

А.Н.Гузь¹, Я.Я.Рушицкий²

О ПОСТРОЕНИИ ОСНОВ МЕХАНИКИ НАНОКОМПОЗИТОВ (ОБЗОР)

*Институт механики им. С.П. Тимошенко НАНУ,
ул. Нестерова 3, 03057, Киев, Украина;*

e-mail: ¹ guz@carrier.kiev.ua , ² rushch@inmech.kiev.ua

Abstract. A general view on mechanics of nanocomposite materials is stated, which allows to formulate a system of approaches and methods of analysis in this area. A place of mechanics in studying the materials and the dividing of mechanics on macromechanics, mesomechanics, micromechanics and nanomechanics structural levels are discussed. A short-form historical sketch of development in technology of making the nanomaterials is expounded. The examples of different nanotechnologies and nanomaterials are given. The typical nanomaterials and their properties are described. Severally the matrixes and reinforcing elements of nanocomposite materials as well as their properties are considered. A variant of classification of nanocomposite materials is proposed. A special attention is drawn to modeling in structural mechanics of composites, principles of continualization and homogenization, edge and near-the-surface effects, validity ranges of continuum approach, bilateral estimates. Two basic models are discussed within the framework of the basic approach as the collection of concepts, models and problem statements, the development of method of analysis and obtaining the basic results adequate to mechanical phenomena in nanocomposites. The presented material corresponds, in the main, to the book Guz A.N., Rushchitsky J.J., Guz I.A., Introduction to Mechanics of Nanocomposites, Kiev, S.P.Timoshenko Institute of Mechanics, 2010, 398 p.

Key words: nanocomposite, constructing the foundation of nanomechanics, general approach, principles of modeling the nanocomposites.

Введение.

Новые способы применения материалов и создание новых материалов всегда определяли вехи в истории человечества. Так было, когда первобытный человек прикрепил более прочный наконечник (камень или кость) к деревянной части копья; так происходит и в наши дни при создании новых наноматериалов применительно к космическим технологиям или микроэлектронике. Эпохи развития человечества принято называть каменным веком, бронзовым веком, железным веком. Также существует деление близких к нам эпох на индустриальную и постиндустриально-информационную; ряд авторов, например [203], предлагают также выделить теперь и нанотехнологическую эпоху. Все же целесообразно считать, что в наше время уровень научно-технического развития каждого государства в значительной мере определяется уровнем разработок по новым материалам, информационным технологиям и проблемам биоинженерии.

Необходимо отметить, что в науке о материалах и в промышленности созданию новых материалов уделяется существенное внимание. Количество новых материалов растет очень быстро; к примеру, в базе данных Центра Вудро Вильсона (США) (<http://www.wilsoncenter.org/>) содержится описание более 600 продуктов со всего мира, которые самоидентифицированы производителями как содержащие *наноматериалы* и которые широко используются.

В разработке научно-технических проблем, относящихся к созданию и изучению новых материалов, принимают участие представители различных научных направлений фундаментального и прикладного характера (физики, химики, материаловеды, механики, специалисты по компьютерным наукам и т.д.). При этом привлекаются возможности и подходы каждого из направлений.

На заключительном этапе создания новых материалов, очевидно, перспективными можно считать лишь конструкционные материалы, т.е. материалы, которые с применением определенных технологий могут быть воплощены в различные элементы конструкций (стержни, пластины, оболочки, массивные элементы и т.д.). В связи с этим в процессе создания новых конструкционных материалов надлежащее место занимает одна из старейших наук – механика, так как в наши дни вопросы механики материалов и элементов конструкций из них относятся к компетенции механики.

Это специфическое место механики определяет *первый момент*, который следует учитывать при подготовке публикаций по наномеханике материалов.

Необходимо отметить, что среди различных направлений, относящихся к проблеме создания новых материалов, в последние десятилетия XX века и в первом десятилетии XXI века весьма активно развивается направление по созданию наноматериалов. Его характерной чертой является создание материалов, в состав которых входят нанообразования, минимальные размеры поперечных сечений которых составляют несколько нанометров; в связи с этим создание и анализ нанообразований проводится с учетом атомной структуры. Вполне очевидно, что в силу столь тонкой структуры нанообразования не могут успешно функционировать самостоятельно как конструкционные материалы. Обычный путь такой: из нанообразований создаются *нанокомпозиции*, в которых наполнителем (армирующими элементами) являются нанообразования. В цельный композитный материал армирующие элементы объединяет связующее (матрица); в большинстве исследований в качестве связующего используются различные полимерные композиции.

Очевидная перспективность функционирования наноматериалов в качестве конструкционных материалов в виде нанокompозитов является *вторым моментом*, который следует учитывать при подготовке публикаций по наномеханике материалов.

Целесообразно подчеркнуть, что механика нанокompозитов, как составная часть наноматериаловедения, активно развивается в различных научных центрах и по этому направлению публикуются многочисленные, на первый взгляд, не поддающиеся учету и анализу, результаты. Так, в международной базе данных *Google* содержится информация об около 115 000 публикаций по механике нанокompозитов; более подробную информацию можно получить по адресу:

<http://www.google.com/search?hl=en&source=hp&q=mechanics+of+nanocomposites>

Столь активная публикация результатов по механике нанокompозитов свидетельствует об, с одной стороны, актуальности и перспективности этого научного направления и его разработок и, с другой стороны, о преждевременности подготовки монографий, подводящих итоги развития на определенном этапе.

Актуальность и популярность исследований по механике нанокompозитов является *третьим моментом*, который необходимо учитывать при подготовке публикаций по наномеханике материалов.

Несмотря на отмеченную выше активность исследований и обилие публикаций по механике нанокompозитов, в настоящее время, по-видимому, в этом направлении сформировалась следующая ситуация.

Подавляющее число публикаций по механике нанокompозитов в мировой литературе посвящено изложению актуальных и важных результатов, относящихся к отдельным конкретным аспектам этого направления. Все же можно считать, что практически отсутствуют, за незначительным исключением, публикации с изложением общих подхо-

дов и принципов (методов) построения основ механики нанокompозитов; это существенно усложняет анализ и оценку уже полученных результатов и перспективность их развития.

Целесообразность разработки и изложения *общих подходов и принципов* построения механики нанокompозитов (а точнее, вариантов подходов и принципов построения) является *четвертым моментом*, который необходимо учитывать при подготовке публикаций по наномеханике материалов.

Указанные выше четыре момента определили содержание настоящей статьи. Она посвящена изложению общего подхода к построению основ механики нанокompозитов и принципов (методов) исследования ряда классов задач, относящихся к различным проблемам статике, динамике, устойчивости и разрушения нанокompозитов.

Необходимо отметить, что в список литературы включены публикации авторов в периодических изданиях [69, 70, 99, 100, 103 – 108, 113 – 119, 160, 161], в которых изложены результаты по механике нанокompозитов; в статью также включены результаты, изложенные в монографиях авторов [15, 68] и относящиеся к механике нанокompозитов. В списке содержатся также публикации в периодических изданиях других авторов, которые использованы при написании статьи. При включении публикаций других авторов по механике нанокompозитов возникла ситуация, когда оказалось невозможным отразить в одной статье имеющийся к настоящему времени огромный массив таких публикаций. В связи с этим, предложенный список не может претендовать на до статочно исчерпывающий перечень публикаций по механике нанокompозитов в периодических изданиях. Более полное представление о публикациях по механике нанокompозитов можно получить из известных международных баз данных. Учитывая это, авторы стремились внести в список все известные им квалифицированные обзоры по механике нанокompозитов. Кроме того, в список включены монографии и публикации в научных журналах, которые относятся к родственным проблемам и были использованы при написании статьи. Так как изложенные в статье результаты соответствуют, в основном, книге [196], то авторы полагают целесообразным привести в данной статье полный список литературы из этой книги, поскольку этот список имеет, по-видимому, и самостоятельное значение.

1. Краткий исторический очерк.

1.1. Общие вопросы. Напомним, что префикс *нано-* означает одну миллиардную долю (*нано* по-гречески означает *карлик*). В словах *нанотехнология* и *наномеханика* префикс *нано-* связывают с длиной – 1 нанометр равен $1 \cdot 10^{-9}$ метра.

Многие публикации указывают Ричарда Фейнмана как впервые предсказавшего развитие нанотехнологии. В своей известной лекции 1959 года под названием *Места внизу достаточно всем* [85] (произнесенной на собрании Американского физического общества) Фейнман предвидел основной принцип нанотехнологии:

принципы физики, как я могу видеть, не говорят ничего против искусственного создания вещей атом за атомом.

С позиций сегодняшнего дня можно утверждать, что в то время еще отсутствовали необходимые элементы анализа наноструктуры вещества. Основные инструменты в работе с наноматериалами – электронные микроскопы созданы относительно недавно. Первый сканирующий электронный микроскоп был создан в 1942 году и стал доступен в 60-х годах. Пригодные для работы с наноматериалами *сканирующий атомно-силовой микроскоп* (AFM) и *сканирующий туннельный микроскоп* (STEM) были созданы в 80-ых годах (первый был создан Биннигом и Рорером (IBM Zürich) в 1981 году [57, 86]; второй был создан позже, в 1986 году, Биннигом, Куатом и Гербером [81, 187]; изобретение обоих микроскопов было отмечено в 1986 году *Нобелевской премией по физике* [57]).

В этих микроскопах поверхность материала видна в нанометровом диапазоне, что и определило успех многих экспериментальных наблюдений наноматериалов.

В последние десять лет инструментарий наблюдения нанообъектов значительно расширился. Особо следует отметить томографию как новую технику наблюдения наноматериалов. Томография представляет собой технику построения трехмерных изображений посредством собирания проекций наблюдаемого объекта под разными направлениями. В более общем смысле томография объединяет много техник, использующих проекции.

На рис. 1.1 (соответствующем [141]) показаны возможности наблюдения наноматериалов с помощью различных современных техник. На рис. 1.1 приняты следующие обозначения: по горизонтальной оси – разрешение по глубине материала в нм; по вертикальной оси – разрешение по поверхности материала в нм; – техника томографии, основанная на атомных зондах; 2 – техника сканирующего туннельного электронного микроскопа с фокальным секционированием; S/TEM – техника сканирующего туннельного электронного микроскопа; AFM – техника атомно-силового микроскопа; SIMS – техника масс-спектропии, основанная на вторичных ионах; FIB/SEM – техника сканирующего электронного микроскопа с фокусирующим пучком ионов; X-ray Microscopy – техника рентгеновской микроскопии.

Вторым предшественником нанотехнологии считают Эрика Дрекслера. Он выступал в качестве организатора нового направления в технологии и писал в книге [80]:

нанотехнология является принципом манипуляции с атомами по средством контроля структуры материи на молекулярном уровне. Это создает возможность строить молекулярные системы с точностью атом за атомом, дающую множество наномашин.

Сейчас построение «атом за атомом» относят к молекулярной нанотехнологии.

С тех пор нанотехнология привлекала внимание многих крупных национальных научных фондов и к настоящему времени существуют

различные точки зрения на то, что относить к нанообъектам – в Великобритании и США принято размеры 10^{-7} – 10^{-10} м, в Германии – все меньше 10^{-6} м.

На интернет-странице Национального научного фонда США (National Scientific Foundation) в разделе Nanoscale Science and Engineering по адресу:

[www.nsf.gov/nanoscale science and engineering.htm](http://www.nsf.gov/nanoscale%20science%20and%20engineering.htm)

представлено такое определение нанотехнологии:

Развитие исследований и технологий на атомном, молекулярном или макромолекулярном уровнях, при масштабах длины приблизительно 1 – 100 нанометров (10⁻⁹ – 10⁻⁷ м), для обеспечения фундаментального понимания явлений и материалов на наномасштабе и создания и использования конструкций, приборов и систем, имеющих новые свойства и функции из-за их малых и/или промежуточных размеров.

Новые и дифференцирующие свойства и функции обнаруживаются на критическом масштабе длины вещества типично ниже 100 нанометров.

