

Н. П. Семенюк

К УСТОЙЧИВОСТИ ДВУХСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

*Институт механики им. С.П.Тимошенко НАН Украины,
ул.Нестерова, 3, 03057, Киев, Украина; e-mail: compos@inmech.kiev.ua*

Abstract. An approach is proposed to analysis of stability of orthotropic two-layered shells, that have the mechanical and electrical properties of carbon nanotubes. An interlaminar interaction is assumed to occur by the Van der Waals forces. The parameters of the continuum interlaminar medium are obtained with using the Lennard-Jones potential. The basic system of equations is written through velocities of sixteen variables. The loading and boundary conditions are given separately for each layer. To obtain the numerical results, the procedure of the method of discrete orthogonalization is used. The stability of one- and double-wall nanotubes is studied and analysis of numerical results is given.

Key words: orthotropic cylindrical shell, one- and double-wall nanotubes, stability, Van der Waals forces, boundary conditions, method of discrete orthogonalization.

Введение.

Углеродные нанотрубки (CNT) обладают рядом механических и физических свойств, из-за которых они широко применяются во многих областях современной техники, биологии, медицины [3, 4]. В последние десятилетия во многих научных центрах проводятся интенсивные исследования, дающие возможность оценить эффективность функционирования наноструктурных материалов в современных машинах при различных условиях эксплуатации. При этом актуальным является вопрос о континуализации дискретной структуры нанотрубок с целью применения соотношений механики деформируемого твердого тела для исследования механических процессов на наноуровне. В работах [9, 10, 16, 18] ответ на этот вопрос сводится к решению некоторой задачи методами, учитывающими дискретность структуры CNT и методами механики деформируемого твердого тела. При равенстве в обоих вариантах энергий деформации рассматриваемой структуры, прогибов, критических нагрузок или частот определяют эффективные параметры, позволяющие осуществить этап континуализации. В других задачах можно использовать эти параметры, если изменимость нагрузок, полей напряжений и деформаций того же порядка, что и в решенной задаче. Таким образом установлено, что при решении задачи устойчивости углеродных нанотрубок могут быть использованы уравнения континуальной теории оболочек.

Известно [6], что однослойные углеродные нанотрубки встречаются реже, чем многослойные. Причина состоит в том, что между атомами существуют силы взаимодействия, способствующие образованию цилиндрических слоев. При характерных для межслойного пространства размерах наиболее существенными являются силы притяжения или отталкивания Ван дер Ваальса. Поэтому при постановке задачи устойчивости слоистых нанотрубок следует использовать расчетную модель, в которой учитывались бы указанные межслойные силы.

В работе [10] разработана модель, базирующаяся на предположении, что существует линейно пропорциональное соотношение между изменением сил Ван дер Ваальса и приращением нормальных перемещений двухслойных оболочек. Существует также методика, основанная на использовании константы взаимодействия, полученной при

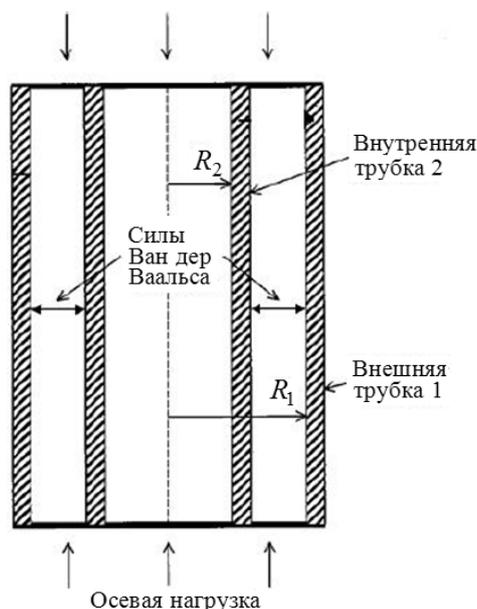
расчете плоских слоев графита [7]. В работах [6, 14, 16] развита методика расчета на устойчивость многослойных цилиндрических оболочек с учетом наличия сил взаимодействия между всеми слоями.

Такая модель более предпочтительна по сравнению с моделями, в которых не учитывается дискретность строения оболочки [11, 12].

