинен бути скаляром. Із компонент симетричного тензора u_{ik} можна скласти два незалежні скаляри другого ступеня; в якості них можна вибрати квадрат ${u_{ii}}^2$ суми діагональних компонент і суму ${u_{ik}}^2$ квадратів усіх компонент тензора u_{ik}.

Розкладаючи F за ступенями u_{ik}, ми отримаємо, з точністю до членів другого порядку вираз виду

$$F = F_0 + \frac{\lambda}{2}{u_{ii}}^2 + \mu {u_{ik}}^2 \tag{3.26}$$

Це є загальний вираз для вільної енергії деформованого ізотропного тіла. Величини λ і μ називають коефіцієнтами Ламе.Зміна об'єму під час деформації визначається сумою u_{ii}. Якщо ця сума дорівнює нулю, то це означає, що під час деформування об'єм даного тіла залишається незмінним і змінюється тільки його форма. Такі деформації без зміни об'єму називають зсувом.

Зворотним випадком є деформація, що супроводжується зміною об'єму, але без зміни форми.Кожен елемент об’єму тіла при такій деформації залишається схожим сам на себе.Таку деформацію називають всестороннім зтисненням.

Фактично закон Гука застосовний практично до всіх пружних деформацій. Річ у тім, що деформації зазвичай перестають бути пружними ще тоді, коли вони настільки малі, що закон Гука є досить гарним прикладом (виняток становлять тіла типу гуми).

Нижче приведено рівняння рівноваги:

$$\Delta u + \frac{1}{1-2\sigma} grad\ div\ u = -\rho g \frac{2(1+\sigma)}{E} \tag{3.27}$$

РОЗДІЛ 4. КОНТИНУАЛЬНІ МОДЕЛІ МОДЕЛІ КОМПОЗИТІВ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК З ВИКОРИСТАННЯМ МЕТОДУ ГРАНИЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ.

4.1 Формула МГЕ для композитів на основі ВНТ.

Для моделювання композитів на основі ВНТ можна застосувати наступне умовне граничне інтегральне рівняння для тривімірних задач еластостатики [42,43]:

$$\int_S T_{ij}(P,P_0)\left[u_j(P)-u_j(P_0)\right]dS(P)=\int_S U_{ij}(P,P_0)t_j(P)dS(P),\ \forall P_0\in S \qquad (4.1)$$

де u_j та t_j - поля переміщення та зчеплення, відповідно; U_{ij} та T_{ij} - ядра переміщення та зчеплення, відповідно; P - точка поля, P_0 – точка джерела; S - гранична поверхня області, що розглядається.

Рівняння (4.1) є слабкосингулярною формою звичайного ГІР і не передбачає обчислення будь-яких сингулярних інтегралів у дискретизації. Це ГІР може бути безпечно застосоване до тонких оболонкових матеріалів або конструкцій за умови, що майже сингулярні інтеграли можуть бути обчислені точно та ефективно [44, 45].

В даному дослідженні композити на основі ВНТ, ГІР (4.1) застосовуються в кожній області ВНТ і матриці окремо.

Отримані два рівняння від двох доменів зв'язуються на границях розділу ВНТ і матриці. Передбачається ідеальне, тобто забезпечується неперервність полів переміщень і рівновага сил тяжіння на межі розділу.

Ключовим кроком в успішному застосуванні МГЕ для аналізу композитів на основі ВНТ є точне обчислення майже сингулярних інтегралів. Майже сингулярні інтеграли виникають, коли вихідна точка знаходиться дуже близько до поверхні інтегрування.

Наприклад, інтегрування може бути на зовнішній поверхні циліндричної оболонки ВНТ в моделі суцільного середовища, в той час як вихідна точка знаходиться на внутрішній поверхні ВНТ. Хоча інші методи, такі як розбиття, можуть бути застосовані для цих майже сингулярних інтегралів, найефективнішим і найточнішим вважається лінійно-інтегральний підхі [44, 46].

Наприклад, інтеграл з тяговим ядром на поверхні ΔS з розташованою поблизу початковою точкою P_0 може бути виділений і в подальшому перетворений в лінійні інтеграли з використанням теореми Стокса наступним чином [44, 46]:

$$\int_{\Delta S} T_{ij}(P,P_0)dS(P) = I_{\Omega}(P_0) + \frac{1}{4\pi}\varepsilon_{ijk}\oint_C \frac{1}{r}dx_k + \frac{1}{8\pi(1-\nu)}\varepsilon_{jkl}\oint_C r_{jk}\,dx_l \qquad (4.2)$$

де C - гранична крива ΔS, r - відстань між P_0 і P, ν коефіцієнт Пуассона, а ε_{ijk}ε - тензор перестановок. Перший доданок у правій частині (4.2) є невласним інтегралом Ангела:

$$I_{\Omega}(P_0) = \int_{\Delta S}\frac{\partial G}{\partial n}dS = -\frac{1}{4\pi}\int_{\Delta S}\frac{1}{r^2}\frac{\partial r}{\partial n}dS \qquad (4.3)$$

де $G = {}^{1}/_{4\pi r}$- функція Гріна для тривимірних потенціальних задач.