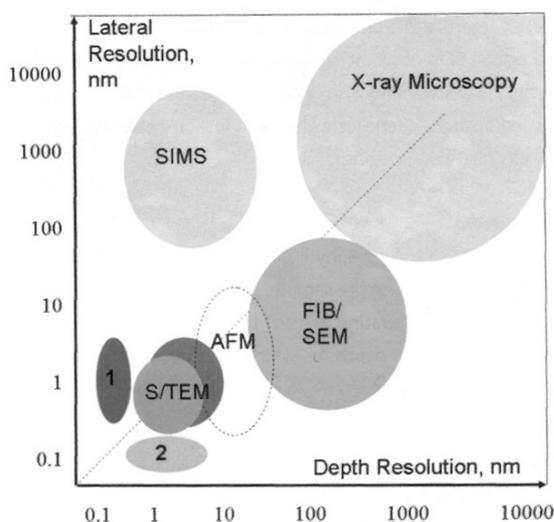


Рис. 1.1

Исследования и развитие нанотехнологии включает работу с конструкциями при управлении ими и их интеграцию в большие компоненты материала, большие системы и архитектуры (конфигурации). В рамках этих ансамблей большого масштаба управление и создание этих конструкций и компонентов остаются на масштабе нанометров. В некоторых частных случаях критический масштаб длины для новых свойств и явлений может быть ниже 1 нанометра (например, работа с атомами при приблизительно 0,1 нанометра) или быть больше 100 нанометров (например, наночастицы армированного полимера имеют уникальную особенность при приблизительно 200 – 300 нанометрах как функцию локальных мостов или границ между наночастицами и полимером).

1.2. *Примеры нанотехнологий и наноматериалов.* Поскольку одной из задач любой технологии считают выявление физических, химических, механических и других закономерностей с целью определения и использования на практике наиболее эффективных и экономичных производственных процессов, то приходится признать, что нанотехнология находится на стадии начального развития, хотя и журнал *Science* объявил в 2002 году нанотехнологию достижением года [24] и она действительно имеет ряд многообещающих достижений.

Однако необходимо отметить, что к настоящему моменту научное сообщество в своем отношении к нанотехнологии разделено, как отмечено в [203], на энтузиастов, нейтральных, скептиков и оппонентов.

Показательно также то, что нанотехнология еще не является массово прибыльным бизнесом. Однако, как уже отмечалось ранее, количество наноматериалов растет очень быстро.

Существуют различные суждения о наиболее реальных направлениях в области нанотехнологии. Одна из таких точек зрения [188] состоит в выделении пяти направлений:

- 1) молекулярная нанотехнология;
- 2) наноматериалы и нанопорошки;
- 3) наноэлектроника;
- 4) нанооптика и нанофотоника;
- 5) нанобиометрика.

С определенной точки зрения, три последние направления можно считать областями применения наноматериалов. Поэтому понятие наноматериала является базовым и должно обсуждаться последовательно и многосторонне. Это обсуждение еще не выполнено достаточно полно, по крайней мере, с точки зрения механики материалов.

Такая ситуация имеет следующее объяснение:

поскольку опыт работы с веществом на атомном, молекулярном и макромолекулярном уровнях имелся прежде всего у представителей разных разделов химии и физики, то подавляющее большинство работ в области нанотехнологии принадлежит химикам и физикам и отражает специфику химии и молекулярной физики.

Широко известны шесть механизмов производства наноматериалов дополнительно к механизму молекулярной нанотехнологии [144, 188].

1. Плазменно-дуговое напыление или плазменная ионизация [149].
2. Химическое осаждение из паров [67].
3. Электрическое осаждение или гальванизация [51].
4. Синтез золь-гель [52].
5. Размалывание с помощью шариков (механическое разрушение) [71].
6. Использование естественных наночастиц [140].

Обратимся далее к наноматериалам. Теоретическое толкование наноматериалов должно бы основываться на какой-то первичной концепции. Такая концепция может состоять в том, что все материалы составлены из гранул, которые в свою очередь состоят из множества атомов. Эти гранулы могут быть видимы или невидимы для невооруженного глаза в зависимости от их размера. Как правило, материалы имеют гранулы размера, изменяющегося от сотен микрон до сантиметров.

Напомним, что обычно под материалами понимают вещества в твердом агрегатном состоянии. Это состояние соответствует двум фазовым состояниям – кристаллическому и стеклоподобному. К материалам относят традиционные конструкционные машиностроительные и строительные материалы, полимерные и композитные материалы и т.п.

Поскольку наночастицы могут быть основой как наноматериалов, так и нанопорошков, то следует заметить, что в механике порошки относят к сыпучим средам, тогда как материалы характерны устойчивостью (сохранением) формы. Обычно порошки преобразуются в материалы специальной обработкой (обжатием, спеканием, облучением и т.п.). Как уже отмечено, наноматериалы и нанопорошки имеют размеры гранул порядка 1 – 100 нанометров по крайней мере по одной из координат, а обычно – по всем трем.

Многие авторы отмечают, что наноматериалы как материалы с характерным размером внутренней структуры, измеряемым в нанометрах, не представляют собой нечто новое для науки. Однако понимание, что отдельные образования окисей, металлов, керамики и других веществ есть наноматериалы, возникло относительно недавно. К примеру, обычный (черный) углерод был впервые открыт в начале 1900 годов. Дымный порошок кремния – компонент силиконовой резины – тоже наноматериал. Он коммерчески доступен с 1940 годов. Однако только недавно был осмыслен факт, что у них обоих размер частичек имеет размер, исчисляемый в нанометрах.

Следует отметить, что размер частичек не является единственной характеристикой наночастички или нанокристалла, или наноматериала. В качестве примера целесообразно отметить одно, по мнению авторов, достаточно важное и специфическое свойство значительного числа наноматериалов.

В типичных наноматериалах большинство атомов размещены на поверхности частичек, тогда как в обычных материалах атомы размещены во всем объеме частичек.

Из различных технологий изготовления наноматериалов, пожалуй, наименее известна последняя из упомянутых выше шести технологий, связанная с естественными наночастицами. К ним относят материалы с порами размера около 10 нм, в которые могут проникать молекулы среднего размера.

Примерами используемых в нанотехнологии естественных наноматериалов могут служить цеолиты (алюмосиликаты) и листовые силикаты (филлосиликаты). Аллюмосиликаты имеют кристаллическую структуру, образованную тетраэдричными фрагментами молекул окиси кремния SiO_2 и окиси алюминия Al_2O_3 . Эти молекулы объединены общими вершинами в трехмерный каркас, пронизанный полостями и каналами, в которых находятся молекулы воды и катионы металлов и др. Используются аллюмосиликаты, в частности, как молекулярные сита. Плоские листы из филлосиликатов разделяют колоннами высотой в 1 нм из поликатионов $[Al_{13}O_4(OH)_{24}]^{7+}$, создавая каналы между листами.

Одно из применений наночастиц окиси титана TiO_2 , полученных по механизму золь-гель, состоит в том, что они образуют пленку, которой покрывают живую кость. Различные модификации наноструктуры такой пленки показаны на рис. 1.2 [188].

Следует отметить, что рис. 1.2 показывает две особенности нанопленок: толщина нанопленки всегда имеет наноразмер и также имеют наноразмер образующие нанопленку наностерженьки; данная нанопленка характерна перпендикулярным размещением наностерженьков к внешней поверхности нанопленки. Перпендикулярность размещения наностерженьков представляет лишь один из многих вариантов размещения.

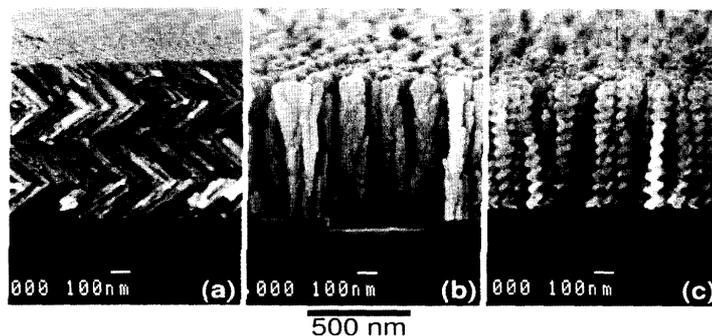


Рис.1.2

На рис. 1.3 показан иной вариант – размещения под углом – для трех видов нанопленок [150].



Рис.1.3

Из наноматериалов, получаемых механическим размельчением, следует указать окиси металлов. Например, в нанокерамиках используются окиси циркония ZrO_2 и алюминия Al_2O_3 , а также титанат алюминия $AlTiO_3$.

На Рис.1.4 показана фотография нанопленки из кремния, полученная методом золь-гель. На рисунке хорошо видна решетчатая гексагональная наноструктура пленки с цилиндрическими порами диаметр 2 – 3 нм [188].

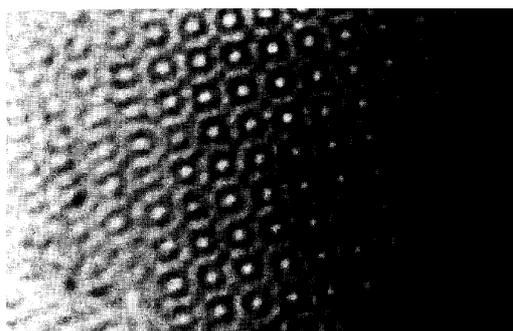


Рис. 1.4

Отметим, что формирование повторяемых структур, подобно показанной выше гексагональной, в наноматериалах наблюдается достаточно часто. Для примера, на следующих трех рисунках показаны, соответственно, сотовая структура гибридного наноматериала, основанного на кополимере $PS - b - P4VP$ и металлических наночастиц (рис. 1.5); структура гибридного наноматериала из центрированных кубически наносфер

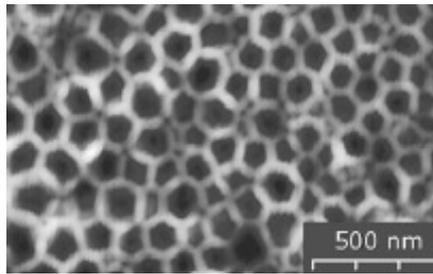


Рис.1.5

и гексагонально размещенных наночилиндров (рис. 1.6); структура гибридного наноматериала из гироидально расположенных наночастичек и слоистая структура гибридного наноматериала (рис. 1.7) [84]

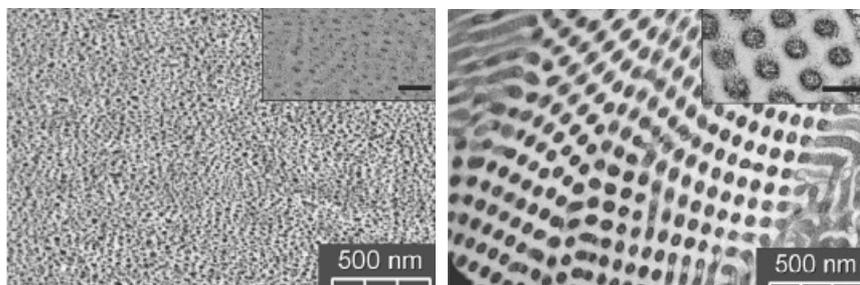


Рис.1.6

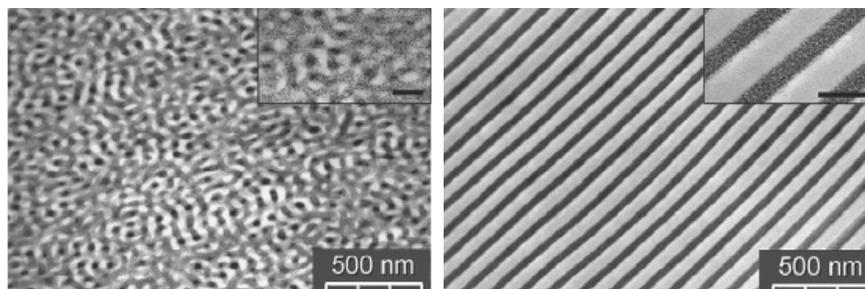


Рис.1.7

Керамика, основанная на наночастицах нитрида кремния Si_3N_4 , показана на рис. 1.8 [188]; атомы расположены прямыми рядами в виде нановеревочек, расстояние между

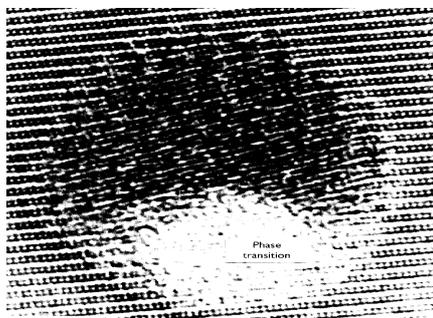


Рис.1.8

рядами равно 0,6 нм; пятно в средней части рис. 1.8 свидетельствует о процессе фазового превращения керамики в иную наноструктуру.