Ниже предложена модель расчета, которая основана на исходном рассмотрении межслойного пространства как сплошного слоя, механические параметры которого получены при континуализации сил Ван дер Ваальса. Слои нанотрубки имеют столько же степеней свободы, как и однослойные оболочки, несмотря на наличие связей, которые возникают из-за совместной работы слоев. Численный метод расчета позволяет учитывать эффект различных граничных условий. Согласно публикациям [15, 17], влияние условий закрепления на устойчивость нанотрубок изучено недостаточно. На необходимость и целесообразность проведения исследований по механике нанотрубок как армирующих элементов обоснованно указано в работах [3, 17].

1. К нелинейной теории многослойных цилиндрических оболочек с учетом дискретности слоев.

Рассмотрим многослойную цилиндрическую оболочку, состоящую из жестких слоев, связь между которыми осуществляется с помощью материала, имеющего более низкие механические характеристики. Принимаем, что основными параметрами, достаточными для описания жестких слоев, являются обобщенные перемещения, деформации и напряжения теории оболочек Кирхгофа – Лява. В слоях-связях в соответствии с их назначением учитываются жесткости поперечного сдвига и растяжения – сжатия в трансверсальном направлении. На рисунке показан элемент рассматриваемой оболочки.



Введем следующие обозначения: h_i – толщина i -го жесткого слоя; t_i – толщина i -го мягкого слоя; R_i, r_i – радиусы срединной поверхности соответственно i -го жесткого и мягкого слоев. Учитывая аддитивные свойства потенциальной энергии деформации оболочки, представим ее в таком виде:

$$\mathcal{E} = \sum_{i=1}^N \mathcal{E}_i^{(a)} + \sum_{i=1}^{N-1} \mathcal{E}_i^{(c)}, \quad (1)$$

где $\mathcal{E}_i^{(a)}$ – потенциальная энергия деформации i -го жесткого слоя; $\mathcal{E}_i^{(c)}$ – потенциальная энергия деформации i -го мягкого слоя при условии его непрерывности; N – количество жестких слоев в оболочке.

В соответствии с гипотезами Кирхгофа – Лява для жестких слоев выражение потенциальной энергии деформации имеет вид

$$\mathcal{E}_i^{(a)} = \frac{1}{2} \int_0^L \int_0^{2\pi R_i} \left(T_{11}^i \varepsilon_{11}^i + T_{22}^i \varepsilon_{22}^i + T_{12}^i \varepsilon_{12}^i + M_{11}^i k_{11}^i + M_{12}^i k_{12}^i + M_{22}^i k_{22}^i \right) dx dy. \quad (2)$$

Здесь T_{mn}^i , M_{mn}^i – усилия и моменты, действующие на единицу длины элемента срединной поверхности i -го слоя; ε_{mn}^i , k_{mn}^i – деформации растяжения – сжатия, изменения кривизны и кручения данной поверхности; L – длина оболочки; x , y – координатные линии поверхности, направленные по образующей и направляющей цилиндра.

Нелинейные соотношения между деформациями и перемещениями u^i , v^i , w^i каждого несущего слоя принимаем в таком виде:

$$\varepsilon_{11}^i = \frac{\partial u^i}{\partial x} + \frac{1}{2} \theta_1^2; \quad \varepsilon_{12}^i = \frac{\partial u^i}{\partial y} + \frac{\partial v^i}{\partial x} + \theta_1 \theta_2^i; \quad \varepsilon_{22}^i = \frac{\partial v^i}{\partial y} - \frac{w^i}{R_i} + \frac{1}{2} (\theta_2^i)^2. \quad (3)$$

Приращения кривизны и кручения также выражаются через перемещения:

$$k_{11}^i = -\frac{\partial^2 w^i}{\partial x^2} = -\frac{\partial \theta_1^i}{\partial x}; \quad k_{22}^i = -\frac{\partial^2 w^i}{\partial y^2} - \frac{1}{R_i} \frac{\partial v^i}{\partial y} = -\frac{\partial \theta_2^i}{\partial y};$$

$$k_{12}^i = -2 \frac{\partial^2 w^i}{\partial x \partial y} - \frac{1}{R_i} \frac{\partial v^i}{\partial x} = -\frac{\partial \theta_1^i}{\partial y} - \frac{\partial \theta_2^i}{\partial x} \left(\theta_1 = \frac{\partial w}{\partial x}, \theta_2 = \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{v}{R} \right). \quad (4)$$