Цей тілесний кутовий (поверхневий інтеграл) може бути перетворений у лінійний інтеграл на обмежений кривою C [44]:

$$I_{\Omega}(P_0) = \frac{1}{4\pi}\oint_C \left[\frac{Z(L)}{R(L)} - 1\right]\frac{(\hat{\rho}\cdot\hat{v})(\hat{t}\cdot\hat{\eta})}{\rho}dL \qquad (4.4)$$

в якому змінні $R, Z, \rho, \hat{\rho}, \hat{v}, \hat{t}, \hat{\eta}$ є деякими геометрично пов'язаними параметри, визначені на граничній кривій C або її проекції на координатну площину [44].

Реалізація лінійного інтегрального підходу з використанням рівнянь (4.2) і (4.4) для роботи з майже сингулярними інтегралами в тривимірному коді МГЕ, який в загальному випадку має справу лише з сингулярними та несингулярними інтегралами.

Прямий підхід до роботи з майже сингулярними інтегралами в МГЕ-коді часто полягає в тому, щоб розглядати їх як невласні інтеграли і застосовувати менші елементи або розбивати елементи на менші комірки. Такий підхід був прийнятий у багатьох кодах МГЕ і виявився неефективним.

Додаткові зусилля при реалізації підходу лінійних інтегралів (рівняння (4.2) і (4.4)) в структурному МГЕ-коді зовсім не сповільнюють роботу коду, коли потрібно враховувати тонкі тіла, оскільки лінійні інтеграли набагато швидше обчислюються і набагато легше піддаються ніж відповідні інтеграли по площі.

Лінійно-інтегральний підхід до розгляду майже сингулярних інтегралів що містять ядро зчеплення, виявився дуже успішним при аналізі тривимірних оболонкових структур та задач про відкриті тріщини [44].

Цей підхід також був реалізований і для випадків 2-вимірної пружності з подальшим удосконаленням для інтегралів зі слабкими сингулярностями [45]. Розширення методу на випадок 2-D п'єзоелектричних ГІР також було здійснено в роботі.

Подальші вдосконалення для розгляду майже сингулярних інтегралів у 3-вимірному випадку було зроблено нещодавно шляхом застосування нелінійного перетворення координат для інтегралів з ядром переміщення та регуляризованих інтегралів з ядром зчеплення, причому обидва інтеграли можуть бути майже слабко сингулярними для тонкого тіла або тонкої форми, як це обговорювалося в [45] у 2-D випадку.

Детальна реалізація цього нелінійного перетворення для тривимірних задач та покращені результати чисельних випробувань будуть представлені в роботі [48]. З цими покращеннями удосконаленнями, вихідну точку можна

розмістити ближче до елемента інтегрування без необхідності розбиття елемента.

Лінійно-інтегральний підхід та удосконалення, згадані вище, використовуються в даному дослідженні для аналізу композитів на основі ВНТ, де товщина ВНТ може бути надзвичайно малою в порівнянні з іншими його розмірами.

4.2 Чисельні приклади

Для демонстрації труднощів моделювання нанокомпозитів на основі ВНТ та переваги МГЕ над МСЕ при такому моделюванні, коротка одностінна вуглецева нанотрубка, вбудована в матеріал матриці, досліджується за допомогою квадратного РОЕ (рис.4.1).

Удосконалений багатодоменний МГЕ, що базується на роботах [44, 48], застосовано до моделі квадратного РОЕ. Для моделювання МГЕ використано комерційний пакет ANSYS.

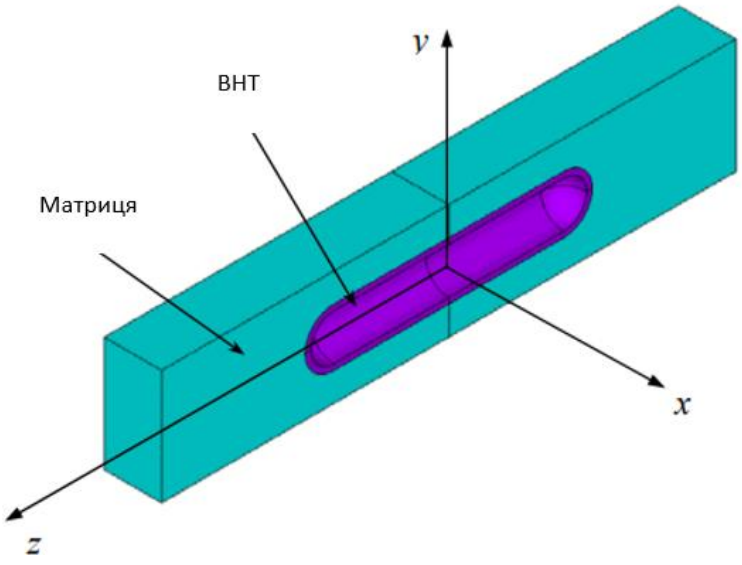


Рисунок 4.1. Квадратний РОЕ у розрізі.

Розміри, що використовуються для повного квадратного РОЕ, є такими:

Матриця: висота = ширина = 10 нм, довжина = 100 нм;

ВНТ: зовнішній радіус = 5 нм, внутрішній радіус $r_i = 4{,}6\text{нм}$, довжина = 50 нм.

Модулі Юнга та коефіцієнти Пуассона:

Матриця: $E_m = 100\text{нм}/\text{нм}^2\ (= 100GPa), v_m = 0.3$;

ВНТ: $E_{\text{ВНТ}} = 1000\text{нм}/\text{нм}^2$(1000GPa), $v_{\text{ВНТ}} = 0.3$.