Другой пример однонаправленного размещения нановеревочек в гибридном наноматериале приведен на рис. 1.9. Слева показаны индивидуальные кремниевые нанопроволоки (наностерженьки), справа показаны нановеревочки (нанопучки) из нанопроволок [185].

Хорошо изученным классом наночастичек являются углеродные частички. Долгое время науке были известны три формы углерода: алмаз, графит и аморфный углерод.

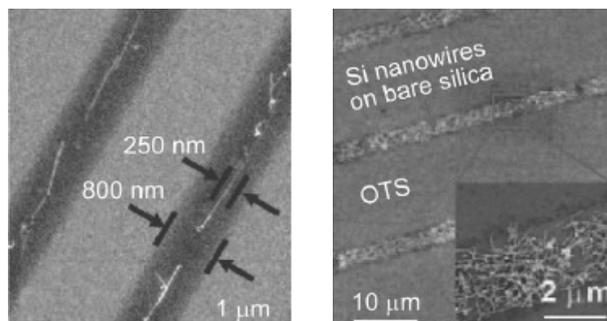


Рис.1.9

В 1985 году была обнаружена высокосимметричная молекула углерода C_{60} в виде, напоминающем футбольный мяч, сферы с атомами углерода на поверхности. Она содержит 60 атомов из 5-атомных колец, разделенных 6-атомными кольцами. Такого типа молекулы были названы фуллеренами. Фуллерены стали продуктивно изучаться. За исследования фуллеренов в 1997 году была присуждена Нобелевская премия по химии [76, 131, 171]. Далее количество разновидностей фуллеренов возрастало, к настоящему времени оно достигает многих тысяч.

Молекуле C_{60} дали имя фуллерен (*fullerene*) в честь архитектора Фуллера (*Richard Buckminster Fuller*), который построил дом из пятиугольников и шестиугольников.

Иная молекула – C_{70} – напоминает мяч для регби. Она включает только шестиатомные кольца и тоже была названа фуллереном. На рис. 1.10 показаны обе молекулы [188].

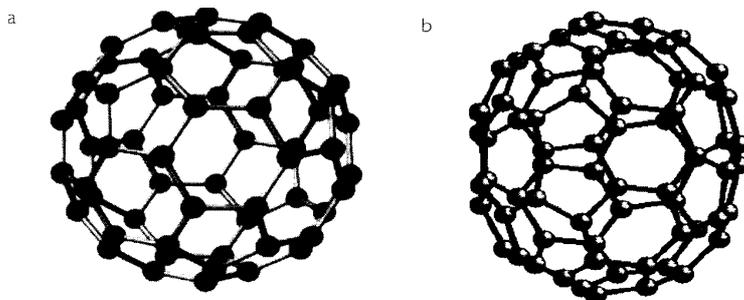


Рис.1.10

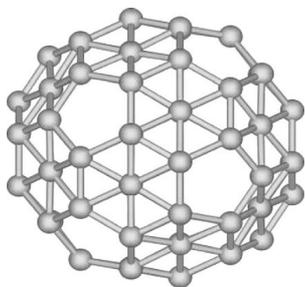


Рис. 1.11

Отметим, что недавно были обнаружены и исследованы фуллерены, построенные из атомов бора (бор является ближайшим соседом углерода в периодической системе и они оба обладают рядом подобных свойств). На рис. 1.11 показана молекула фуллерена из атомов бора [40].

Фуллерены могут образовывать кристаллы, которые названы *фуллеритами*. Кристаллы имеют гранцентрированную кубическую решетку, содержащую полости двух типов – тетраэдрические и октаэдрические. Когда в эти полости помещают ионы калия, рубидия или цезия, то получают новые наночастицы с необычными свойствами.

Фуллерены могут осаждаться на поверхность и образовывать монослой. Также существуют образования из фуллеренов в виде нановеревочек. Наиболее важно то, что молекулы фуллерена образуют углеродные нанотрубки, которые можно считать родственными графиту. Молекулярная структура графита напоминает *сетку в курятнике* [188] – это сеть, изготовленная из гексагональных колец из атомов углерода. В обычном графите эти сетки положены одна на другую, позволяя легко скользить одна по другой.

Когда сетки графита свернуты в кольцо и концы соприкасаются, то они образуют *нанотрубки (nanotubes)*. Так были названы молекулы с очень большим числом атомов $C_{10000} - C_{1000000}$. Отличаются нанотрубки способом сворачивания (скручивания), диаметром и длиной. Внутренняя полость тоже может быть разной и трубки могут иметь не одну обшивку. На концах молекулы фуллерена атомы расположены в виде полушара. Обшивки могут быть по-разному скручены и образовывать разные структуры – *zigzagобразную, хиральную, креслоподобную*.

Следует указать, что кроме углеродных нанотрубок к настоящему времени созданы многие другие разнообразной химической структуры. Для примера на рис. 1.12

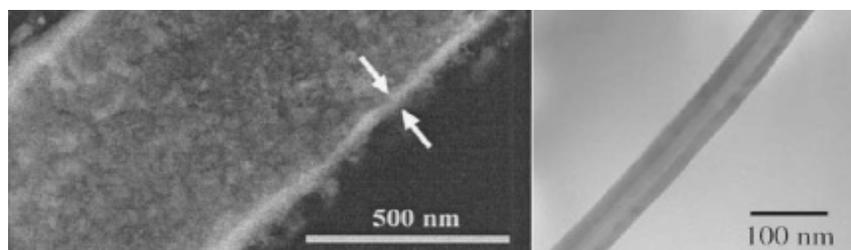


Рис.1.12

показана нанотрубка из $La_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3$. Слева приведено изображение нанопроволоки с внешней оболочкой из нанотрубки $La_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3$ и ядром из MgO [65].

Нанотрубки успешно применяются в создании новых нанокомпозитов. Для примера, на рис. 1.13 показан наноматериал, состоящий из матрицы из алюминиевого сплава с осажденными в сплав нанотрубками [50].

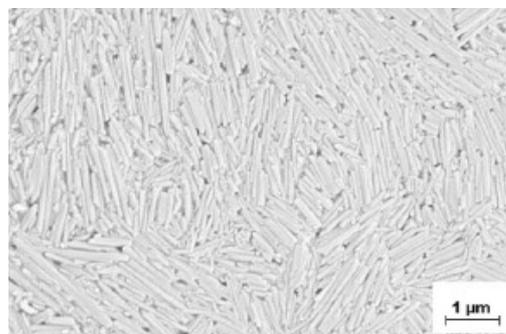


Рис. 1.13

Другой пример трехмерного нанокompозита показан на рис. 1.14, особенностью этого материала является принадлежность к классу оптических материалов и сложная микроструктура серебряной пленки на стеклянной подложке [87].

В последнее время активно создаются и исследуются наноматериалы для биомедицинских приложений.

На рис. 1.15 показана совместимая с живой тканью нанопленка, предназначенная для покрытия наноприборов, имплантируемых в человеческое тело (к примеру, сенсоров крови), которые недостаточно совместимы с живой тканью.

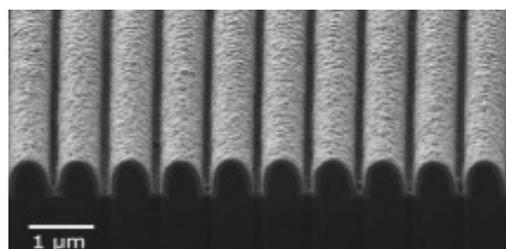


Рис.1.14

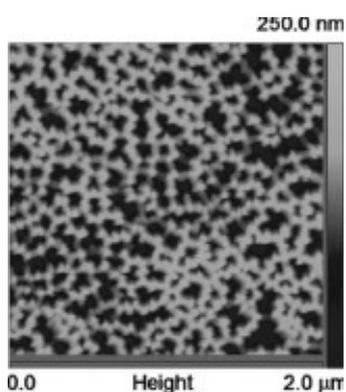


Рис.1.15

Нанопленка представляет собой наномембрану из нанопористого алюминия, покрытого алмазоподобным углеродом [71]. Пример искусственных нановолокон, предложенных для регенерации живой ткани, показан на рис. 1.16. Слева показаны выпрямленные волокна поли-*L*-лактата, справа – стохастически расположенные волокна поли- ϵ -капролактона [192].

Живая природа часто инспирирует исследования для поиска материалов с наблюдаемыми в ней свойствами. Для примера приведен рис. 1.17, на котором показан наноматериал с особыми свойствами адгезии, которые создаются кончиками углеродных нанотрубок.

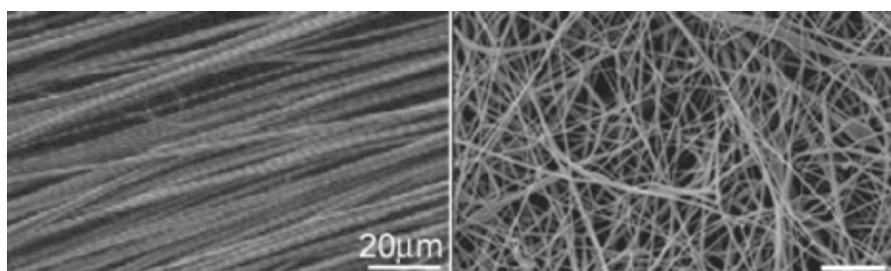


Рис.1.16

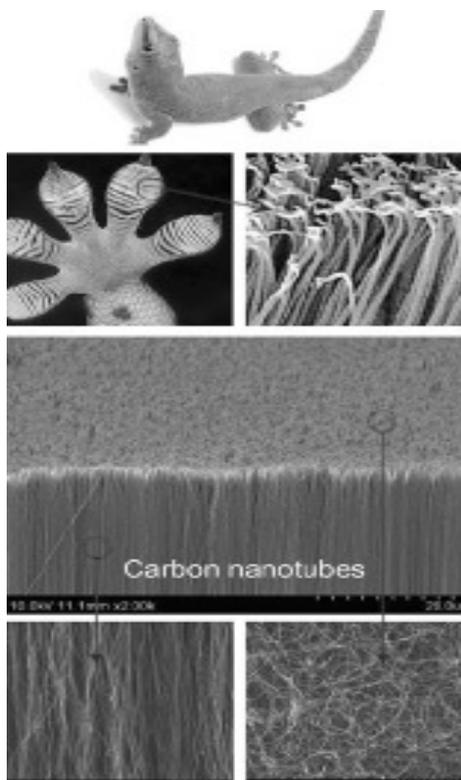


Рис. 1.17

Подобные свойства наблюдаются у ящериц-гекконов, лапы которых так устроены (обладают такими свойствами адгезии), что они ползают по потолку. Прилипание искусственного наноматериала превосходит значительно прилипание лап геккона [78].

Иной пример заимствования структуры нанокompозита из природы показан на рис. 1.18. Источником заимствования является естественный перламутр. Его структура изображена слева, а справа – искусственный нанокompозит из керамических пластинок и полимерной матрицы [170].

В заключение приведены два рисунка, показывающие применение наноматериалов в виде элементов конструкций в миниатюрных приборах. На рис. 1.19 показано применение отдельной телескопической нанотрубки в ячейке памяти электромеханического прибора накопления информации (слева – в непроводящем состоянии, справа – в проводящем состоянии) [55].

