

УДК 519.7

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДВУМЕРНОЙ СРЕДЫ ИЗ НАНОТРУБОК

И.В. Милосердова, И.С. Павлов

1. Введение

Любой материал имеет иерархически организованную внутреннюю структуру. Для адекватного описания динамических процессов в структурно-неоднородном материале необходимо рассмотрение микро-, мезо- и макроструктурных уровней, находящихся во взаимодействии между собой. С физической точки зрения переход материала к наносостоянию связан с появлением размерных эффектов в его физико-механических свойствах [1-3]. Под размерными эффектами понимают комплекс явлений, связанных с изменением свойств материала вследствие изменения размера частиц и возрастания вклада границ в свойства системы при уменьшении размера частиц, а также соизмеримости размера частиц с длиной упругой волны. Для идентификации материала и выявления размерных эффектов необходим сигнал, который бы мог собирать информацию о её свойствах. В качестве «источника» информации удобно использовать акустические волны, так как они являются собственными колебаниями среды и поэтому их характеристики зависят от её структуры. Однако идентификация материала с помощью акустических волн невозможна без математической модели, устанавливающей связь между структурными параметрами материала и характеристиками упругих волн [4-6].

В данной работе обсуждается двумерная модель наноматериала, представляющая собой квадратную решетку, в узлах которой расположены центры масс нанотрубок. Нанотрубки обладают тремя трансляционными и двумя ротационными степенями свободы. Основными целями работы являются получение уравнений движения и выявление взаимосвязей между физико-механическими свойствами такого материала и параметрами его микроструктуры.

2. Дискретная модель

Рассматривается двумерная квадратная решетка, состоящая из нанотрубок - однородных стержней длины l , имеющих массу m . Центр масс каждой нанотрубки совпадает с геометрическим центром и в исходном состоянии ($t=0$) лежит в плоскости (x, y) , причем расстояние между центрами масс соседних стержней (частиц) как вдоль оси x , так и вдоль оси y равно a (Рис. 1), а сами частицы расположены перпендикулярно ее плоскости. Каждая частица имеет пять степеней свободы: смещение центра масс частицы с номером $N=N(i, j)$ вдоль осей x , y и z (трансляционные степени свободы $u_{i,j}$, $v_{i,j}$ и $w_{i,j}$) и поворот относительно центра масс, описываемый двумя углами: $\theta_{i,j}$, который отсчитывается от оси z в плоскости (x, z) , и $\phi_{i,j}$, характеризующий поворот в плоскости (x, y) (ротационные степени свободы) (Рис. 2). Кинетическая энергия частицы $N(i, j)$ равна

$$T_{i,j} = \frac{m}{2} (\dot{u}_{i,j}^2 + \dot{v}_{i,j}^2 + \dot{w}_{i,j}^2) + \frac{J_1}{2} \dot{\theta}_{i,j}^2 + \frac{J_2}{2} \dot{\phi}_{i,j}^2. \quad (1)$$

Здесь $J_1 = ml^2 / 12$ - момент инерции частицы относительно оси Oz , а $J_2 = ml^2 \sin^2 \theta_{i,j} / 12$ - переменный момент инерции диполя относительно оси Oy . Точка сверху обозначает производную по времени.