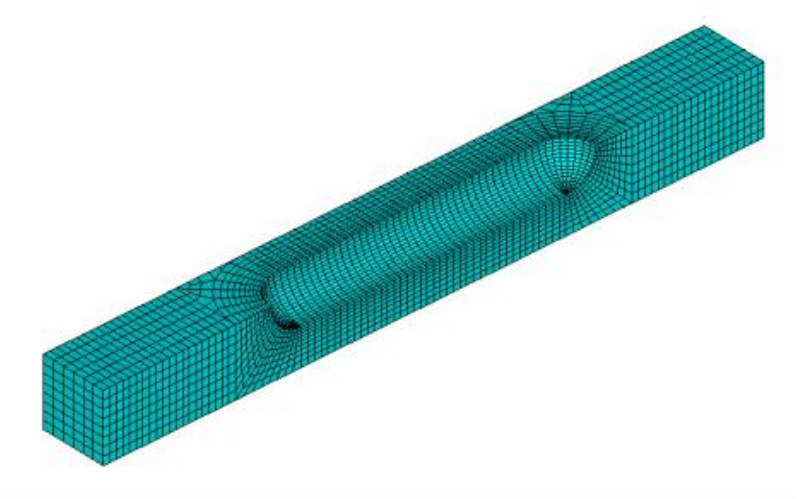


Рисунок 4.2 (а) сітка МСЕ (квартальна модель, 10,240 квадратичних твердотільних елементів)

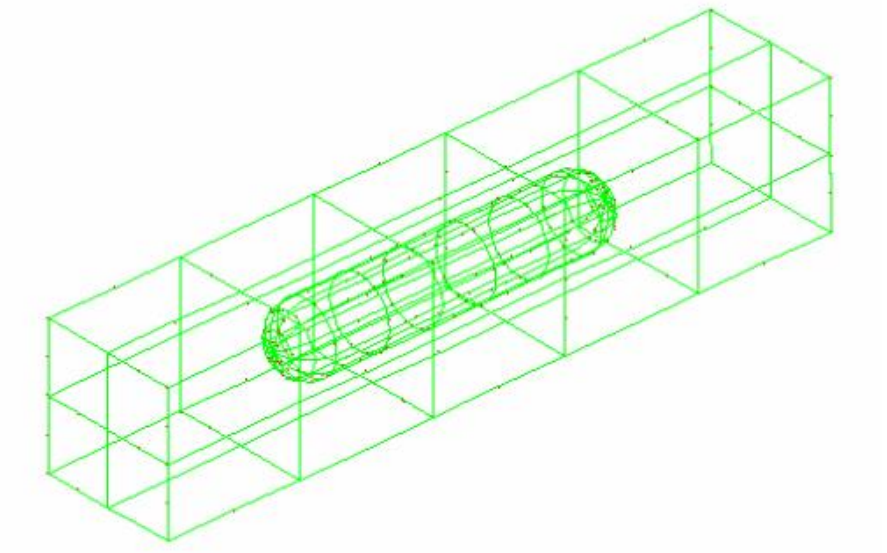


Рисунок 4.2.(б) сітка МГЕ (повна модель, 312 квадратичних елементів поверхні)

Рисунок 4.2(а-б) Порівняння дискретизацій МСЕ та МГЕ для квадратного РОЕ (товщина ВНТ = 0,4 нм).

Ефективна товщина використовуваних ВНТ становить 0,4 нм (теоретичне значення товщини одностінної ВНТ становить приблизно 0,34 нм [48]).

Ці значення для розмірів ВНТ і матеріальних констант обрані в широких межах для ВНТ, які наводяться в літературі [48], і можуть бути легко скориговані для конкретного випадку в майбутніх моделюваннях. Для умов інтерфейсу, ідеальний зв'язок між ВНТ і матрицею передбачається у всіх досліджених випадках.

Сітка МСЕ зі збіжними результатами для моделі четвертинної симетрії РОЕ показана на рис. 4.2 (а), а сітка МГЕ для повної моделі - на рис. 4.2 (б).

Для МСЕ моделі використовуються квадратичні цегляні елементи і один шар елементів використовується через товщину ВНТ. Елементи з малими розмірами необхідні також і в матриці біля ВНТ, через обмеження на зв'язність елементів та співвідношення сторін у МСЕ.

Таким чином, велика кількість скінченних елементів (всього 10,240) необхідна в даній чверть-симетричній моделі МСЕ для даного аналізу.

З іншого боку, в повній моделі МГЕ, показаній на рис. 4.2 (б), дуже мала кількість квадратичних поверхневих елементів (всього 312) використовується тільки на межі розділу і границях (циліндрична ВНТ представлена внутрішньою та зовнішньою поверхнями в МГЕ-моделі).

Розміри елементів у МГЕ-моделях можуть не залежати від товщини ВНТ, оскільки вдосконалений 3-D багатодоменний МГЕ може обробляти тонкі

оболонкоподібні ВНТ дуже ефективно і точно обробляти тонкі оболонки без необхідності збільшення кількості елементів (більш детально див. [44]).

Як перший випадок навантаження для дослідження загальної деформації РОЕ, згинаюче навантаження прикладається до квадратного РОЕ, який закріплений з обох кінців і до якого прикладається розподілене навантаження q (у від'ємному напрямку y, рис. 3) як по верхній, так і по нижній поверхні (таким чином, для цього антисиметричного випадку може бути застосована четвертинна модель МСЕ).