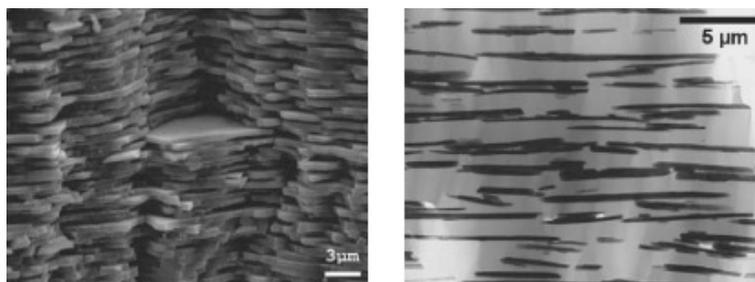


Рис.1.18

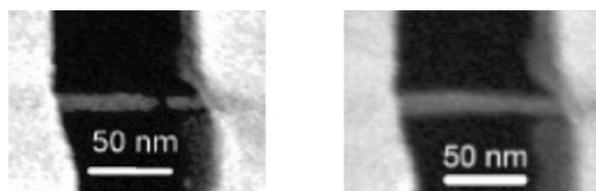


Рис.1.19

На рис. 1.20 показан нанолепесток из алмаза, который предназначен для использования в оптических наноприборах типа оптических нановолноводов [89].

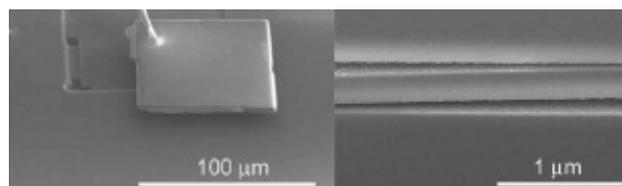


Рис.1.20

1.4. О целесообразности создания нанокompозитов. Полагаем уместным в начале этого пункта вспомнить о дискуссии почти 50-летней давности (6 и 7 июня 1963 года), организованной видными английскими учеными для обсуждения механических свойств новых материалов [198]. В заключительных замечаниях один из организаторов профессор Д.Бернал сказал: «Здесь мы должны пересмотреть наши цели. Мы говорим о новых материалах, но в конечном счете мы заинтересованы **не столько в материалах самих по себе, сколько в конструкциях, в которых они должны функционировать.** Нашей темой являются в первую очередь практические требования и их удовлетворение».

Похоже, наномеханика стоит перед теми же проблемами, которые почти 50 лет тому стояли перед микромеханикой и которые так выразительно сформулировал Д.Бернал.

Следует отметить, что как одно из относящихся к проблеме разработки новых материалов научно-техническое направление по созданию наноматериалов весьма активно развивается. Оно создает такие материалы, в состав которых входят нанопоразования (минимальные размеры поперечных сечений которых составляют несколько нанометров). Как уже отмечалось ранее, переход к наноуровню вызывает необходимость учитывать при создании и анализе нанопоразований их атомную структуру и особенности молекулярного строения нанопоразований.

Как правило, вследствие наличия столь тонкой структуры нанопоразования не могут успешно функционировать самостоятельно как конструкционные материалы. Обычный путь такой: из нанопоразований создаются *нанокompозиты*, в которых наполнителем (армирующими элементами) являются нанопоразования, объединенные в цельный композитный материал связующим (матрицей); в большинстве исследований в качестве связующего используются различные полимерные композиции.

Таким образом, с точки зрения механики, нанокompозиты занимают особое место в наномеханике материалов.

Поэтому привлечение механики к исследованию наноматериалов является необходимым этапом в развитии нанотехнологий и наноматериалов и имеет целью обеспечение перехода от анализа наноматериалов к анализу элементов конструкций из наноматериалов. Даже самые миниатюрные наноприборы будут всегда состоять из элементов наноконструкций (наностержней, нанопластин, нанооболочек и т.п.).

Следовательно, на заключительном этапе создания новых материалов, очевидно, перспективными можно считать лишь те материалы, которые являются конструкционными материалами, т.е. материалы, из которых с применением определенных технологий могут быть созданы различные элементы конструкций (стержни, пластины, оболочки, массивные элементы и т.д.).

В связи с этим в процессе создания новых конструкционных материалов надлежащее место занимает одна из старейших наук – механика, так как в наши дни вопросы механики материалов и элементов конструкций из них относятся к ее компетенции.

В заключение заметим, что приведенные выше, возможно, сравнительно избыточные сведения могут быть использованы как источник первоначальной информации для широкого круга проявивших интерес к наноматериалам специалистов по родственным проблемам естествознания и инженерных наук.

Также, показанное выше разнообразие материалов и, в частности, нанокompозитных материалов, имеет целью засвидетельствовать, прежде всего, разнообразие их внутренней структуры, что с точки зрения механики требует развития специфических методов описания материалов. В связи с этим, для получения конкретных и осязаемых результатов в рамках механики нанокompозитов целесообразно применять модельные представления о внутренней структуре нанокompозитов. Такой подход приводит к необходимости проведения исследований нанокompозитов разнообразной структуры, устанавливая каждый раз соответствие между внутренней структурой конкретного нанокompозитного материала и предлагаемой для теоретического анализа моделью.

2. О структурной механике материалов.

2.1. О механике материалов. Механика материалов является одним из многих научно-технических направлений механики. В свою очередь, механика как наука в настоящее время превратилась в весьма разветвленную область знаний. Рассмотрим ниже в краткой форме один из вариантов классификации направлений в механике.

По виду физических моделей, используемых при исследовании явлений, механику разделяют на три направления:

механика абсолютно твердого тела механика жидкости, газа и плазмы механика деформируемого твердого тела

Если при исследовании достаточно сложных явлений используются совместно модели из двух или трех указанных выше направлений механики, то такие исследования условно относят к *общей механике* или к отдельным ее направлениям, таким как, например, *аэрогидроупругость*.

По применяемым методам, которые используются при исследовании явлений, механику разделяют на три иных направления:

аналитическая механика вычислительная механика экспериментальная механика

Для этих трех направлений механики весьма часто международные конгрессы и конференции проводят раздельно.

Заметим, что к аналитической механике также относят и общие вопросы, включая формулировку замкнутой постановки задач, теоремы единственности, вариационные принципы и другие родственные вопросы. Ранее к аналитической механике традиционно относились только соответствующие вопросы механики абсолютно твердого тела; в настоящее время аналитическую механику трактуют в расширенном смысле, относя к ней и соответствующие вопросы механики жидкости, газа и плазмы и механики деформируемого твердого тела. Безусловно, при исследовании ряда проблем применяются совместно методы и подходы двух или трех направлений.

Довольно часто механику разделяют на отдельные научные направления, которые соответствуют конкретным направлениям практической деятельности человека:

механика космического полета
строительная механика
механика композитных материалов
горная механика
строительная механика самолета или корабля
биомеханика
механика человека
небесная механика

Механику деформируемого твердого тела по виду механических моделей и исследуемых явлений, применяемых при исследовании явлений, разделяют на четыре части:

теория упругости
теория пластичности
теория ползучести
теория усталости

В рассматриваемой классификации также в виде отдельного направления целесообразно выделить следующее направление:

механика связанных полей в материалах и элементах конструкций,
--

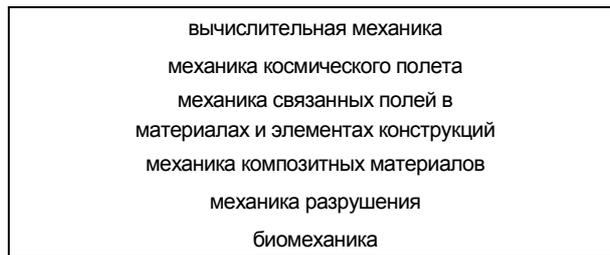
которое исследует поведение материалов и элементов конструкций при совместном воздействии силовых, температурных и электромагнитных полей.

Механику деформируемого твердого тела по характеру исследуемых механических явлений разделяют на четыре части:

статика
динамика
устойчивость
разрушение

При этом механика разрушения исследует разрушение при статических и динамических нагрузках. Следует подчеркнуть, что явление разрушения имеет, в общем случае, сложный характер и включает механические, физические и химические аспекты, поэтому, в общем случае, разрушение исследуют с учетом этих аспектов.

Также отметим, что некоторые научные направления механики получили достаточно активное развитие во второй половине XX столетия:



Итак, выше, следуя [35], указаны варианты классификации механики по направлениям. Более подробная классификация может быть найдена читателем в классификаторах направлений исследований по механике, которые разработаны в ряде государств и международных специализированных изданиях по механике и указания на которые широко используются при публикации научных результатов.

При подготовке этой статьи авторы пытались учитывать специфику и место механики в сложившейся современной системе научных исследований. Специфика механики как науки состоит в том, что она является одной из важнейших наук фундаментального характера и в то же время ее актуальность определяется значимостью для инженерного дела рассматриваемых проблем механики. На всех этапах развития человечества, начиная с древнего мира, трудно переоценить значимость механики для инженерного дела: во многих случаях механика и инженерное дело рассматривались как единое целое. Эта специфика механики проявилась и при формировании механики материалов как научно-технического направления, в котором объединение механики и инженерного дела весьма значимо.

Механика материалов как направление четко сформировалась во второй половине прошлого века в рамках механики деформируемого твердого тела наряду с механикой элементов конструкций, когда существенно расширились исследования по проблемам, относящимся к разработке новых материалов. В настоящее время в рамках механики материалов представлена достаточно весомая часть исследований, проводимых по механике деформируемого твердого тела. Эта ситуация даже привела к тому, что в ряде зарубежных университетов механика деформируемого твердого тела практически вошла в различные курсы по науке о материалах.

В целом, исследования по механике материалов определяются или характеризуются тем, что всегда, хотя и в разной форме, учитывается информация о *внутренней структуре материала*. В большинстве исследований по механике материалов эта информация используется лишь при характеристике или идентификации материалов; в этом случае внутренняя структура рассматривается лишь при анализе ее фотографий и изменений при силовых и технологических воздействиях. В несколько меньшей части исследований по механике материалов информация о внутренней структуре материалов включается в модели материалов и применяется при постановке и решении соответствующих задач механики материалов. Это позволяет выделить *структурную механику материалов* как самостоятельное научное направление в рамках механики материалов.

Таким образом, под *структурной механикой материалов* будем понимать ту часть исследований по механике материалов, в которой в качественном и количественном отношении учитывается внутренняя структура материалов при построении моделей материалов и при исследовании соответствующих задач.

При таком определении объектом исследований структурной механики является большой класс современных материалов, включая: *железобетон*, внутренняя структура которого определяется наличием арматуры; *металлы, сплавы и керамику*, внутренняя структура которых определяется наличием зерен и других структурных элементов; *композитные материалы*, внутренняя структура которых определяется наличием частиц, волокон и слоев и в которые можно включать *наноматериалы (нанокompозиты)*, внутренняя структура которых определяется наличием наночастиц.

В этом подходе составными частями
являются

структурной механики материалов

макромеханика, мезомеханика, микромеханика и наномеханика

материалов, которые в терминологическом аспекте являются сравнительно установленными и широко применяемыми понятиями и определениями; единственным и необходимым общим требованием указанных четырех научных направлений является учет внутренней структуры материала в механических моделях и при решении соответствующих задач.

2.2. Структурные уровни. Для количественной характеристики внутренней структуры материалов как объектов исследований структурной механики материалов целесообразно ввести *геометрический параметр h* .

В случае железобетона параметр h характеризует среднее значение минимальных диаметров поперечного сечения металлической арматуры.

В случае металлов, сплавов и керамики параметр h характеризует среднее значение минимальных размеров ячеек, зерен и других структурных неоднородностей.

В случае композитных материалов с полимерной или металлической матрицей параметр h характеризует среднее значение минимальных диаметров частиц для материалов зернистой структуры, среднее значение минимальных диаметров поперечных сечений волокон для волокнистых материалов и среднее значение минимальных толщин слоев отдельных компонент для слоистых материалов.

В случае наноматериалов (нанокомпозитов) параметр h характеризует среднее значение минимальных диаметров наночастиц.

Оказалось целесообразным предложить *пределы изменения параметра h* , определяющие принадлежность соответствующих материалов к макромеханике, мезомеханике, микромеханике и наномеханике. Необходимо отметить, что некоторые ученые уже предлагали варианты пределов изменения параметра h – уровней изменения h .

В результате анализа предложений различных авторов в публикациях [105, 116] предложены следующие четыре уровня для параметра h :

$$\begin{aligned} \text{macro: } 10^{-2} m \geq h \geq 10^{-5} m; \text{ meso: } 10^{-5} m \geq h \geq 10^{-7} m; \\ \text{micro: } 10^{-7} m \geq h \geq 10^{-8} m; \text{ nano: } 10^{-8} m \geq h \geq 10^{-9} m. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Необходимо отметить, что атомный уровень (расстояние между атомными плоскостями в кристаллической решетке) имеет порядок одного или нескольких ангстрем (10^{-10} м), поэтому наноуровень в (2.1) условно ограничен 10^{-9} м.