Вследствие малой толщины жестких слоев соотношения закона Гука принимаем в виде

$$T_{11}^i = C_{11}^i \varepsilon_{11}^i + C_{12}^i \varepsilon_{22}^i; \quad M_{11}^i = D_{11}^i k_{11}^i + D_{12}^i k_{22}^i;$$

$$T_{22}^i = C_{12}^i \varepsilon_{11}^i + C_{22}^i \varepsilon_{22}^i; \quad M_{22}^i = D_{12}^i k_{11}^i + D_{22}^i k_{22}^i; \quad (5)$$

$$T_{12}^i = C_{66}^i \varepsilon_{12}^i; \quad M_{12}^i = D_{66}^i k_{12}^i.$$

Потенциальная энергия деформации k -го мягкого слоя определяется выражением

$$\mathcal{E}_k^{(c)} = \frac{1}{2} \int_0^L \int_0^{2\pi r_k} \int_{-t_k/2}^{t_k/2} \left(\sigma_{13}^k \varepsilon_{13}^k + \sigma_{23}^k \varepsilon_{23}^k + \sigma_{33}^k \varepsilon_{33}^k \right) dx dy dz. \quad (6)$$

Если в уравнениях равновесия теории упругости пренебречь напряжениями в направлении осей x , y , то получим [2], что напряжения σ_{13} будут распределены по толщине равномерно, следовательно, это будет относиться и к деформациям ε_{13} . Это дает возможность для перемещений мягкого слоя записать закон изменения перемещений по толщине:

$$u = u_0 + z\theta, \quad v = v_0 + z\psi, \quad w = w_0 + z\chi. \quad (7)$$

С учетом (7) после интегрирования по координате z для потенциальной энергии деформации мягкого слоя получим выражение

$$\mathfrak{E}_k^{(c)} = \frac{1}{2} \int_0^L \int_0^{2\pi r_k} \left[N_{13} \varepsilon_{13} + N_{23} \varepsilon_{23} + N_{33} \varepsilon_{33} + M_{13} \frac{\partial \chi}{\partial x} + M_{23} \left(\frac{\partial \chi}{\partial y} + \frac{\psi}{R_k} \right) \right] dx dy \quad (8)$$

$$\left[\varepsilon_{13} = \theta + \frac{\partial w_0}{\partial x}; \varepsilon_{23} = \psi + \frac{\partial w_0}{\partial y} + \frac{v_0}{R}; \varepsilon_{33} = \chi; N_{13} = G_{13} t_k \varepsilon_{13}; \right.$$

$$N_{23} = G_{23} t_k \varepsilon_{23}; N_{33} = E_3 t_k \varepsilon_{33}; M_{23} = \frac{1}{12} G_{23} t_k^3 \left(\frac{\partial \chi}{\partial y} + \frac{\psi}{R_k} \right); M_{13} = \frac{1}{12} G_{13} t_k^3 \left(\frac{\partial \chi}{\partial x} \right);$$

G_{13}, G_{23}, E_3 – модули сдвига и трансверсальной упругости рассматриваемого слоя $\left. \right]$.

Пусть k -й мягкий слой связывает i -й и $(i+1)$ -й жесткие слои. Из условий равенства перемещений на поверхностях контакта получим формулы

$$u_0 = \frac{1}{2} \left(u_i + u_{i+1} + \frac{h_{i+1}}{2} \frac{\partial w_{i+1}}{\partial x} - \frac{h_i}{2} \frac{\partial w_i}{\partial x} \right);$$

$$v_0 = \frac{1}{2} \left[v_i + v_{i+1} + \frac{h_{i+1}}{2} \left(\frac{\partial w_{i+1}}{\partial y} + \frac{v_{i+1}}{R_{i+1}} \right) - \frac{h_i}{2} \left(\frac{\partial w_i}{\partial y} + \frac{v_i}{R_i} \right) \right]; w_0 = \frac{1}{2} (w_i + w_{i+1});$$

$$\theta = \frac{1}{l_k} \left(u_{i+1} - u_i + \frac{h_{i+1}}{2} \frac{\partial w_{i+1}}{\partial x} + \frac{h_i}{2} \frac{\partial w_i}{\partial x} \right); \chi = \frac{1}{l_k} (w_{i+1} - w_i); \quad (9)$$

$$\psi = \frac{1}{l_k} \left[v_{i+1} - v_i + \frac{h_{i+1}}{2} \left(\frac{\partial w_{i+1}}{\partial y} + \frac{v_{i+1}}{R_{i+1}} \right) + \frac{h_i}{2} \left(\frac{\partial w_i}{\partial y} + \frac{v_i}{R_i} \right) \right].$$