Графіки контурів деформованих форм квадратного РОЕ з використанням МСЕ та МГЕ показані на рис.4.3 (а) та рис. 4.3 (б) відповідно. Різниця між результатами МСЕ та МГЕ деформування не перевищує 5% (табл. 1).

В якості другого випадку навантаження для дослідження механізму передачі навантаження при РОЕ для композитів на основі ВНТ прикладається осьове розтягнення ΔL вздовж напрямку ВНТ з одного кінця, а з іншого кінця фіксується переміщення. Побудовано контурні графіки для розподілу напружень за допомогою МСЕ та МГЕ наведено на рис. 4.4 (а) та рис. 4.4 (б), відповідно.

З цих графіків можна спостерігати несучу здатність ВНТ,оскільки високі напруження (позначені червоним кольором) зосереджені переважно в межах або поблизу ВНТ.

При більших відношеннях модуля Юнга ВНТ до модуля Юнга матриці (тобто, $E_{\text{ВНТ}}/E_m$, що в даному випадку дорівнює 10), або довгих ВНТ, несуча здатність ВНТ будуть ще більш помітними (більше прикладів з використанням МСЕ можна знайти в [47]). Результати визначення напружень за допомогою МСЕ та МГЕ майже ідентичні, як показано на рис. (4.4) і переваги МГЕ при моделюванні композитів на основі ВНТ є очевидними (табл. 2) щодо сітки та кількості застосованих елементів.

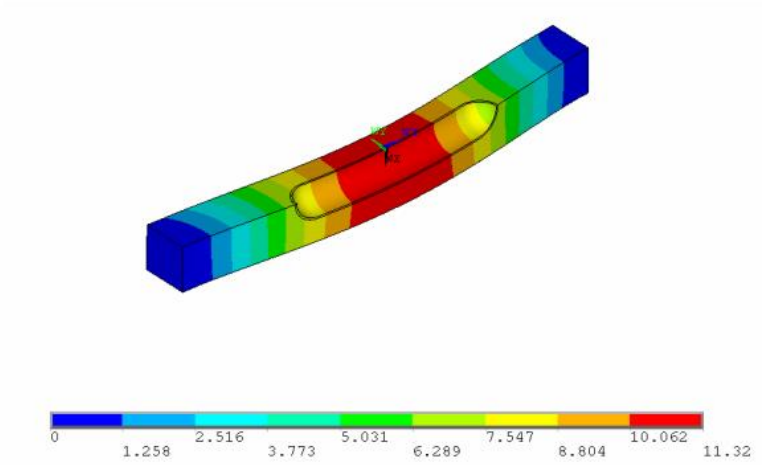


Рисунок 4.3(а) Результат МСЕ (X q; квартальна модель)

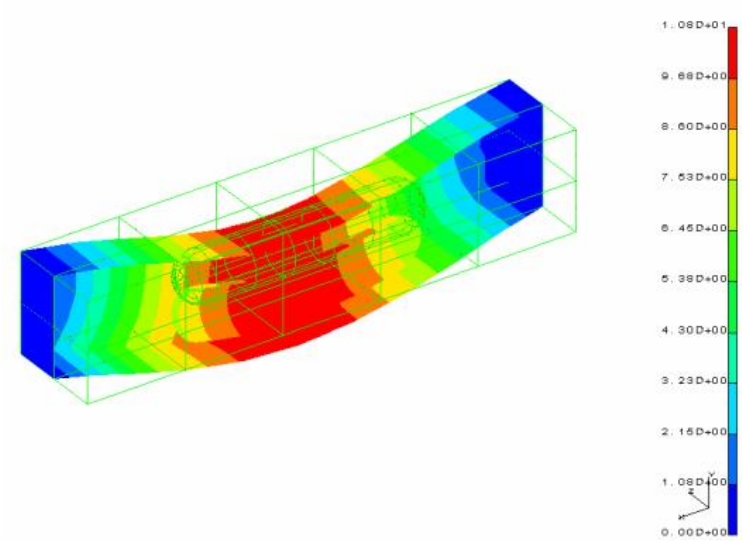


Рисунок 4.3 (б) Результат МГЕ (X q; повна модель у розрізі)

Рисунок 4.3(а-б). Деформовані форми квадратного РОЕ під дією згинального навантаження q.

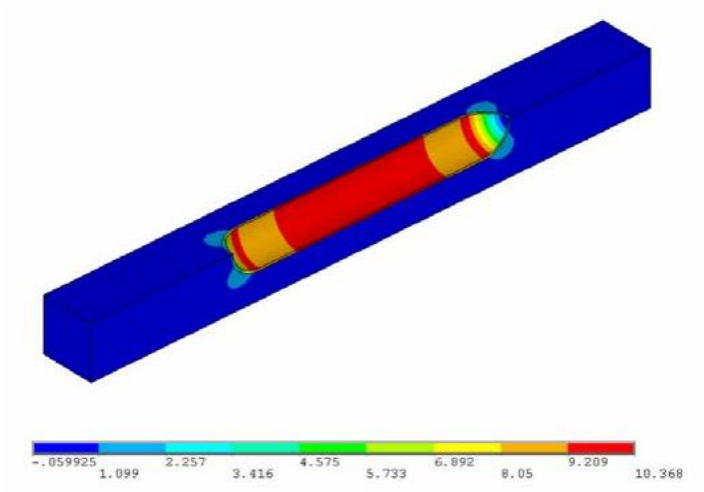


Рисунок 4.4 (а) Результат МСЕ (X ΔL; квартальна модель)