Заметим, что предложенные в (2.1) четыре уровня для параметра h не перекрывают друг друга. При разработке отдельных научных направлений, относящихся к макро, мезо, микро и наномеханике, естественно проводятся исследования в рамках масштабных уровней, которые перекрывают друг друга, т.е. рассматриваются четыре уровня в расширенной трактовке. В публикациях [105, 116] предложены четыре уровня для параметра h в рамках указанной выше расширенной трактовки:

$$\begin{aligned} \text{macro: } 10^{-2} m \geq h \geq 10^{-5} m; \text{ meso: } 10^{-3} m \geq h \geq 10^{-8} m; \\ \text{micro: } 10^{-4} m \geq h \geq 10^{-8} m; \text{ nano: } 10^{-7} m \geq h \geq 10^{-9} m. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Схематически четыре уровня (2.2) представлены [105, 116] на рис. 2.1.

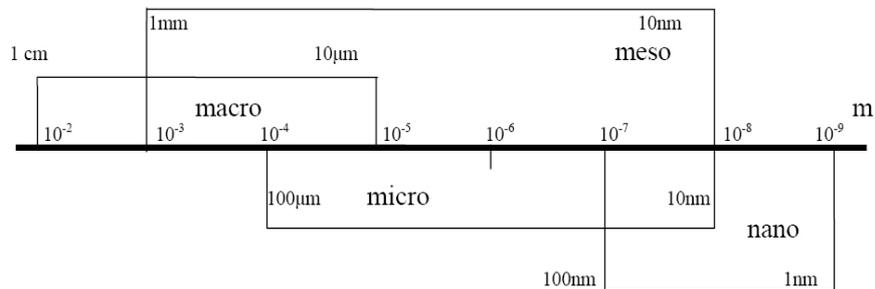


Рис. 2.1

2.3. *О моделировании в структурной механике материалов. Принципы континуализации и гомогенизации.* При описании (моделировании) процесса деформирования материалов применяются различные модели как учитывающие дискретную структуру материала на атомном уровне, так и не учитывающие эту структуру в рамках континуальных представлений.

Примечание. Континуальное представление материала состоит в том, что реальный кусок материала (материальное тело) заменяют континуумом (непрерывной средой) той же геометрической формы. В каждой точке непрерывной среды (континуума) рассматриваются значения физико-механических параметров материала (физико-механические постоянные) и физико-механических полей (напряжений, деформаций, температуры и т.п.). Изучаются три типа сред:

однородные среды (континуумы), когда значения физико-механических параметров (постоянных) не зависят от точки (одинаковы для всей среды);

кусочно-однородные среды (континуумы), состоящие из отдельных частей однородных сред, которые непрерывно соединены и образуют одну сплошную среду;

неоднородные среды (континуумы) с непрерывно изменяющейся неоднородностью.

Основное достоинство континуального описания состоит в том, что оно позволяет применять методы математики непрерывных величин и, в частности, дифференциального и интегрального исчисления.

В настоящее время в связи с весьма активным развитием метода конечных элементов и математики дискретных величин, возможно, значимость континуальных представлений будет уточняться.

Из упомянутых выше моделей целесообразно выделить следующие три принципиально отличные модели как такие, которые получили наибольшее распространение.

Первая модель – модель дискретно расположенных абсолютно твердых частиц (моделирующих атомы), взаимодействующих между собой.

Вторая модель – модель кусочно-однородного тела, каждый из компонентов которого описывается в рамках континуальных представлений.

Третья модель – модель однородного тела, анализируемого в рамках континуальных представлений.

В физике твердого тела исследования проводятся в рамках представлений о кристаллической решетке, т.е. в рамках первой модели, в которой взаимодействие между атомами осуществляется за счет сил межатомного взаимодействия, определяемых потенциалами разной структуры. Такой подход представлен в ряде монографий, из которых, по-видимому, целесообразно отметить весьма активно цитируемую монографию [62], и в многочисленных публикациях в научных журналах.

Также применяется модель дискретно расположенных абсолютно твердых частиц (шариков), расположенных в узлах кристаллической решетки и соединенных между

собой пружинками; в этом случае взаимодействие между соседними шариками осуществляется за счет соединяющих их пружинок. Эта модель применяется и в механике. В качестве примера можно указать монографию [31], в шестой главе которой такая модель применяется для исследования динамических процессов, происходящих возле кончика трещины и в волне разрушения.

В физике твердого тела также применяются и другие модели, основанные на континуальных представлениях, из которых следует отметить континуальную теорию дислокаций в кристаллической решетке. Исследования в рамках такой модели представлены в ряде монографий (например, [22, 130]), а также в многочисленных журнальных публикациях.

В *микромеханике композитных материалов* исследования проводятся в рамках *второй модели* – модели кусочно-однородного тела, состоящего из отдельных частиц наполнителя (армирующих элементов) и связующего (матрицы). Описание деформирования каждой частицы наполнителя и матрицы осуществляется в рамках континуальных представлений. В этой модели взаимодействие между отдельными частицами наполнителя реализуется через границу раздела наполнитель – матрица посредством выполнения условия непрерывности векторов напряжений и перемещений. На границе раздела в ряде материалов могут возникать различные варианты соединения наполнителя и матрицы, что отражается в изменении конкретного вида условий непрерывности векторов напряжений и перемещений. Такой подход представлен в ряде монографических изданий, из которых отметим двенадцатитомное издание [26], и большом количестве публикаций в научных журналах. В издании [26] шесть первых томов и частично седьмой том посвящены механике материалов.

Третья модель – модель однородного тела с усредненными свойствами – успешно применяется в механике композитных материалов; при этом, в общем случае, тело полагается анизотропным; в большинстве случаев композиты полагаются ортотропными. Эта же модель используется в механике элементов конструкций (оболочек, пластин, стержней и т.п.) из композитных материалов и описана во многих монографиях и оригинальных публикациях.

Безусловно, в механике элементов конструкций из композитных материалов существенная часть исследований относится к случаю, когда по толщине элемент конструкции состоит из нескольких однородных, в общем случае, анизотропных слоев. В этих исследованиях рассматриваются, в основном, двумерные (для оболочек и пластин) и одномерные (для стержней) прикладные теории, которые построены путем введения гипотез о распределении напряжений и перемещений по толщине. Механика элементов конструкций из композитных материалов представлена, к примеру, в двенадцатитомном издании [26]; ей посвящены шесть последних томов и частично седьмой том.

Таким образом, выше кратко рассмотрены три модели, которые, наряду с другими моделями, повсеместно применяются в структурной механике материалов. Каждая из этих моделей имеет свои возможности, преимущества и недостатки при описании конкретных явлений в механике материалов и свои специфические сложности при их реализации.

По-видимому, наиболее сложной моделью с точки зрения получения конкретных результатов является вторая модель – модель кусочно-однородного тела. В подтверждение приведем два соображения.

Первое соображение сводится к тому, что в рамках этой модели каждый армирующий элемент исследуется в рамках механики сплошной среды – механики деформируемого твердого тела.

Второе соображение состоит в том, что взаимодействие различных армирующих элементов осуществляется через матрицу, которая также исследуется в рамках механики сплошной среды – механики деформируемого твердого тела.

В механике композитных материалов (в широком смысле в соответствии со шкалой уровней (2.1), (2.2), рис. 2.1) три рассмотренные модели и ряд других моделей применяются к композитным материалам в виде последовательности (цепочки) моделей, предусматривающей на заключительном этапе проведение исследований в рамках элементов конструкций из этих композитных материалов. Это отражает специфику науки-механики, отмеченную во введении в виде первого момента.

Очевидно, что последовательности (цепочки) применяемых моделей для различных композитных материалов и изучаемых в них явлений также различны, поскольку должна учитываться шкала уровней (2.1), (2.2), рис. 2.1. Так, для нанокompозитов в последовательность моделей включаются первая, вторая и третья модели, тогда как для микрокомпозитов – только вторая и третья.

При построении механики композитных материалов в указанном выше смысле применяются различные подходы и методы, соответствующие различным научным направлениям и научным взглядам отдельных ученых. Все же, несмотря на такое многообразие научных направлений, в построении механики композитных материалов применяются *два основных принципа* (две основные концепции) – это *принцип континуализации* и *принцип гомогенизации*.

Принцип континуализации состоит в том, что *дискретная система заменяется (моделируется) непрерывной системой (средой) и для непрерывной системы (среды) определяются соответствующие усредненные свойства*.

Этот принцип широко применяется, например, в рамках первой модели при переходе к континуальной теории дислокаций в кристаллических решетках.

Принцип гомогенизации состоит в замене (моделировании) *кусочно-однородной системы (деформирование каждого элемента-куска которой описывается соотношениями континуальной механики деформируемого твердого тела) однородной непрерывной системой (средой) и определении необходимых усредненных свойств в рамках однородной непрерывной системы (среды)*.

Принцип гомогенизации широко применяется в рамках второй модели в микро-механике композитных материалов при исследовании различных вопросов статики, динамики, устойчивости и разрушения микрокомпозитов, которые, к примеру, изложены в первых шести томах и части седьмого тома двенадцатитомного издания [26].

Отметим, что из приведенных определений принципов континуализации и гомогенизации следует их некоторое принципиальное отличие и методологическая общность, особенно по отношению к исходным системам, к которым они применяются.

В показанном здесь анализе принципов континуализации и гомогенизации были учтены результаты и соображения, изложенные в монографии [15] и статьях [105, 106, 116].

В заключение заметим, что процедуры континуализации и гомогенизации реализуются посредством различных методов усреднения. При этом, как правило, используется понятие о представительном (репрезентативном) объеме или кубе.

Отметим **три основных момента** при реализации моделирования с привлечением понятия представительного объема и методов усреднения.

Первый момент. При введении понятия представительного объема, который обозначим через V_{Π} , принимается, что минимальные линейные размеры объема V_{Π} значительно больше максимальных размеров дискретных частиц (в случае *первой модели*) или максимальных размеров однородных частей материала (в случае *второй модели*). Таким образом, линейные размеры представительного объема должны быть значительно больше геометрического параметра h , который введен в п. 2.2.

Обычно большинство авторов принимают, что превышение первой величины над второй на порядок или более дает основание для последующего моделирования и усреднения.

Параллельно с выделением представительного объема V_{Π} (который выделяется в исходной модели – *первой* или *второй* моделях в терминологии этого пункта) также выделяется эквивалентный объем V_E в рамках конечной модели – модели однородного тела (*третьей* модели в терминологии этого пункта). *Принимается*, что объем V_{Π} имеет такие же размеры, как и объем V_E и таким же образом ориентирован; в связи с этим часто будем применять обозначение

$$V_{\Pi} = V_E = V. \quad (2.4)$$

Второй момент. При моделировании материала (определении величин и параметров в эквивалентном объеме V_E посредством усреднения через соответствующие величины и параметры в представительном объеме V_{Π}) *принимается*, что в эквивалентном объеме возникают только однородные поля напряжений, деформаций и т.п.

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \text{const}_{ij}; \langle \varepsilon_{nm} \rangle = \text{const}_{nm}; \dots \quad (2.5)$$

Целесообразно подчеркнуть, что лишь при анализе ситуаций, соответствующих условиям (2.5), возникает возможность определить усредненные значения различных параметров (постоянных), входящих в определяющие уравнения для однородного материала (*третья* модель в терминологии этого пункта). При этом используются методы усреднения для различных величин.

Третий момент. Результаты моделирования и усреднения при подходах, которые обсуждались в *первом* и *втором* моментах, применимы при описании полей напряжений, деформаций и других величин, которые несущественно изменяются на расстояниях такого же порядка, как и размеры представительного объема V_{Π} . Если учесть соображения об определении линейных размеров представительного объема V_{Π} через геометрический параметр h (введенный в п. 2.2), изложенные при описании первого момента, то можно прийти к следующему выводу.

Результаты рассмотренного выше моделирования и усреднения *применимы* при описании полей напряжений, деформаций и других величин, которые несущественно изменяются на расстояниях, превышающих на порядок и более величину геометрического параметра h .