Таким образом, деформации мягкого слоя полностью определяются перемещениями жестких слоев, ограничивающих этот слой, т.е. имеем

$$\varepsilon_{13} = \frac{1}{l_k} (u_{i+1} - u_i) + \frac{1}{2l_k} (h_{i+1} + h_i) \frac{\partial w_{i+1}}{\partial x} + \frac{1}{2l_k} (h_i + h_k) \frac{\partial w_i}{\partial x};$$

$$\varepsilon_{23} = \frac{1}{l_k} \left[v_{i+1} - v_i + \left(\frac{h_{i+1}}{2R_{i+1}} + \frac{l_k}{2r_k} \right) \frac{\partial w_{i+1}}{\partial \psi} + \left(\frac{h_i}{2R_i} + \frac{l_k}{2r_k} \right) \frac{\partial w_i}{\partial \psi} \right]; \varepsilon_{33} = \frac{1}{l_k} (w_{i+1} - w_i). \quad (10)$$

При выводе выражений (10) опущены малые по сравнению с единицей слагаемые $h_i / R_i, l_k / r_k$. Однако изменение метрики по толщине оболочки учитывается, так как для каждого жесткого слоя принят радиус кривизны его середины поверхности.

В соответствии с принципом Лагранжа имеем равенство

$$\delta \mathfrak{E} - \delta A = 0, \quad (11)$$

где \mathfrak{E} – потенциальная энергия деформации; A – работа внешних сил. Потенциальная энергия деформации оболочки определяется выражением (1). Если учесть выражения (2), (3), то из вариационного принципа при $N = 2$ получаем уравнения

$$\frac{\partial T_{11}^{(i)}}{\partial x} + \frac{\partial T_{12}^{(i)}}{\partial y} + (-1)^{i+1} \frac{1}{l_i} N_{13}^{(1)} = 0;$$

$$\frac{\partial T_{12}^{(i)}}{\partial x} + \frac{\partial T_{22}^{(i)}}{\partial y} - \frac{1}{R_2^i} T_{23}^{(i)} + (-1)^{i+1} \frac{1}{t_i} N_{23}^{(1)} = 0;$$

$$\frac{\partial T_{13}^{(i)}}{\partial x} + \frac{\partial T_{23}^{(i)}}{\partial y} - \frac{1}{R_2^i} T_{22}^{(i)} + (-1)^{i+1} \frac{1}{t_i} N_{33}^{(1)} + q = 0, \quad (i=1,2) \quad (12)$$

$$\left[T_{13} = \frac{\partial M_{11}}{\partial x} + 2 \frac{\partial M_{12}}{\partial y}, \quad T_{23} = \frac{\partial M_{22}}{\partial y}, \quad T_{13}^* = T_{13} + T_{11}\theta_1 + T_{12}\theta_2, \quad T_{23}^* = T_{23} + T_{12}\theta_1 + T_{22}\theta_2 \right]. \quad (13)$$

Граничные условия для каждого слоя формулируем относительно четырех величин, взятых по одной из таких пар:

$$\left(T_{11}^{(i)}, u_i \right); \left(T_{12}^{(i)} - \frac{M_{12}}{R_2}, v_i \right); \left(T_{13}^{(i)} + \frac{\partial M_{12}}{\partial y}, w_i \right); \left(M_{11}^{(i)}, \theta_1^{(i)} \right) \text{ при } x = 0, L. \quad (14)$$

По координате y оболочки – замкнутые.

Представленные нелинейные соотношения и уравнения описывают напряженно-деформированное состояние двухслойных с взаимодействием в трансверсальном направлении оболочек (DWCNT) по всей траектории нагружения, включая особые точки типа предельных и бифуркации.

Для решения задач, соответствующих различным этапам нагружения, в большинстве работ используют формулировки, основанные на некоторых упрощающих предположениях. Наиболее реальным подходом является использование метода непрерывного продолжения по параметру [1]. В этом случае методом дискретной ортогонализации [1, 5] находим решение линейной краевой задачи относительно скоростей (производных по параметру продолжения) разрешающих функций и задачи Коши для определения самих функций. В качестве разрешающих функций в данной задаче выбираем те, через которые формируются граничные условия (14). Тогда имеем равенства:

$$y_1 = T_{11}^{(1)}; \quad y_2 = T_{12}^{(1)} - \frac{M_{12}^{(1)}}{R_2^{(1)}}; \quad y_3 = T_{13}^{(1)} + T_{11}^{(1)}\theta_1^{(1)} + T_{12}^{(1)}\theta_2^{(1)} + \frac{\partial M_{12}^{(1)}}{\partial y};$$