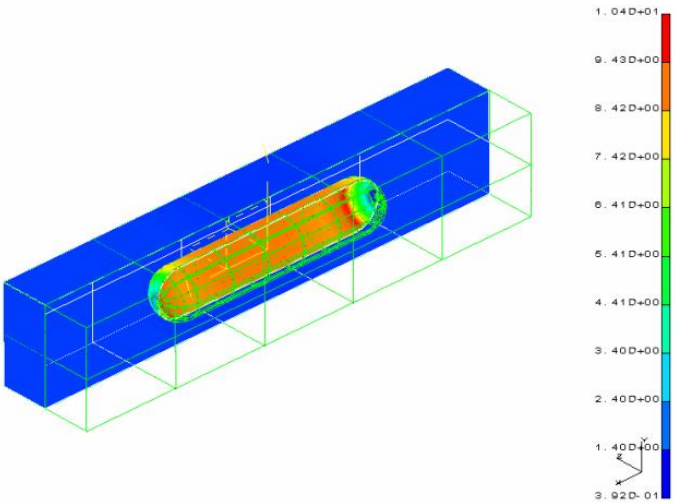


Рисунок 4.4 (б) Результат МГЕ (X ΔL; повна модель тільки в розрізі ВНТ)

Рисунок 4.4 (а-б) Розподіл напружень у квадратному РОЕ при осьовому розтягуванні ΔL .

Таблиця 2.

Порівняння максимального переміщення РВЕ при згинальному навантаженні

	МГЕ(повна модель)	МСЕ(квартальна модель)
Кількість елементів	312	10,240
Максимальне переміщення(X q)	10.80	11.32

Таблиця 3.

Порівняння максимального напруження фон Мізеса в РОЕ при розтягуванні

	МГЕ(повна модель)	МСЕ(квартальна модель)
Кількість елементів	312	10,240
Максимальне напруження за Мізесом(х ΔL)	10.40	10.37

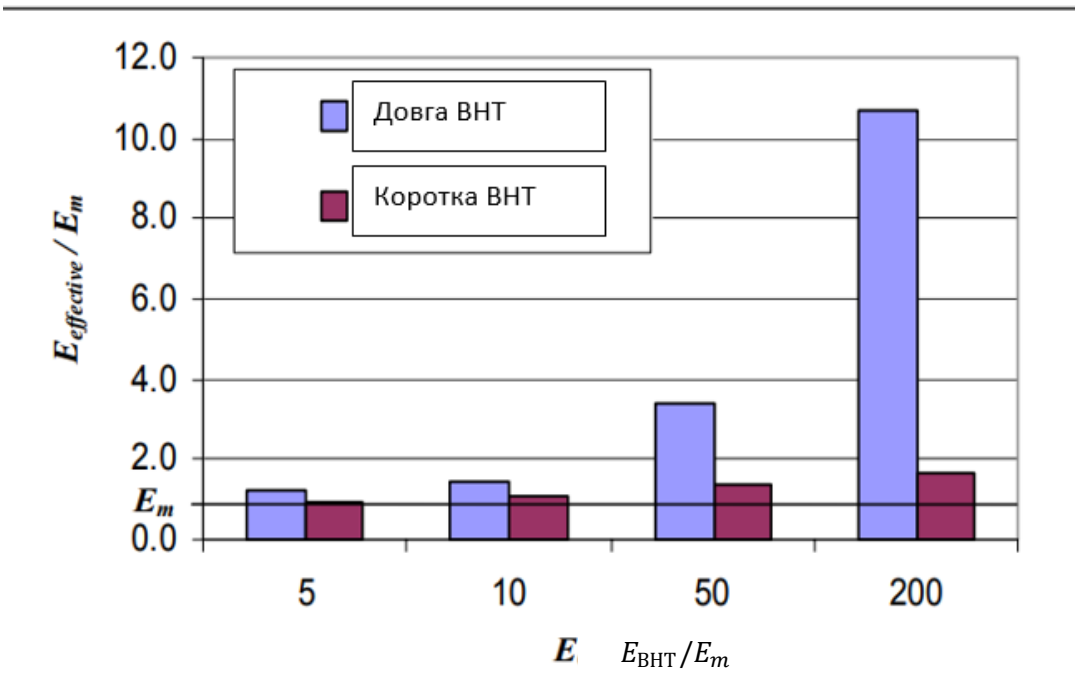


Рисунок 4.5. Ефективні модулі Юнга в напрямку ВНТ для модуля ВНТ 1000 GPa, товщини = 0.4 нм, об'ємної частки = 0.05 (довгі) та 0.02 (короткі) ([47]).

Наведені в даному розділі приклади є попередніми і спрямовані на дослідження можливості характеризації композитів ВНТ за допомогою МГЕ та МСЕ на основі запропонованих 3-D РОЕ. Основна мета використання моделей МСЕ або МГЕ на основі РОЕ є допомога у визначенні ефективних властивостей матеріалу композитів на основі ВНТ. Для цього необхідно дослідити загальні

деформації РОЕ при різних навантаженнях і, швидше за все, застосовними є континуальні моделі.