Примечание. При практической реализации процедуры усреднения большинство авторов *дополнительно принимают*, что в структурных элементах материала (в рамках представительного объема V_{Π}) также реализуются однородные поля напряжений, деформаций и других величин (различные для наполнителя и связующего).

2.4. О краевых или приповерхностных эффектах. Напомним, что в структурной механике композитов (в широком смысле) и в механике композитных материалов (в более узком смысле) применяются принцип континуализации, в соответствии с которым дискретная структура заменяется (моделируется) непрерывной структурой, и принцип гомогенизации, в соответствии с которым кусочно-однородная структура заменяется (моделируется) однородной структурой.

Следует учитывать, что принципы континуализации и гомогенизации относятся к моделированию свойств материала как бесконечной среды (бесконечного континуума).

При исследовании различных проблем структурной механики материалов (вопросов статике, динамике, устойчивости и разрушения) анализ приходится проводить, как правило, для материала, занимающего ограниченный объем, который характеризуется граничной поверхностью.

На граничной поверхности для всех основных механических процессов (статических, динамических, процессов устойчивости и разрушения) для материала формулируются определенные граничные условия. В связи с этим возникает вопрос о применимости принципов континуализации и гомогенизации вблизи граничной поверхности и на самой граничной поверхности.

Ответ на этот вопрос можно сформулировать так:

*вблизи граничной поверхности принципы
континуализации и гомогенизации не работают.*

Доказательство этого утверждения вполне очевидно, так как вблизи граничной поверхности (при любом виде нагружения) нельзя выделить представительный объем V_{Π} материала и соответствующий ему эквивалентный объем V_E с присущим ему основным свойством – свойством *однородности* полей макронапряжений и макродеформаций. Макронапряжения и макродеформации понимаются как напряжения и деформации в рамках модели непрерывной системы (среды), к которой приходят после применения принципов континуализации и гомогенизации.

Также отметим, что в композитных материалах, при моделировании материала кусочно-однородной средой, вблизи граничной поверхности, как правило, возникают неоднородные поля напряжений и деформаций в каждом из компонентов (однородной среде), которые входят в представительный объем V_{Π} .

Неприменимость принципов континуализации и гомогенизации вблизи граничной поверхности достаточно полно проиллюстрирована в книге [300] на примере слоистых материалов в рамках микромеханики композитных материалов.

Отмеченное выше явление неоднородности известно в механике деформируемого твердого тела для *однородных материалов*; в этом случае значения деформаций и напряжений при удалении от граничной поверхности становятся более однородными.

Применительно к проблемам статики указанное явление соответствует краевому эффекту типа Сен-Венана.

Применительно к проблемам волновой динамики это явление соответствует возникновению поверхностных волн с затухающей при удалении от граничной поверхности амплитудой.

Понятие поверхностной неустойчивости для однородного анизотропного тела (что соответствует *третьей модели*), по-видимому, впервые введено в [58]; результаты исследования явления поверхностной неустойчивости для различных однородных материалов с привлечением строгих трехмерных теорий представлены в ряде монографий (например, начиная с [12] и заканчивая [15]). В работе [61] явление, происходящее возле граничной поверхности упругого анизотропного тела, получило название *skin effect*.

Таким образом, в механике однородных материалов (в том числе и для *третьей модели*) в проблемах статики, динамики и устойчивости достаточно хорошо известно явление, состоящее в возникновении возле граничной поверхности материала полей неоднородных деформаций и напряжений, которые быстро затухают при удалении от граничной поверхности (*skin effect*, краевой эффект, приповерхностный эффект).

Очевидно, что эффекты аналогичного типа имеют место и для материалов с дискретной структурой (*первая модель*) и для кусочно-однородных материалов (*вторая модель*). Для указанных материалов ввиду проявления краевых или приповерхностных эффектов возникает дополнительное осложнение – *вблизи граничной поверхности* принципы континуализации и гомогенизации не применимы, так как во включающем граничную поверхность представительном объеме любых размеров поля деформаций и напряжений *неоднородны*.

Учитывая приведенные соображения, целесообразно сделать следующие выводы.

Вывод 1. Для материалов с дискретной структурой (*первая модель*) и для материалов с кусочно-однородной структурой (*вторая модель*) исследования краевых эффектов можно проводить лишь в рамках исходных моделей, так как принципы континуализации и гомогенизации при проведении таких исследований не применимы.

Вывод 2. Для удобства исследования краевые или приповерхностные эффекты можно разделить на эффекты возле граничной поверхности, которая параллельна направлению преимущественного армирования и эффекты возле граничной поверхности типа торца, которая перпендикулярна направлению преимущественного армирования.

Вывод 3. Анализ краевых или приповерхностных эффектов можно проводить и в рамках модели однородного анизотропного тела (*третья модель*), но результаты будут неинформативными по сравнению с анализом в рамках *первой* или *второй* модели.

В настоящее время в рамках модели кусочно-однородного материала (*вторая модель*) уже получен ряд результатов по исследованию краевых или приповерхностных эффектов. Результаты получены в рамках этой же модели, что соответствует выводу 1.

Для приповерхностных эффектов в случае, когда граничная поверхность параллельна границам раздела слоев, в монографии [38] изложен строгий метод решения соответствующих задач применительно к слоистым материалам периодической структуры. Здесь исследованы краевые или поверхностные эффекты в рамках волновой динамики – распространение поверхностных волн вдоль плоской границы.

Для краевых эффектов в случае, когда граничная поверхность перпендикулярна границам раздела слоистого или волокнистого материала, результаты исследования задач статики материалов изложены в 12-и томном издании [26, т.1, раздел 3]. Здесь исследованы только простейшие задачи и результаты получены с привлечением численных методов.

Для приповерхностных эффектов в случае, когда граничная поверхность параллельна границам раздела слоев, результаты по построению теории поверхностной неустойчивости слоистых материалов изложены в монографии [15] (глава 5). Здесь для случаев полного контакта слоев и проскальзывания слоев применен метод, предложенный в [38], и для случая наличия трещин в границе раздела слоев применены численные методы. Эти результаты соответствуют механике разрушения слоистых композитов при сжатии, когда начальным этапом разрушения является потеря устойчивости в приповерхностных слоях.

Для приповерхностных эффектов в случае волокнистых однонаправленных композитов, когда граничная поверхность параллельна волокнам, результаты построения теории поверхностной неустойчивости приведены в монографии [15, глава 6]. Эти результаты соответствуют механике разрушения волокнистых композитов при сжатии, когда начальным этапом разрушения является потеря устойчивости волокон в приповерхностной области.

В заключение приведем исключительный пример композитного материала, когда (с учетом вида нагружения и структуры композита) краевые или приповерхностные эффекты не возникают.

Рассмотрим слоистый композитный материал, составленный из ортотропных слоев постоянной толщины. Слои отличаются толщиной и физико-механическими свойствами. Оси симметрии свойств материалов слоев совпадают с осями координат. Анализ относится к слоистому композиту с произвольным числом слоев в пакете. Такой пакет показан на рис. 2.2. Предполагается, что на плоскостях раздела слоев выполняются условия непрерывности векторов перемещений и напряжений. При этом приведенный анализ остается в силе и для других граничных условий на плоскостях раздела слоев. Рассматривается случай плоской деформации в плоскости $x_1 O x_2$, когда сжатие вдоль оси $O x_1$ осуществляется абсолютно жесткими дисками, которые на рис. 2.2 показаны прямоугольниками темного цвета.

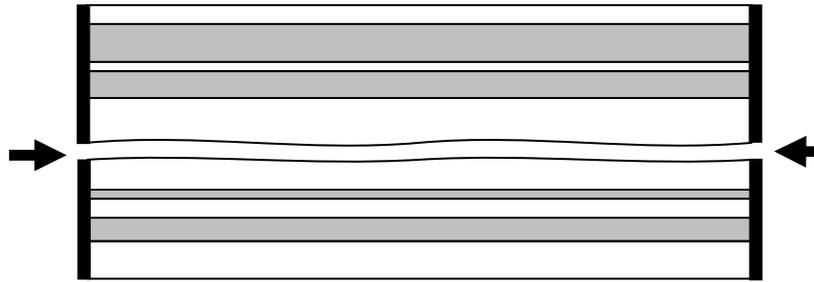


Рис.2.2

Принимается, что абсолютно жесткие диски обеспечивают одинаковое для всех слоев укорочение и возможность «проскальзывания» торцов каждого слоя вдоль дисков. Тогда в каждом из слоев возникает однородное напряженно-деформированное состояние, различное для различных слоев, и таким образом не возникают краевые эффекты обоих рассмотренных выше типов.

Следует также заметить, что на торце каждого из слоев задаются следующие граничные условия $u_1 = Cx_1$ ($C = const$); $\sigma_{12} = 0$. Если же сжатие осуществлять равномерно распределенной нормальной нагрузкой, то в рамках плоской деформации для рассматриваемого материала уже будут возникать краевые эффекты возле торца.

Аналогичное явление отсутствия краевых эффектов возникает и в волокнистых однонаправленных композитных материалах при их сжатии через абсолютно жесткие диски вдоль армирующих волокон. Это явление (однородного напряженно-деформированного состояния в матрице и волокнах) возникает, если дополнительно принять, что коэффициенты поперечного расширения материалов волокон и матрицы совпадают.

Приведенный анализ краевых или приповерхностных эффектов включен в настоящий пункт с целью обеспечения более полного понимания результатов, которые получаются с применением принципов континуализации и гомогенизации.

2.5. О пределах применимости континуальной механики деформируемого твердого тела. Более конкретно рассмотрим вопрос о применимости континуальной механики деформируемого твердого тела к проблемам механики композитных материалов.

Целесообразно отметить, что, безусловно, строгое и полное решение вопроса о пределах применимости, по-видимому, трудноосуществимо с математической точки зрения; в связи с этим ниже рассмотрен один из вариантов приближенного его решения и качественного обсуждения.

Ранее уже отмечалось, что в механике композитных материалов для описания деформирования матрицы и каждого армирующего элемента применяются основные соотношения континуальной механики деформируемого тела. Также отметим, что применимость континуальной механики материалов в случаях макро-, мезо- и микро-механики материалов проанализирована достаточно хорошо. Остановимся здесь на случае наномеханики.

Обратимся к соотношениям (2.1), (2.2) и рис. 2.1, из которых следует, что в структурной механике наноуровня изучают материалы, в которых армирующие частицы могут достигать размеров не менее 1 нанометра (10^{-9} м). В то же время расстояние между атомными плоскостями имеет, как правило, порядок одного или нескольких ангстрем (10^{-10} м); принято считать, что атомы тоже имеют диаметры порядка ангстрем (например, атом углерода имеет диаметр порядка 1,5 ангстрем).

Характерным примером армирующего элемента, который применяется при создании нанокompозитов, является углеродная нанотрубка (CNT), которая бывает однослойной (SWCNT) и многослойной (MWCNT).

Как уже было показано во введении, CNT представляет собой молекулярный слой углерода, состоящий из упорядоченной (зигзагообразной, креслообразной или хиральной) структуры атомов углерода, который как бы свернут в цилиндрическую трубку. С точки зрения молекулярной физики CNT представляет собой дискретную систему, состоящую из частиц (атомов), размеры которых порядка 1,5 ангстрем; при этом расстояние между частицами достигает порядка 1 нанометра. Взаимодействие между отдельными элементами этой дискретной структуры (между отдельными атомами углерода) осуществляется немеханическим способом, так как между отдельными атомами углерода отсутствует материальная среда. Взаимодействие между соседними атомами углерода в пределах одного атомного слоя в случае SWCNT и также взаимодействие между атомами углерода в соседних слоях в случае MWCNT осуществляется за счет сил межатомного взаимодействия, описываемого различными потенциалами.

В связи с этим для определения свойств CNT в настоящее время при теоретических исследованиях в подавляющем числе публикаций используются подходы молекулярной структурной механики, основанные на методе Коши – Борна [62] с привлечением различных потенциалов, описывающих межатомное взаимодействие (например, потенциалов в форме Бреннера [63], Терсофа – Бреннера [173, 174], модифицированного потенциала Морсе [125] и т.п.).