$$y_4 = M_{11}^{(1)}; \quad y_5 = u^{(1)}; \quad y_6 = v^{(1)}; \quad y_7 = w^{(1)}; \quad y_8 = \theta_1^{(1)};$$

$$y_9 = T_{11}^{(2)}; \quad y_{10} = T_{12}^{(2)} - \frac{M_{12}^{(2)}}{R_2^{(2)}}; \quad y_{11} = T_{13}^{*(2)} - \frac{\partial M_{12}^{(2)}}{\partial y};$$

$$y_{12} = M_{11}^{(2)}; \quad y_{13} = u^{(2)}; \quad y_{14} = v^{(2)}; \quad y_{15} = w^{(2)}; \quad y_{16} = \theta_1^{(2)}. \quad (15)$$

Систему линейных уравнений относительно скоростей представляем в нормальном виде, т.е.

$$\frac{d\dot{Y}}{dx} = A\dot{Y} + b, \quad (16)$$

где \dot{Y} – вектор с компонентами $(\dot{y}_1, \dots, \dot{y}_{16})$, A – матрица размером (16×16) , b – вектор-столбец, содержащий скорости поверхностной нагрузки.

Граничные условия заданы в виде:

$$A_1 \dot{Y} = b_1, \quad A_2 \dot{Y} = b_2. \quad (17)$$

Тогда задача Коши имеет такой вид:

$$\frac{dY}{dt} = \dot{Y}; \quad \dot{Y}\Big|_{t=0} = 0. \quad (18)$$

2. Континуальное моделирование межслоевого взаимодействия Ван дер Ваальса.

Полученные выше соотношения для среднего слоя являются частью континуальной модели межслоевого пространства рассматриваемой двухслойной нанотрубки. Остаются неизвестными модули E_3 , G_{13} , G_{23} . Их можно определить, если воспользоваться аналитическим выражением для энергии межатомного взаимодействия ван дер Ваальса. Эта энергия может быть описана с помощью потенциала Леннарда – Джонса [8]

$$V(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (19)$$

где r – расстояние между взаимодействующими атомами; ε – глубина потенциала; σ – параметр, определяемый при $V(r) = 0$.

Силу взаимодействия Ван дер Ваальса определим при дифференцировании по r потенциала (19), т.е. имеем

$$F(r) = -\frac{dV(r)}{dr} = \frac{24\varepsilon}{\sigma} \left[2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^7 \right]. \quad (20)$$

В зависимости от величины отношения σ/r сила $F(r)$ может быть как положительной (притяжение), так и отрицательной (отталкивание). При $r_0 = \sqrt[6]{2}\sigma$ сила $F(r_0) = 0$. При значении r , незначительно отличающемся от r_0 , выражение $F(r)$ может быть представлено разложением

$$F(r) = F_0(r_0) + F'(r_0)(r - r_0) + \dots = r_0 V''(r_0) \frac{r - r_0}{r_0} + \dots = V''(r_0)(r - r_0). \quad (21)$$

Если заменить расстояние между взаимодействующими атомами длиной r_0 , то в (21) произведение $r_0 V''(r_0)$ будет модулем упругости E , а соотношение $(r - r_0)/r_0$ – деформацией $\varepsilon(r)$, т.е.

$$F(r) = E\varepsilon(r). \quad (22)$$

Для двухслойной оболочки с использованием принятых обозначений при $\theta = 0$ – $r_0 = R_1 - R_2 = t_0$, $r - r_0 = W_2 - W_1$. Однако каждый атом одного слоя взаимодействует со всеми атомами второго, поэтому вместо соотношений (22) в континуальном варианте необходимо определить силу взаимодействия между атомами, содержащимися на единичной площадке первого слоя со всеми атомами второго слоя.