Приклади оцінки ефективних матеріальних констант композитів на основі ВНТ за допомогою МСЕмоделей РОЕ можна знайти в роботах [47].

Графік розрахованих ефективних модулів Юнга на основі даних з використанням РОЕ наведено на рис.4.5, де видно, що збільшення ефективного модуля Юнга в композитах з ВНТ нанесені в залежності від відношення модулів Юнга ВНТ і матриці.

Як видно з рисунка 4.5, армуючий вплив ВНТ нажорсткість композиту на основі ВНТ є значним при малій об'ємній частці ВНТ (2 ~ 5 %), особливо для випадків з довгими ВНТ розміщених в "м'якій" матриці (на рисунку 4.5) $\frac{E_{\text{ВНТ}}}{E_m} = 200$ відповідає випадку полімерної матриці зволокнами ВНТ, в той час як $E_{\text{ВНТ}}/E_m$=5- випадку сталевої матриці зі сталевими волокнами ВНТ) [48].

Більш реалістичні моделі, наприклад, багатостінні ВНТ, з великим співвідношенням сторін, а також більші РОЕ, що містять сотні ВНТ з випадковим розподілом, безумовно, можна спробувати в подальших дослідженнях з використанням МСЕ, де моделювання (сіткове) буде ще більш складним.

4.3 Обговорення

ГІР/МГЕ успішно застосовується для аналізу багатьох проблем, пов'язаних з матеріалом, протягом останніх чотирьох десятиліть. Однак, застосування МГЕ для аналізу тонких і шаруватих матеріалів, зокрема або оболонкоподібних структур в цілому довгий час вважалося, щонайменше, нерозумним заняттям.

Це пов'язано з поширеною думкою що ГІР/МГЕ не підходить для оболонкоподібних проблем, оскільки виродження звичайного ГІР виникне, як і у випадку з ГІР для проблем з тріщинами. Це переконання,однак, нещодавно було поставлено під сумнів, і тепер можна показати [44], що звичайне ГІР для

пружності дасть два відмінних рівняння по товщині тонкої оболонки зі зникаючою товщиною.

Таким чином, добре відоме ГІР пружності [42] не вироджується для добре поставленої задачі теорії пружності і може безпечно застосовуватись до оболонкових конструкцій за умови, що майже сингулярні інтеграли можуть бути обчислені з достатньою точністю.

Розглянуто гіперсингулярне (тягове) ГІР не потрібне для аналізу оболонкових структур, на відміну від задач про тріщини. Це відкрило широку область застосування МГЕ в моделюванні та розрахунках різних матеріалів, що включають тонкі прикордонні області, тонкі плівки або покриття, або шаруваті матеріали.

Застосування МГЕ для моделювання композитів на основі ВНТ, про яке повідомляється в цій роботі, є ще одним прикладом того, як ГРІ може бути застосовано для вирішення навіть найскладніших і найактуальніших проблем моделювання матеріалів.

Це можна зробити, використовуючи те саме ГІР, яку було розроблений Ріццо близько сорока років тому [42], за умови, що припущення механіки суцільного середовища залишаються справедливими, а результати моделювання інтерпретуються правильно.

Різні міркування при моделюванні композитів на основі ВНТ з використанням механіки суцільних середовищ з метою отримання характеристик обговорюються у цій роботі. Для дослідження композитів на основі ВНТ запропоновано три репрезентативні об'ємні елементи, які є розширенням тих, що використовуються при вивченні звичайних композитів на основі ВНТ.

Запропоновано тривимірні моделі пружності для моделювання циліндричних тонких оболонкових ВНТ при їх впровадженні в матеріал матриці.

Запропоновано методи роботи з майже сингулярними інтегралами в МГЕ, що виникають при цьому. Чисельні приклади, наведені в роботі,

показують, що моделювання та розрахунки ВНТ в матриці може бути дуже складним навіть для підходу механіки суцільного середовища.

Загалом, для МСЕ необхідні детальні 3-D моделі з дуже тонкими сітками, щоб отримати збіжних результатів. МГЕ може використовувати набагато менше поверхневих елементів у цьому моделюванні і таким чином, МГЕ має деякі явні переваги над МСЕ.

Існує ще багато проблем, перш ніж МГЕ може стати практичним числовим інструментом для аналізу композитів на основі ВНТ. Наприклад, для моделювання великої кількості ВНТ в матриці, нові підходи, засновані на МГЕ або його нових варіаціях (наприклад, метод граничних вузлів [48]), можуть бути використані для аналізу композитів на основі ВНТ.

Для підвищення ефективності МГЕ неминучим є використання швидкого багатополюсного розкладання МГЕ.

Наостанок, необхідно розвивати багатомасштабні підходи, які можуть пов'язувати моделі на нано-, мікро- та макрорівнях розроблятися з використанням комбінації двох або трьох чисельних методів, спрямованих на різні масштаби. Багато чого ще належить зробити в моделюванні та симуляції композитів на основі ВНТ та інших наноматеріалів. МГЕ зробить свій внесок у цю нову галузь дослідження матеріалів своїми унікальними можливостями.