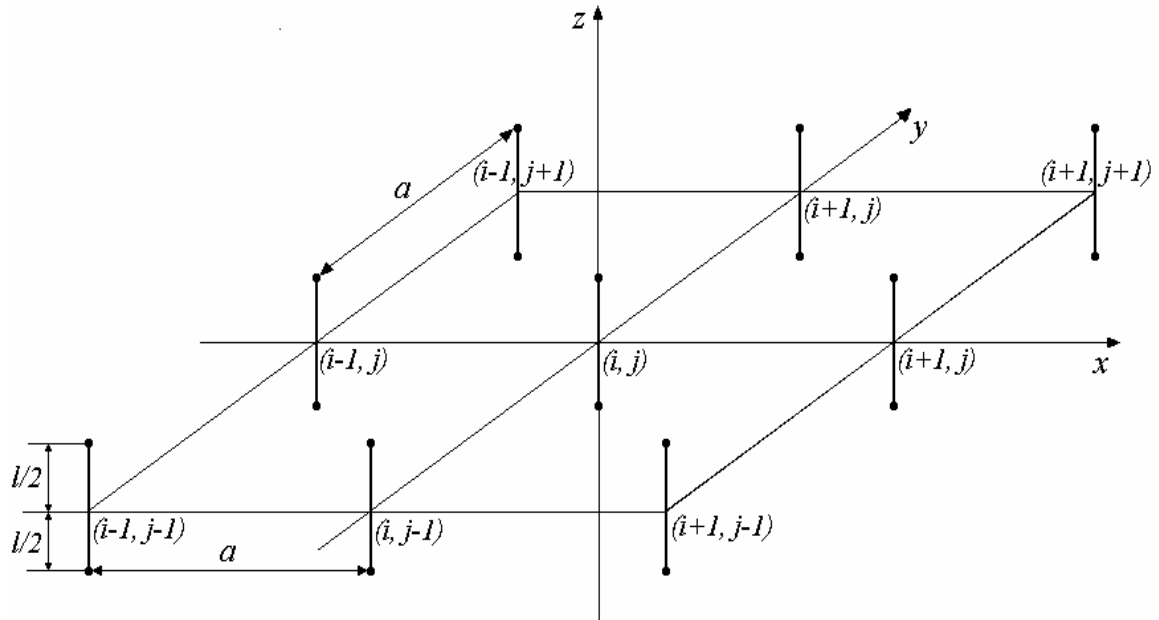


Рис. 1

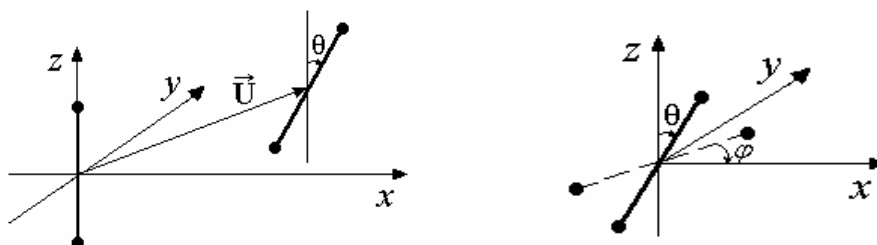


Рис. 2

Считается, что каждая частица взаимодействует с восемью ближайшими соседями по решетке, центры масс четырех из которых лежат на горизонтальной и вертикальной прямых, а других четырех - на диагоналях (Рис. 1). Первые четыре частицы, центры масс которых расположены на окружности радиуса a , в дальнейшем будем называть частицами первой координационной сферы, а остальные - частицами второй координационной сферы (их центры находятся на окружности радиуса $a\sqrt{2}$), причем центры обеих окружностей совпадают с частицей N . Центральные и нецентральные взаимодействия этой частицы с соседними частицами первой координационной сферы моделируются упругими пружинами трех типов [5-7]. Центральные пружины с жесткостью k_0 совместно с горизонтальными и вертикальными пружинами с жесткостью k_1 определяют силовые взаимодействия при растяжении-сжатии материала. Пружины типа k_1 осуществляют также передачу моментов при поворотах частиц. Диагональные пружины с жесткостью k_2 характеризуют силовые взаимодействия частиц при сдвиговых деформациях в материале

(Рис. 3). Взаимодействия частицы N с соседними частицами второй координационной сферы моделируются упругими пружинами тех же типов с жесткостями k'_0, k'_1, k'_2 .

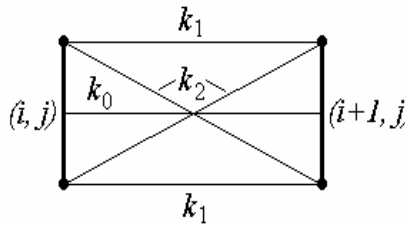


Рис. 3.

Считается, что смещения частиц малы по сравнению с размерами элементарной ячейки, построенной на взаимно перпендикулярных векторах длины a , направленных вдоль осей x и y . Взаимодействие диполей при отклонениях масс от положения равновесия определяется относительными удлинениями пружин.

Потенциальная энергия частицы N , обусловленная ее взаимодействием с восемью ближайшими соседями по решетке, описывается формулой

$$V_N = \frac{1}{2} \left(\frac{k_0}{2} \sum_{n=1}^4 D_{0n}^2 + \frac{k_1}{2} \sum_{n=1}^8 D_{1n}^2 + \frac{k_2}{2} \sum_{n=1}^8 D_{2n}^2 + \frac{k'_0}{2} \sum_{n=1}^4 D_{0n}^2 + \frac{k'_1}{2} \sum_{n=1}^8 D_{1n}^2 + \frac{k'_2}{2} \sum_{n=1}^8 D_{2n}^2 \right). \quad (2)$$

Здесь D_{ln} ($l=0, 1, 2, 3$) – относительные удлинения пружин, соединяющих частицу с ее соседями. Выражения для удлинений D_{ln} , вычисленные в приближении малости величин $\Delta u_i = (u_{i,j} - u_{i-1,j})/a \sim \Delta v_i \sim \varepsilon$, $\Delta w_i \sim \theta_{i,j} \sim \varphi_{i,j} \sim \varepsilon^{3/4}$, $\Delta \theta_{i,j} \sim \Delta \varphi_{i,j} \sim \varepsilon^{5/4}$, где $\varepsilon \ll 1$ – мера деформации ячейки, здесь не приводятся из-за их громоздкости. Коэффициент $1/2$ перед скобками в формуле (2) берется по той причине, что потенциальная энергия пружины делится поровну между двумя частицами, которые соединены этой пружиной.