Расстояние \bar{r}_0 между взаимодействующими атомами при $\theta = 0$ определяется как

$$\bar{r}_0 = t_0 \sqrt{1 + 4 \left(\frac{R_1}{t_0} \right) \left(\frac{R_2}{t_0} \right) \sin^2 \frac{\theta}{2} + \left(\frac{z}{t_0} \right)^2}. \quad (23)$$

Если все атомы на поверхности первой оболочки взаимодействуют со всеми атомами на единичной поверхности внутренней оболочки, то равенство (23) примет вид

$$F(r) = \left(\frac{4\sqrt{3}}{9a^2} \right)^2 \frac{24\varepsilon}{\sigma^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left[2\sigma \left(\frac{\sigma}{r_0} \right)^{14} - 7 \left(\frac{\sigma}{r_0} \right)^8 \right] (r - r_0) R_2 dz d\theta. \quad (24)$$

Выполнив интегрирование по z , получим равенство

$$F(r) = \left[\frac{1120\pi\varepsilon\sigma^6}{9a^4} E_{ij}^7 - \frac{1101\pi\varepsilon\sigma^{12}}{3a^4} E_{ij}^{13} \right] R_2(r - r_0).$$

Для углеродных нанотрубок (CNT) имеем

$$\varepsilon = 0,00239 \text{ eV} = 0,00038292 \text{ нМ}; \quad \sigma = 0,3415 \text{ нМ}; \quad (25)$$

$$a = 0,142 \text{ нМ}; \quad \text{C - C bond length } R_1 - R_2 = t_0 = 0,34 \text{ нМ} = \sigma;$$

$$E_{ij}^m = \frac{1}{t_0^m} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\theta}{\left(1 + 4 \frac{R_1 R_2}{t_0^2} \sin^2 \theta\right)^{\frac{m}{2}}}. \quad (26)$$

Из сравнения выражений (22) и (24) следует, что модуль E_3 для континуальной сплошной среды можно приближенно вычислить по формуле

$$E_3 = t_0 C \quad (27)$$

$$\left(C = \left[\frac{1120\pi\varepsilon}{9a^4} E_{ij}^7 - \frac{1101\pi\varepsilon}{3a^4} E_{ij}^{13} \right] R_2, \quad t_0 = \sigma, \quad \tilde{E}_{ij}^m = t_0^m E_{ij}^m \right). \quad (28)$$

Модули G_{13} , G_{23} полагаем равными нулю, так как они существенно меньше модуля E_3 .

3. Числовые результаты и их анализ.

Используя имеющиеся в публикациях [13, 14] данные о механических и геометрических свойствах углеродных нанотрубок, определим для них критические значения осевых нагрузок при граничных условиях шарнирного опирания (по аналогии с работами [9, 10, 13, 14]), а также при других вариантах закрепления торцов.

В табл. 1 приведены (в принятой в теории оболочек форме) восемь вариантов граничных условий S1-S4 и C1-C4. Индексы 1, 2 показывают, что равенство имеет место как для внешней (1), так и для внутренней (2) оболочек в случае DWCNT. Для однослойной трубки (SWCNT) нет необходимости в использовании индексов. При определении докритического состояния, граничные условия могут быть однородными или неоднородными в зависимости от типа действующей на оболочку нагрузки. При осевом сжатии на одном из торцов необходимо задать действующее усилие, на противоположном – принять равным нулю перемещение или заменить его условием симметрии относительно середины оболочки. Ниже при решении задач использован первый подход.

Таблица 1

S1	$T_{11}^{1,2} = 0$	$T_{12}^{1,2} = 0$	$w^{1,2} = 0$	$M_{11}^{1,2} = 0$	$T_{12}^{1,2} = 0$
S2	$u^{1,2} = 0$	$T_{12}^{1,2} = 0$	$w^{1,2} = 0$	$M_{11}^{1,2} = 0$	$T_{12}^{1,2} = 0$
S3	$T_{11}^{1,2} = 0$	$v^{1,2} = 0$	$w^{1,2} = 0$	$M_{11}^{1,2} = 0$	$v^{1,2} = 0$
S4	$u^{1,2} = 0$	$v^{1,2} = 0$	$w^{1,2} = 0$	$M_{11}^{1,2} = 0$	$v^{1,2} = 0$
C1	$T_{11}^{1,2} = 0$	$T_{12}^{1,2} = 0$	$w^{1,2} = 0$	$\frac{\partial w^{1,2}}{\partial x} = 0$	$T_{12}^{1,2} = 0$
C2	$u^{1,2} = 0$	$T_{12}^{1,2} = 0$	$w^{1,2} = 0$	$\frac{\partial w^{1,2}}{\partial x} = 0$	$T_{12}^{1,2} = 0$
C3	$T_{11}^{1,2} = 0$	$v^{1,2} = 0$	$w^{1,2} = 0$	$\frac{\partial w^{1,2}}{\partial x} = 0$	$v^{1,2} = 0$
C4	$u^{1,2} = 0$	$T_{12}^{1,2} = 0$	$w^{1,2} = 0$	$M_{11}^{1,2} = 0$	$T_{12}^{1,2} = 0$