В результате таких подходов получают значения модуля Юнга, коэффициента Пуассона и других величин, характерных для континуальной механики деформируемого твердого тела; таким образом осуществляется континуализация дискретной системы, взаимодействие между отдельными элементами (отдельными атомами) которой происходит за счет сил межатомного взаимодействия.

При дальнейшем построении механики нанокompозитов, армирующими элементами в которых являются SWCNT и MWCNT, они уже рассматриваются как континуальные элементы в рамках континуальной механики деформируемого твердого тела.

Отметим, что стремление описать деформирование армирующих элементов, особенно нанотрубок, в рамках континуальной механики деформируемого твердого тела представляется перспективным и, по-видимому, *единственно целесообразным*, так как оно должно в рамках механики композитов согласовываться с описанием деформирования матрицы, для которой характерен континуальный подход.

Учитывая изложенное, вопрос о применимости основных соотношений континуальной механики деформируемого твердого тела для исследования механических процессов на наноуровне (2.2) можно сформулировать следующим образом:

какие механические поля можно исследовать на наноуровне (2.2), считая рассматриваемую систему сплошной средой (или применяя основные соотношения континуальной механики деформируемого твердого тела)?

При этом необходимо отметить, что в наноформировании (к примеру, нанотрубке) механические поля (поля напряжений и деформаций) изменяются по пространственным переменным.

В связи с этим введем *геометрический параметр L* , который характеризует рассматриваемые механические процессы (характеризует изменяемость механических полей по пространственным координатам) и имеет размерность длины. В случае статических задач параметр L соответствует минимальным расстояниям, на которых существенно изменяются поля напряжений и деформаций; в задачах о распространении волн параметр L соответствует длине волны и в задачах устойчивости параметр L соответствует длине волны формы (моды) потери устойчивости.

Итак, вопрос об определении пределов применимости эквивалентен вопросу об определении границ для параметра L , обеспечивающих возможность исследования механических полей на наноуровне (2.2) с привлечением основных соотношений континуальной механики деформируемого твердого тела (т.е. считая дискретную систему сплошной и однородной средой).

Для решения поставленного вопроса потребуется привлечение введенного в п.2.2 геометрического параметра h , характеризующего внутреннюю структуру материала. Также целесообразно ввести геометрический параметр h^* , который характеризует среднее значение расстояний между центрами частиц во внутренней структуре материала.

Учитывая приведенные выше сведения о размерах атомов и расстояниях между ними, можно считать, что параметры h и h^* применительно к наноформированию имеют следующие значения:

$$h \approx 1,5 \text{ ангстрем}; h^* \approx 1 \text{ нм.} \quad (2.6)$$

Качественное и частично количественное решение вопроса может быть проведено при введении модели анизотропного однородного тела. Для применимости такой модели необходимо, чтобы величина параметра L , характеризующего изменчивость механических полей по пространственным переменным, являлась значительно большей в сравнении с величинами параметров h и h^* , характеризующими структуру композитного материала. Эта ситуация возникает, когда выполняются следующие условия:

$$L \gg h; L \gg h^* . \quad (2.7)$$

Таким образом, из (2.6) и (2.7) получаем, что механические поля на наноуровне (2.2) можно исследовать с привлечением основных соотношений континуальной механики деформируемого тела, если для геометрического параметра L выполняется условие

$$L \gg 1 \text{ нм.} \quad (2.8)$$

Если принять, что условие « \gg » выполняется, когда величины отличаются хотя бы на один порядок, то условие (2.8) можно представить в следующем виде:

$$L \geq 10 \text{ нм.} \quad (2.9)$$

Следовательно, для нанокompозитных материалов с учетом их реальной атомной структуры (правая часть шкалы наноуровня на рис. 2.1) при исследовании механических полей, для которых параметр L удовлетворяет условия типа (2.8) или (2.9), можно применять модель сплошной однородной среды (или можно применять основные соотношения континуальной механики деформируемых твердых тел, что в рассматриваемом случае равносильно).

Условия (2.8), (2.9) также определяют пределы применимости континуальной механики деформируемого твердого тела применительно к исследованию механических полей в компонентах композитного материала (т.е. отдельно в материале матрицы и отдельно в материале каждого из армирующих элементов для материалов с другими масштабными уровнями (макро, мезо и микро) в рамках структурной механики материалов).

Также условия (2.8), (2.9) определяют достаточно широкий круг механических полей, включая поля при воздействиях весьма высокой частоты в динамических задачах и при весьма коротковолновых модах потери устойчивости.

В заключение еще раз заметим, что изложенный выше анализ является приближенным и, по-видимому, в значительной мере имеет качественный характер; все же такой анализ достаточно целесообразен, так как вопрос о пределах применимости континуальной механики к анализу механических полей в современных структурно-неоднородных материалах имеет характер традиционно постоянно обсуждаемого вопроса.

2.6. Две основные модели в структурной механике композитных материалов. Характерной особенностью композитов является их формирование из матрицы и армирующих элементов. При моделировании композитов как материалов с четко выраженной внутренней структурой необходимо знать ряд геометрических параметров, характеризующих эту структуру.

Безусловно, при разработке подходов и методов механики композитных материалов внутренней структуры любого уровня нельзя ориентироваться только на геометрический параметр h , определяющий согласно выражениям (2.1) и (2.2) или рис. 2.1 лишь место данного композита в иерархической структуре материалов. Необходимо также учитывать характер рассматриваемых механических процессов.

В этом случае удобно использовать геометрический параметр L , который характеризует изменяемость механических полей по пространственным координатам. Также для наноформирований оказалось целесообразным использовать геометрический параметр h^* , характеризующий среднее значение расстояний между центрами частиц во внутренней дискретной структуре наноформирования.

Введенные параметры L, h, h^* дают возможность определить две существенно различные модели и соответствующие методы их анализа в рамках механики композитных материалов.

Первая модель – модель кусочно-однородной среды. Она применяется, когда параметр L является величиной одного порядка или меньшей величиной по сравнению с характеризующими структуру композитного материала параметрами h, h^* . Это условие может быть представлено в виде нескольких неравенств

$$L \approx h; L < h; L \approx h^*; L < h^*. \quad (2.10)$$

Если выполняется хотя бы одно из условий (2.10), то деформирование матрицы и каждого из армирующих элементов описывается соотношениями континуальной механики деформируемых тел при определенных условиях на границах раздела, которые соответствуют определенным условиям непрерывности векторов напряжений и перемещений.

При применении трехмерных соотношений континуальной механики деформируемых тел этот подход является наиболее точным и строгим в рамках континуальной механики деформируемых тел. В рамках такой модели проводятся исследования задач статики, динамики, устойчивости и разрушения механики композитных материалов.

Вторая модель – модель однородного анизотропного тела с усредненными свойствами. Она применяется, когда параметр L , характеризующий изменяемость механических полей по пространственным переменным, является значительно большей величиной по сравнению с параметрами h, h^* , характеризующими структуру композитного материала. Запишем сформулированное словами условие в виде неравенств

$$L \gg h; L \gg h^*. \quad (2.11)$$

В этом случае композитный материал моделируется однородным анизотропным телом с усредненными свойствами. Уместно заметить, что теоретические и экспериментальные методы определения значений усредненных постоянных для композитных материалов в рамках модели однородного анизотропного тела широко разработаны, особо необходимо подчеркнуть успехи в развитии теоретических методов.

Также заметим, что вторая модель получается как результат применения принципа гомогенизации. Напомним, что он заключается в замене кусочно-однородной непрерывной среды некоторой однородной непрерывной средой с вычислением соответствующих усредненных свойств в рамках модели однородной анизотропной среды.

Наконец, целесообразно отметить, что вторая модель является более приближенной по сравнению с первой; в связи с этим точность результатов, полученных в рамках второй модели, может быть оценена с привлечением результатов, полученных по первой модели.

3. О свойствах нанонаполнителей (нанообразований), матриц, нанокомпозитов.

3.1. *О позиции механики в наноматериаловедении.* При построении основ механики нанокомпозитов целесообразно учитывать позицию, которую занимает механика в системе общих знаний о материалах вообще и о нанокомпозитах, в частности; при этом под механикой здесь следует понимать механику деформируемого тела, включающую в себя и механику элементов конструкций. По-видимому, общепризнан факт, что механике, безусловно наряду с технологией, отводится одна из лидирующих позиций при создании элементов конструкций аппаратов, машин и механизмов различного назначения. Даже эффективность новых материалов можно определять по их функционированию в виде различных элементов конструкций. Это относится и к наноматериалам, в частности, и к нанокомпозитам, так как их использование даже в прецизионных (миниатюрных) аппаратах и устройствах реализуется в виде элементов конструкций.

Напомним, что выше приведены соображения о применимости механики к исследованию композитных материалов на различных структурных уровнях. Представленные там схемы свидетельствуют, что наноматериалы и нанокомпозиты соответствуют самым тонким структурам (к примеру, расположенным справа на рис. 2.1) и соответствуют уровню, где уже возможно и целесообразно учитывать атомную структуру.

Поэтому при определении позиции механики в исследованиях по наноматериалам особую значимость приобретают экспертные оценки специалистов; при этом, безусловно, важным является также анализ актуальности и современности такого рода научных исследований.

Следует заметить, что исследования по наноматериалам, в частности по нанокомпозитам, достаточно популярны у представителей различных научных направлений и широко проводятся в различных научных центрах; по такому критерию, исследования по наномеханике материалов можно считать весьма современным научным направлением.

В связи с этим возникает вопрос о других современных актуальных направлениях в механике и, самое главное, вопрос о подходах, принципах и методологии определения «современности и актуальности».

Безусловно, вопрос «актуальности и современности» научных направлений или их новизны рассматривается и решается наиболее объективно, если к его обсуждению и решению привлекаются представители различных научных направлений из различных государств; при этом важным представляется избежать присутствующего практически всегда «давления» представителей отдельных научных направлений и научных школ.

С учетом изложенных соображений весьма интересной представляется информация об акции, реализованной в США Отделением наук о материалах и инженерных наук (*Division of Materials Sciences and Engineering*) Департамента по энергетике США (*DOE*). В соответствии с этой акцией была профинансирована работа группы экспертов для определения острых научных потребностей и возможностей, которые даются при использовании теоретической и прикладной механики. По существу, речь шла об определении современных проблем, в решении которых применение механики может быть актуальным; при этом заключительные рекомендации, авторами которых являются 17 известных ученых, сформулированы как "*Новые направления в механике*" [127]. В группу экспертов входили специалисты различных научных направлений: механики, физики, химии, биологии, материаловедения и компьютерных наук; при этом рассматривалась связь между исследованиями на атомном уровне и исследованиями по механике на нано-, мезо- и континуальном уровнях. Группа включала представителей ряда научных центров США, Германии и Франции. Столь широкое представительство специалистов различных научных направлений из большого числа научных центров, вполне естественно, привело к тому, что в заключительном материале [127], *который можно рассматривать как некую программу развития механики*, проявляются и некоторые аспекты научной фантастики; однако отмеченная ситуация лишь усиливает актуальность участия науки механики в решении сформулированных в [127] современных научно-технических проблем.

Упомянутые выше проблемы характерны тем, что в их решении роль механики может быть существенной; таким образом, в соответствии с замыслом [127] эти проблемы и определяют новые направления в механике, что отражено и в названии статьи «*New directions in mechanics*».

Рассмотрим далее лишь проблемы, связанные с механикой материалов, которая в значительной мере определяется механикой деформируемого твердого тела; при этом, следуя [127], названия конкретных проблем приведем на языке оригинала, чтобы избежать неточностей, которые могут возникнуть при переводе. Эти проблемы разделены на **две группы**.

К первой группе отнесены области, в которые *механика может внести значительный вклад, но где лидирующая роль механики не является общепризнанной*.

1. Microelectronics reliability issues, aging; control of manufacturing.
2. Nano- and mesomanufacturing and sensor design.
3. Light-weight structure technology.
4. Microimprinting and embossing.
5. Protective coatings.

Ко второй группе отнесены области, в которых *механика играет лидирующую роль*.

1. Failure, fragmentation, fracture, brittle to ductile transition, blast resistant structures.
2. Safety and reliability issues.
3. Mathematical modeling, including analytical solutions and multiscale computational algorithms.
4. Bridging from basic understanding to predictive codes/models.
5. Bottom-up approaches in nanotechnology.