3. Континуальное приближение

В случае длинноволновых возмущений, когда $\lambda \gg a$ (где λ – характерный пространственный масштаб деформации) от дискретных переменных i и j можно перейти к непрерывным пространственным переменным $x=ia$ и $y=ja$. При этом функции, заданные в дискретных точках, интерполируются непрерывными функциями и их частными производными:

$$u_{i\pm 1, j\pm 1}(t) = u(x \pm a, y \pm a, t) = u(x, y, t) \pm a \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \quad (3)$$

Аналогичные разложения используются и для функций $v_{i\pm 1, j\pm 1}(t)$, $w_{i\pm 1, j\pm 1}(t)$, $\theta_{i\pm 1, j\pm 1}(t)$ и $\varphi_{i\pm 1, j\pm 1}(t)$. С учетом (3) из (1) и (2) получим следующее выражение для поверхностной плотности функции Лагранжа $L = (T - V)/a^2$:

$$L = \frac{\rho}{2} \left(u_t^2 + v_t^2 + w_t^2 + \frac{l^2}{12} (\theta_t^2 + \varphi_t^2 \sin^2 \theta) \right) - \frac{\rho}{2} [c_1^2 (u_x^2 + v_y^2) + c_2^2 (v_x^2 + u_y^2) + \quad (4)$$

$$+ \frac{l^2}{2} (c_{\theta x}^2 \theta_x^2 + c_{\theta y}^2 \theta_y^2) + s^2 (u_x v_y + u_y v_x) + c_3^2 (w_x^2 + w_y^2) + 2\beta_1 w_y \theta + \beta_2 \theta^2 +$$

$$+ \alpha_1 (u_x w_x^2 + v_y w_y^2) + \alpha_2 (u_x w_y^2 + v_y w_x^2) + \alpha_3 (u_y + v_x) w_x w_y + \alpha_4 u_x \theta^2 + \alpha_5 v_y \theta^2 +$$

$$+ \alpha_6 w_x \theta \varphi + \alpha_7 v_x w_x \theta + \alpha_8 u_x w_y \theta + \alpha_9 u_y w_x \theta + \alpha_{10} v_y w_y \theta].$$

Лагранжиан (4) записан с точностью до слагаемых порядка $\varepsilon^{5/2}$ включительно. Здесь введены обозначения: $c_{1,2,3}$ – скорости распространения соответственно продольной, поперечной и сдвиговой волн, $c_{\theta x}$ и $c_{\theta y}$ – скорости распространения ротационной волны соответственно вдоль осей x и y , s – коэффициент линейной связи между продольными и поперечными волнами, β_1 и β_2 – параметры дисперсии, α_i ($i=1\dots 10$) – коэффициенты нелинейностей, $\rho = M/a^2$ – среднее значение плотности рассматриваемой двумерной среды.

С помощью вариационного принципа Гамильтона-Остроградского из лагранжиана (4) выводится система дифференциальных уравнений первого приближения, описывающая динамические процессы в зернистой среде:

$$\begin{aligned} u_{tt} &= c_1^2 u_{xx} + c_2^2 u_{yy} + s^2 v_{xy} + \frac{1}{2} \frac{\partial F_1}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial F_2}{\partial y}, \\ v_{tt} &= c_2^2 v_{xx} + c_1^2 v_{yy} + s^2 u_{xy} + \frac{1}{2} \frac{\partial F_3}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial F_4}{\partial y}, \\ w_{tt} &= c_3^2 (w_{xx} + w_{yy}) + \beta_1 \theta_y + \frac{1}{2} \frac{\partial F_5}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial F_6}{\partial y}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\frac{l^2}{12} (\theta_{tt} - \varphi_t^2 \sin 2\theta) = \frac{l^2}{2} (c_{\theta x}^2 \theta_{xx} + c_{\theta y}^2 \theta_{yy}) - \beta_1 w_y - \beta_2 \theta - F_7,$$

$$\frac{l^2}{12} \varphi_{tt} \sin^2 \theta = -\alpha_6 w_x \theta.$$

$$\text{Здесь } F_1 = \alpha_1 w_x^2 + \alpha_2 w_y^2 + \alpha_4 \theta^2 + \alpha_8 w_y \theta, \quad F_2 = \alpha_3 w_x w_y + \alpha_9 w_x \theta,$$