ВИСНОВКИ:

- Розглянуто перехід від моделі молекулярної механіки до континуальної моделі ВНТ.
- Вирішено задачі на рівновагу ВНТ.
- Запропоновано три репрезентативні об'ємні елементи, які є розширенням тих, що використовуються при вивченні звичайних композитів на основі ВНТ.
- Запропоновано тривимірні моделі пружності для моделювання циліндричних тонких оболонкових ВНТ при їх впровадженні в матеріал матриці.
- Запропоновано методи роботи з сингулярними інтегралами
- Розглянуто перехід від моделі молекулярної механіки до континуальної моделі ВНТ.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

[1]. Д. Образцова, А. І. Чєрнов, А. В. Таусєнєв, Н. Р. Арутюнян, П. В. Фєдотов стаття «Одностінні вуглецеві нанотрубки »//Наука. 2017. Стр.210-260.

[2] Iijima S., Ichinashi T. Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter // Nature. 1993. Vol. 363. P. 603–605.

[3] Bethune D.S., Kiang C.-H., de Vries M.S., Gorman G., Savoy R., Vazquez J., Beyers R. Cobalt catalysed growth of carbon nanotubes with single-atomic-layer walls // Nature. 1993. Vol. 363. P. 605–607.

[4] Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V., Firsov A.A. Electric field effect in atomically thin carbon films // Science. 2004. Vol. 306. P. 666–669.

[5] Monthioux M., Kuznetsov V.L. Who should be given the credit for the discovery of carbon nanotubes // Carbon. 2006. Vol. 44. P. 1621–1623.

[6] Радушкевич Л.В., Лукъянович В.М. О структуре углерода, образующегося при термическом разложении окиси углерода на железном контакте // Журн. физ. хим. 1952. Т. 26. С. 88–95.

[7] Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon // Nature. 1991. Vol. 359. P. 56–58.

[8] Kroto H., Heath J., O'Brien S.C., Curl R.F., Smalley R.E. C60: Buckminsterfullerene // Nature. 1985. Vol. 318. P. 162–163.

[9] Guo T., Nikolaev P., Thess A., Colbert D.T., Smalley R.E. Catalytic growth of single-walled nanotubes by laser vaporization // Chem. Phys. Lett. 1995. Vol. 243. P. 49–54.

[10] Thess A., Lee R., Nikolaev P., Dai H., Petit P., Robert J., Xu C., Lee Y.H., Kim S.G., Rinzler A.G., Colbert D.T., Scuseria G.E., Tomanek D., Ficher J.E., Smalley R.E. Crystalline ropes of metallic carbon nanotubes // Science. 1996. Vol. 273. P. 483–487.

[11] Yudasaka M., Tomatsu T., Ichihashi T., Iijima S. Single-wall carbon nanotube formation by laser ablation using double-targets of carbon and metal // Chem. Phys. Lett. 1997. Vol. 278. P. 102–106.

[12] Journet C., Maser W.K., Bernier P., Loiseau A., Lamy de la Chapelle M., Lefrant S., Deniard P., Lee R., Fisher J.E. Large-scale production of single-walled carbon nanotubes by the electric arc technique // Nature. 1997. Vol. 388. P. 756–758.

[13] Ivanov V., Nagy J.B., Lambin Ph., Lucas A.A., Zhang X.B., Zhang X.F., Bernaerts D., van Tendeloo G., Amelinckx S., van Landuyt J. The study of carbon nanotubules produced by catalytic method // Chem. Phys. Lett. 1994. Vol. 223. P. 329–332.

[14] Hsu W.K., Zhu Y.Q., Trasobares S., Terrones H., Terrones M., Grobert N., Takikawa H., Hare J.P., Kroto H.W., Walton D.R.M. Solid-phase production of carbon nanotubes // Appl. Phys. A. 1999. Vol. 68. P. 493– 495.

[15] Hafner J.H., Bronikowski M.J., Azamian B.R., Nikolaev P., Rinzler A.G., Colbert D.T., Smith K.A., Smalley R.E. Catalytic growth of single-wall carbon nanotubes from metal particles // Chem. Phys. Lett. 1998. Vol. 296. P. 195–202.

[16] Nikolaev P., Bronikowski M.J., Bradley R.K., Rohmund F., Colbert D.T., Smith K.A., Smalley R.E. Gas-phase catalytic growth of single-walled carbon nanotubes from carbon monoxide // Chem. Phys. Lett. 1999. Vol. 313. P. 91–97.

[17] Bronikowski M.J., Willis P.A., Colbert D.T., Smith K.A., Smalley R.E. Gasphase production of carbon single-walled nanotubes from carbon monoxide via the HiPco process: A parametric study // J. Vac. Sci. Technol. A. 2001. Vol. 19. P. 1800–1805.

[18] Nasibulin A.G., Moisala A., Brown D., Jiang H., Kauppinen E.I. A Novel aerosol method for single-walled nanotube synthesis // Chem. Phys. Lett. 2005. Vol. 402. P. 227–232.

[19] Bachilo S.M., Balzano L., Herrera J.E., Pompeo F., Resasco D.E., Weisman R.B. Narrow (n, m)-distribution of single-walled carbon nanotubes grown using a solid supported catalyst // J. Am. Chem. Soc. 2003. Vol. 125, N 37. P. 11186–11187.

[20] He M., Chernov A.I., Fedotov P.V., Obraztsova E.D., Sainio J., Rikkinen E., Jiang H., Zhu Z., Tian Y., Kauppinen E.I., Niemel M., Krause A.O.I. Predominant (6,5) single-walled carbon nanotube growth on a copperpromoted iron catalyst // J. Am. Chem. Soc. 2010. Vol. 132, N 40. P. 13994–13996.