Описанные многими авторами методы континуализации [9, 10, 13, 14] позволяют обоснованно рассматривать нанотрубки как сплошные цилиндрические оболочки. В работе [14] для них получены значения модулей упругости и сдвига, приведенные в табл. 2 (как известно, углеродные нанотрубки отличаются своей структурой, которая проявляется в их хиральности [3]). В данной таблице в первом столбце записаны механические характеристики для SWCNT с креслоподобной структурой (9,9); во втором и третьем столбцах – для DWCNT со структурой [(4,4), (9,9)] и [(9,9), (14,14)]. Геометрические параметры оболочек приняты такими же, как и в работе [14]. Все три оболочки имеют длину 5,32 нм; однослойная оболочка (9,9) имеет радиус $R = 0,61$ нм; толщину $h = 0,066$ нм; для DWCNT [(4,4), (9,9)] – $R_1 = 0,61$ нм, $R_2 = 0,27$ нм, $h = 0,075$ нм; для третьего типа оболочка имеет $R_1 = 0,95$ нм, $R_2 = 0,61$ нм, $h = 0,075$ нм.

Таблица 2

E, G, ν	(9,9)	[(4,4), (9,9)]	[(9,9), (14,14)]
E_{11}	5,7911	5,4824	5,1054
E_{22}	7,9735	7,5435	7,0294
G_{12}	1,9840	1,8610	1,7912
ν_{12}	0,169	0,169	0,169

Полученные по предлагаемой расчетной методике критические нагрузки (в нН) для оболочек указанных структур с граничными условиями S1-S4 и C1-C4 приведены в табл. 3. В работе [14] при граничных условиях S3 критические нагрузки составили: $P_{cr} = 79,43$ нН, $106,75$ нН, 114 нН. Сравнивая их с данными табл. 3, замечаем, что только для оболочки [(9,9), (14,14)] величины критических нагрузок совпадают. Различие между расчетными величинами работы [14] и полученными по предлагаемой методике объясняется тем, что уравнения указанной работы соответствуют варианту теории Муштари – Доннелла – Власова, справедливой при $n \gg 1$, а также постановкой задачи, в основе которой лежит предположение о безмоментности докритического состояния. Учет влияния деформаций поперечного сдвига [2] при маловолновых формах потери устойчивости – незначительный.

Таблица 3

S1	50,17	42,79	79,09
S2	53,34	58,56	80,17
S3	63,60	48,10	113,55
S4	73,04	84,46	127,85
C1	64,51	49,40	115,28
C2	72,95	85,10	127,85
C3	65,15	50,66	116,15
C4	73,13	81,88	128,28

Выводы.

В работе предложена методика исследования нелинейного деформирования слоистых углеродных нанотрубок при осевом сжатии, в том числе расчета критических значений нагрузки, при которой нанотрубка теряет устойчивость. Методика основана на континуальной модели, в которой каждая трубка DWCNT рассматривается как ортотропная оболочка при наличии в промежутках между слоями сил Ван дер Ваальса. С использованием потенциала Леннарда – Джонса построена также континуальная модель промежуточного слоя. В теории многослойных оболочек дискретного строения такой слой именуется «мягким». Уравнения этой теории использованы для построения разрешающей системы дифференциальных уравнений нормального вида. Численная реализация изложенной методики выполнена для двухслойной оболочки с промежуточным мягким слоем.

Выполнен расчет критических нагрузок трех типов оболочек с креслоподобной структурой, механические характеристики которых определены с помощью методов молекулярной динамики в работах [6, 9, 10]. Сравнение критических нагрузок данной

работы и работы [14] при граничных условиях S3 показало существенное влияние нелинейности докритического состояния, а также точности используемой теории в случае характерных для нанотрубок геометрических размеров.

Получены числовые данные о влиянии граничных условий S1 – S4 и C1 – C4 на устойчивость SWCNT и DWCNT. Показан их существенный разброс. Какие из полученных значений соответствуют устойчивости нанотрубок, следует провести дополнительное исследование с учетом того, что на концах нанотрубки атомы расположены на поверхности в виде полушара.