$$F_3 = \alpha_3 w_x w_y + \alpha_7 w_x \theta, \quad F_4 = \alpha_1 w_y^2 + \alpha_2 w_x^2 + \alpha_5 \theta^2 + \alpha_{10} w_y \theta,$$

$$F_5 = 2\alpha_1 u_x w_x + 2\alpha_2 v_y w_x + \alpha_3 (u_y + v_x) w_y + \alpha_6 \theta \varphi + \alpha_7 v_x \theta + \alpha_9 u_y \theta,$$

$$F_6 = 2\alpha_1 v_y w_y + 2\alpha_2 u_x w_y + \alpha_3 (u_y + v_x) w_x + \alpha_8 u_x \theta + \alpha_{10} v_y \theta,$$

$$F_7 = \alpha_4 u_x \theta + \alpha_5 v_y \theta + \alpha_6 w_x \varphi + \alpha_7 v_x w_x + \alpha_8 u_x w_y + \alpha_9 u_y w_x + \alpha_{10} v_y w_y -$$

функции нелинейностей.

Система (5) отличается от уравнений классической теории упругости появлением двух дополнительных уравнений для волн микровращений. Кроме того, изгибная мода влияет на продольную и поперечную лишь за счет нелинейных взаимодействий. Линейным образом связаны между собой продольная и поперечная моды, а также изгибная и ротационная.

Коэффициенты линейных частей уравнений (5) выражаются через силовые постоянные $k_0, k_1, k_2, k'_0, k'_1, k'_2$, длину нанотрубок l и период решетки a следующим образом:

$$\rho c_1^2 = k_0 + 2k_1 + \frac{2a^2}{r^2} k_2 + k'_0 + 2k'_1 + \frac{4a^2}{d^2} k'_2,$$

$$\begin{aligned} \rho c_2^2 &= k'_0 + 2k'_1 + \frac{4a^2}{d^2} k'_2, & \rho s^2 &= 2\rho c_2^2, \\ \rho c_{\alpha x}^2 &= k'_1 + \frac{2a^2}{d^2} k'_2, & \rho c_{\theta y}^2 &= k_1 + \frac{a^2}{r^2} k_2 + k'_1 + \frac{2a^2}{d^2} k'_2, \\ \rho \beta_3^2 &= \rho \beta_1 = 2 \left(\frac{l^2}{a^2} k_1 + \frac{l^2}{r^2} k_2 + \frac{2l^2}{d^2} k'_2 \right), & \rho \beta_2 &= 2 \left(\frac{l^2}{r^2} k_2 + \frac{2l^2}{d^2} k'_2 \right), \end{aligned} \quad (6)$$

где $r = \sqrt{l^2 + a^2}$ и $d = \sqrt{l^2 + 2a^2}$ – начальные длины диагональных пружин первой и второй координационных сфер соответственно.

Из (6) следует, что из 8 коэффициентов линейных частей уравнений (5) лишь 6 являются независимыми. Из второго и третьего соотношений (6) вытекает необходимость учета взаимодействия с частицами второй координационной сферы. Если его не учитывать, то обращается в ноль величина ρs^2 , что противоречит теории упругости.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантом РФФИ (проект № 07-02-00172).

Литература

1. Chunyu Li, Tsu-Wei Chou A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes // International Journal of Solids and Structures, 2003, V.40. С.2487–2499.
2. Иванова Е.А., Морозов Н.Ф., Семенов Б.Н., Фирсова А.Д. Об определении упругих модулей наноструктур: теоретические расчеты и методика экспериментов // Механика твердого тела, 2005, № 4, с. 75-85.
3. Miller R.E., Shenoy V.B. Size-dependent elastic properties of nanosized structural elements // Nanotechnology, 2000, V.11, pp.139-147.
4. Pavlov I.S., Potapov A.I., and Maugin G.A. A 2D Granular Medium With Rotating Particles // Int. J. of Solids and Structures, 2006, V. 43, N 20, pp. 6194-6207.
5. Павлов И.С., Потапов А.И. Двумерная модель зернистой среды // Изв. РАН: Механика твердого тела, 2007, № 2, с.110-121.
6. Павлов И.С., Потапов А.И. Структурные модели в механике нанокристаллических сред // ДАН, 2008, т. 421, № 3, с. 348-352.
7. Suiker A.S.J., Metrikine A.V., de Borst R. Comparison of wave propagation characteristics of the Cosserat continuum model and corresponding discrete lattice models // Int. J. of Solids and Structures. 2001. V. 38. P.1563-1583.

*Нижегородский филиал Института машиноведения РАН,
Нижний Новгород, Россия*