[21] Ding L., Tselev A., Wang J., Yuan D., Chu H., McNicholas T.P., Li Y., Liu J. Selective growth of well-aligned semiconducting single-walled carbon nanotubes // Nano Lett. 2009. Vol. 9. P. 800–805.

[22] Krätschmer W., Lamb L.D., Kostiropoulos K., Huffman D.R. Solid C60: A new form of carbon // Nature. 1990. Vol. 347. P. 354–357.

[23] Hirsch A. Functionalization of single-walled carbon nanotubes // Angew. Chem. Int. Ed. 2002. Vol. 41. P. 1853–1859.

[24] Вуглецеві нанотрубки – перспективи застосування та ризики для здоров'я / Н. Я. Летняк, М. М. Корда // Медична та клінічна хімія. - 2016. - Т. 18, № 3. - С. 96-100.

[25] Електронний ресурс «ВУГЛЕЦЕВІ НАНОТРУБКИ: ІСТОРІЯ ВІДКРИТТЯ, ВЛАСТИВОСТІ, ЗАСТОСУВАННЯ»

http://elartu.tntu.edu.ua/bitstream/123456789/13013/2/Conf_2014v1_Barmak_I-Carbon_nanotubes_history_of_195.pdf

[26] Kelly BT. Physics of graphite. Essex, England: Applied Science Publishers Ltd; 1981.

[27] Rappe AK, Casewit CJ. Molecular mechanics across chemistry. Sausalito, California: University Science Books; 1997.

[28] Born M, Huang K. Dynamical theory of crystal lattices. London: Oxford University Press; 1954.

[29] Noor AK, Anderson MS, Greene WH. Continuum models for beam- and platelike lattice structures. AIAA Journal 1978;16(12): 1219–28.

[30] Sun C T, Kim B J, Bogdanoff J L. On the derivation of equivalent simple models for beam and plate-like structures in dynamic analysis. In: AIAA/ASME/ASCE/AHS 22nd structures, structural dynamics and materials conference. Atlanta, Georgia; 1981. p. 523–32.

[31] Noor AK. Continuum modeling for repetitive lattice structures. ASME Applied Mechanics Reveiws 1988;41(7):285–96.

[32] Dow JO, Huyer SA. Continuum models of space station structures. Journal of Aerospace Engineering 1989;2(4):220–38.

[33] Sun CT, Leibbe SW. Global–local approach to solving vibration of large truss structures. AIAA Journal 1990;28(2):303–8.

[34] Lee U. Equivalent continuum models of large plate-like lattice structures. International Journal of Solids and Structures 1994; 31(4):457–67.

[35] Eringen AC. Linear theory of micropolar elasticity. Journal of Mathematics and Mechanics 1966;15(6):909–23.

[36] Cornell WD, Cieplak P, Bayly CI, Gould IR, Merz KM, Ferguson DM, Spellmeyer DC, et al. A second generation force field for the simulation of proteins, nucleic acids, and organic molecules. Journal of the American Chemical Society 1995; 117:5179–97.

[37] Weiner SJ, Kollman PA, Case DA, Singh UC, Ghio C, Alagona G, et al. A new force field for molecular mechanical simulation of nucleic acids and proteins. Journal of the American Chemical Society 1984; 106:765–84.

[38] Odegard G M, Gates T S, Nicholson L M, Wise K E. Equivalent continuum modeling of nano-structured materials. NASA/TM2001–210863; 2001.

[39] Timoshenko S, Goodier JN. Theory of elasticity. New York: McGraw-Hill Book Company; 1951.

[40] Yakobson BI, Brabec CJ, Bernholc J. Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear response. Physical Review Letters 1996;76(14):2511–4.

[41] Ландау Л.Д, Ліфшиц Є.М. Теорія Пружності 4 видання.Видавництво «Наука» 1987.

[42] F. J. Rizzo, “An integral equation approach to boundary value problems of classical elastostatics,” Quart. Appl. Math., 25, 83-95 (1967).

[43] F. J. Rizzo and D. J. Shippy, “An advanced boundary integral equation method for three-dimensional thermoelasticity,” Int. J. Numer. Methods Engrg., 11, 1753-1768 (1977).

[44] Y. J. Liu, “Analysis of shell-like structures by the boundary element method based on 3-D elasticity: formulation and verification,” Int. J. Numer. Methods Engrg., 41, 541-558 (1998).

[45] J. F. Luo, Y. J. Liu, and E. J. Berger, “Analysis of two-dimensional thin structures (from micro- to nano-scales) using the boundary element method,” Comput. Mech., 22, 404-412 (1998).

[46] Y. J. Liu, D. M. Zhang, and F. J. Rizzo, “Nearly singular and hypersingular integrals in the boundary element method”, in: eds. C. A. Brebbia and J. J. Rencis, Boundary Elements XV (Computational Mechanics Publications, Worcester, MA, 1993) 453-468.

[47] Y. J. Liu and X. L. Chen, “Evaluations of the effective materials properties of carbon nanotube-based composites using a nanoscale representative volume element,” Mechanics of Materials, 35, 69-81 (2003).

[48] Y. J. Liu and X. L. Chen / Electronic Journal of Boundary Elements, Vol. 1, No. 2, pp. 316-335 (2003)