Р Е З Ю М Е Запропоновано підхід до розрахунку стійкості ортотропних двошарових оболонок, що мають механічні та електричні властивості вуглецевих нанотрубок. Міжшарова взаємодія відбувається за рахунок сил Ван дер Ваальса. З використанням потенціалу Ленарда – Джонса отримано параметри континуального міжшарового середовища. Розв'язувальна система рівнянь записується відносно швидкостей шістнадцяти змінних. Навантаження і граничні умови задано окремо для кожного шару. Для отримання числових результатів застосовано процедуру методу дискретної ортогоналізації. Досліджено стійкість одно- і двошарових нанотрубок. Числові результати представлено у вигляді таблиць та дано їх аналіз.

1. *Баженов В.А., Семенов М.П., Трач В.М.* Нелінійне деформування, стійкість і закритична поведінка анізотропних оболонок. – К.: Каравела, 2010. – 352 с.
2. *Ванин Г.Л., Семенов Н.П.* Устойчивость оболочек из композиционных материалов с несовершенствами. – К.: Наук. думка, 1987. – 200 с.
3. *Гузь А.Н., Руцицкий Я.Я., Гузь И.А.* Введение в механику нанокомпозитов. – К.: Институт механики им.С.П.Тимошенко, 2010. – 398 с.
4. *Elishakoff I., Pentaras D. et al.* Carbon nanotubes and Nanosensors: Vibration, Buckling and Bullistic Impact. – Wiley-ISTE, 2012. – 448 p.
5. *Grigorenko A.Ya., Efimova T.L., Korotkikh Yu.A.* Free Axisymmetric Vibrations of Cylindrical Shells Made of Functionally Graded Materials // Int. Appl. Mech. – 2015. – **51**, N 6. – С. 654 – 664.
6. *He X.Q., Hitipornchai S., Liew H.M.* Buckling analysis of multiwalled carbon nanotubes: a continuum model accounting for van der Waals interaction // J. Mech. Phys. Solids. – 2005. – **53**. – P. 303 – 326.
7. *Kachanov L.M.* Delamination Buckling of Composite Materials. – Kluwer Academic, Dordrecht, 1988. – 96 p.
8. *Lennard-Jones J.E.* The determination of molecular fields: from the variation of the viscosity of a gas with temperature // Proc. of the Royal Society. – 1924. – 106A, 441.
9. *Ru C.Q.* Effect of van der Waals forces on axial buckling of a double-walled carbon nanotube // J. of Applied Physics. – 2000. – **87**. – P. 7227 – 7231.
10. *Ru C.Q.* Effective bending stiffness of carbon nanotubes // Physics Review. – 2000. – **62**. – P. 9973 – 9976.
11. *Semenyuk N.P.* Nonlinear Deformation of Shells with Finite Angles of Rotation and Low Elastoplastic Strains // Int. Appl. Mech. – 2015. – **51**, N 2. – P. 149 – 158.
12. *Semenyuk N.P., Trach V.M., Zhukova N.B.* The Theory of Stability of Cylindrical Composite Shells Revisited // Int. Appl. Mech. – 2015. – **51**, N 4. – P.449 – 460.
13. *Shen H.S., Zhang C.L.* Postbuckling of double-walled carbon nanotubes with temperature depended properties and initial defects under combined axial and radial mechanical loads // Int. J. Solids and Struct. – 2003. – **44**. – P. 1461 – 1487.
14. *Shen H.S., Zhang C.L.* Noncocal Shear Deformable Shell Model for Post-Buckling of Axially Compressed Double-Walled Carbon Nanotubes Embedded in an Elastic Matrix // J. of Appl. Mech. – 2010. – **77**, N 4. – P. 1 – 12.
15. *Tong F.M., Wang C. Y., Adhikari S.* Axial buckling of multiwall carbon nanotubes with heterogeneous Boundaries // J. of Applied Physics. – 2009. – **105**, N 9. – P. 094325.
16. *Wang C.Y., Ru C.Q., Mioduchowski A.* Axially Compressed buckling of pressured multiwall carbon nanotubes // Int. J. Solids and Struct. – 2003. – **40**, N 15. – P. 3893 – 3911.
17. *Wang C.M., Zhang Y.Y., Xiang Y., Reddy J.N.* Recent Studies on Buckling of Carbon Nanotubes // Appl. Mech. Reviews. – 2010. – **63**, N 3. – P. 1 – 18.
18. *Yakobson B.I., Brabec C.J., Brabec J.* Nanomechanics of carbon tubes instabilities beyond linear response // Physical Review Letters. – 1996. – **76**. – P. 2511 – 2514.

Поступила 15.09.14

Утверждена в печать 22.12.2015