Сформулированные группы проблем дают возможность определить «актуальность и со временность», а также «новизну» конкретных научных направлений по механике деформируемого твердого тела.

Поскольку технология нанокompозитов является составной частью нанотехнологии, то в соответствии с [127] механика нанокompозитов получает лидирующую роль в «Bottom-up approaches in nanotechnology» (*Восходящие снизу подходы в нанотехнологии*) в той части, которая относится к технологии нанокompозитов.

Отмеченные соображения позволяют сформулировать следующий вывод, определяющий место механики нанокompозитов в современной научно-технической тематике.

Вывод. *Механика нанокompозитов является новым направлением в механике; проблемы механики нанокompозитов являются актуальными и современными; при этом механике нанокompозитов отводится лидирующая роль в соответствующей части нанотехнологий.*

Целесообразно отметить, что в [127] в проблемах второй группы (пятая позиция) использована терминология, которая является общепринятой в технологиях (Bottom-up approaches in nanotechnology). Поскольку механика, как одна из старейших наук, также имеет установившуюся терминологию, то, видимо, ситуация требует некоторого обсуждения.

Так, в технологиях общеизвестными являются подходы «Bottom-up» и «Top-down».

Подход «Bottom-up» заключается в создании материалов, исходя из мельчайших частиц в направлении более крупных образований. При таком подходе наиболее существенное значение имеет база – совокупность и характер мельчайших частиц, которая является основой для построения более крупных объемов материала; эта база получила название «bottom» (основание, фундамент, низ).

Подход «Top-down» заключается в создании материалов, исходя из больших объемов материала (сырьевой базы) в направлении более мелких образований (кусков) материала; при этом сырьевой материал прессуется, режется, отливается или еще каким-то образом формируется в куски или изделия. При таком подходе наиболее существенное значение имеют возможности инструмента, которыми определяется нижний предел в размерах кусков материала или изделия.

В механике как науке основным подходом, по-видимому, можно считать построение моделей явлений, процессов и материалов; при этом с учетом исторического опыта в механике материалов развиваются модели в направлении исследования структуры материала с все более и более мелким масштабом внутренней структуры. Так, в п.2.2 рассмотрена шкала масштабных уровней, соответствующая развитию моделей в механике материалов в направлении от макромеханики к наномеханике.

Напомним, что в соответствии с [179] механика является, в сущности, бесконечным классом моделей для представления определенных аспектов природы.

При анализе рассматриваемой терминологии целесообразно обратиться к обзору [175] (опубликован в 2005 г.) с характерным названием «Nano-composites in context (review)», которое созвучно названию хорошо известного обзора «Composites in context» [128] (опубликован в 1985г.); для иллюстрации приведем высказывание из [175]:

ученые и инженеры, работающие с волокнистыми композитами, использовали этот «Bottom-up» подход в технологии и изготовлении на протяжении десятков лет. При создании композита свойства материала формируются заданными характеристиками различных уровней длины. От выбора и изготовления материалов матрицы и волокон и создания и оптимизации промежуточной фазы между волокном и матрицей на субмикронном уровне до пучков нитей в двухмерной и трехмерной тканях для наслаивания ламинатов в слоистых композитах и окончательно сеточной формовки макроскопических частей композита, такой интегрированный подход, используемый в производстве композитов, является поразительным примером в успешном использовании подхода «Bottom-up».

Из приведенного высказывания следует, что термин «Bottom-up» применяется в технологии и что подход «Bottom-up» был широко использован при создании микрокомпозитов (микрокомпозиты соответствуют микроуровню и анализируются в микромеханике).

Из изложенного обсуждения терминологии следует, что целесообразно выделить следующих **три основных момента**.

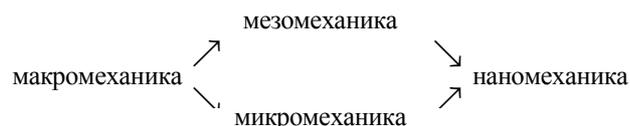
Первый момент. При создании нанокompозитов (с учетом принятой в технологиях терминологии) реализуется следующая цепочка (последовательность) в формировании материала:

совокупность атомов (bottom, низ, основание, фундамент) → наномолекулы, нанотрубки → нанообразования (наночастицы, нанопластины; нанопроволоки, наножгуты, нановеревки → нановолокна) → нанокompозит.

Таким образом, в технологии создания нанокompозитов подход «Bottom-up approach» реализуется путем создания материала, начиная с совокупности атомов.

Эта терминология повсеместно встречается в публикациях по нанотехнологиям и наноматериалам. Так, в книге [188] описанию этих подходов «Bottom-up» и «Top-down» посвящен специальный пункт 1.9. Отметим, что термин «bottom» применялся еще в известной лекции Р.Фейнмана [85], которая упоминалась выше.

Второй момент. В структурной механике материалов основным подходом является построение цепочки моделей в направлении все более глубокого учета внутренней структуры материалов. В соответствии со шкалой уровней, представленной в п. 2.2, эту последовательную цепочку моделей можно схематически изобразить следующим образом:



Таким образом, можно считать, что термины «восходящие снизу подходы» (*bottom-up approaches*) и «нисходящие сверху подходы» (*descending approaches*) имеют в структурной механике материалов свою интерпретацию применительно к шкале уровней, представ-

ленной на рис. 2.1. Так, термин «*восходящие снизу подходы*» соответствует движению слева направо к правому краю шкалы уровней на рис. 2.1. Термин «*нисходящие сверху подходы*» соответствует движению справа налево от правого края шкалы уровней на рис. 2.1; напомним, что правому краю шкалы уровней на рис. 2.1 соответствуют подходы, где учет атомной структуры является обязательным.

Следует отметить, что термины «*восходящие снизу подходы*» и «*нисходящие сверху подходы*» в монографии [15] и в соответствующей статье [103] проанализированы лишь с точки зрения структурной механики материалов и соответствуют приведенным выше соображениям.

Третий момент. Несмотря на некоторое отличие терминологии в технологиях и в структурной механике материалов, исследования по механике нанокompозитов (при применении указанных терминов) проводятся в рамках наноуровня; в связи с этим на первом этапе исследования проводятся с учетом атомной структуры при различных способах ее описания.

Необходимо отметить, что в статье [105] был предложен подход в механике нанокompозитов, соответствующий по терминологии [127] «*bottom-up approaches*»; также отметим, что статья [105] опубликована в 2003 г. и статья [127] опубликована в 2005 г. В соответствии со [105] в механике нанокompозитов предложено применять подходы и методы структурной макро-, мезо- и микромеханики материалов, в которой матрица и наполнитель (волокна) описываются в рамках континуальных представлений; в связи с этим было отдано предпочтение применению подходов и методов микромеханики материалов, изложенных в соответствующих томах 12-томного издания [26], как наиболее близкой в иерархии структурных элементов. Также в [105] для описания свойств и размеров наночастиц было предложено применять результаты, полученные в рамках структурной молекулярной механики с учетом атомной структуры наночастиц; при этом свойства, полученные с учетом атомной структуры, в рамках механики нанокompозитов предлагалось применять в континуальном приближении.

3.2. *Описание свойств нанотрубок и других нанонаполнителей.* Прежде всего, следует отметить, что в нанокompозитных материалах наночастицы применяются для дисперсного упрочнения полимерной матрицы (связующего) и удлиненные нанокompозиты применяются для создания нанокompозитов с уже упрочненной матрицей; в этом случае даже применяется термин «трехфазные нанокompозиты» (полимерная матрица; наночастицы, дисперсно упрочняющие матрицу; удлиненные нанокompозиты).

Приведем краткие сведения о, по-видимому, наиболее перспективном и наиболее распространенном наполнителе – углеродных нанотрубках (CNT). Как уже отмечалось выше, углеродные нанотрубки бывают однослойные (SWCNT) и многослойные (MWCNT); SWCNT представляют собой состоящий из атомов молекулярный слой углерода (графита), как бы свернутый в цилиндрическую трубку; любая цилиндрическая нанотрубка (вытянутый фуллерен) может рассматриваться как бы свернутая из графитового листа. Отличаются нанотрубки способом сворачивания (скручивания), диаметром и длиной; на концах нанотрубок атомы углерода расположены на поверхности в виде полусферы. Поскольку сетки графита могут быть по-разному скручены, то они образуют три различные структуры:

зигзагообразную, хиральную и креслоподобную.

Для примера на рис. 3.1 показаны последовательно слева направо схематически три однослойные нанотрубки: креслообразной, зигзагообразной и хиральной структуры с изображениями снизу под каждой трубкой ее вида сверху; справа – реальная хиральная нанотрубка диаметром 1,3 нм. В ряде случаев прямые нанотрубки имеют более сложную структуру.

Из рис. 3.1 следует, что CNT представляют собой сугубо дискретные структуры, состоящие из атомов углерода, взаимодействие между которыми осуществляется за счет *сил межатомного взаимодействия* и которые расположены на круговых цилиндрических поверхностях.

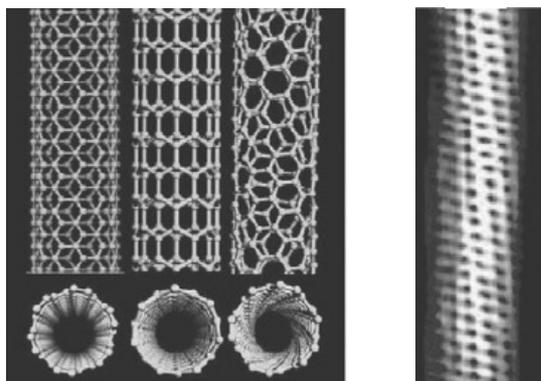


Рис. 3.1

Для синтеза нанотрубок применяются многие из указанных ранее традиционных способов нанотехнологии – плазменно-дуговое напыление, химическое осаждение из паров, лазерное разрушение, выращивание из однооксида углерода.

SWCNT могут образовывать неровные структуры или связки веревок. Ансамбли из нанотрубок могут иметь диаметр 30 – 50 нм и превышать длину 50 микрон [188]. Ветки могут иметь диаметр 10 – 20 нм и длину 100 и более микрон [188]. Ветки состоят из связок трубок, упакованных упорядоченным образом в виде решетки.

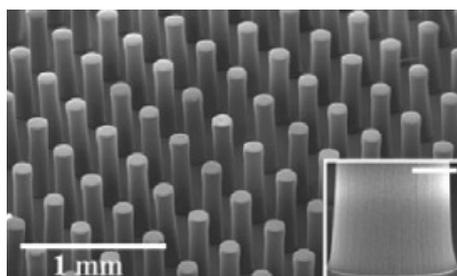


Рис. 3.2

Пример такой структуры показан на рис. 3.2: показана решетчатая структура цилиндрических столбиков (микростерженьков радиусом 150 микрон с шагом структуры 250 микрон и высотой 1 мм; в углу показано основание стерженька), образованная из SWCNT [158].

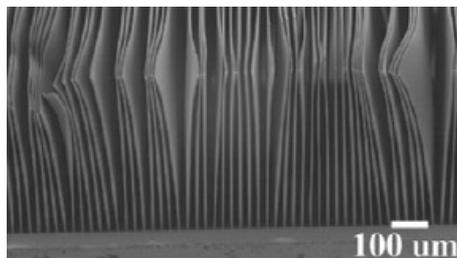


Рис. 3.3

Другой пример на рис. 3.3 показывает микропластинки толщиной 10 микрон, образованные из нанотрубок [158].

В заключение следует отметить *особое технологическое преимущество нанотрубок* – обычные углеродные волокна изготавливаются при высокой температуре, тогда как углеродные нанотрубки могут изготавливаться при обычной температуре из коллоидных растворов.

Приведем еще замечание из [158]: *Хотя нанотрубки проявляют идеальные характеристики в начальной среде со сверхвысоким вакуумом, образцы в обычных условиях, подвергаясь действию воздуха и водяных паров, проявляют электронные свойства, которые являются заметно иными. Механические свойства, вероятно, проявляют подобную чувствительность.*

3.3. Свойства нанотрубок и нанообразований. Теоретические и экспериментальные результаты. Дискретность структуры SWCNT как механических систем уже отмечалась ранее. Также отмечалось, что при определении физико-механических свойств SWCNT и других нанообразований применяется концепция *континуализации* и дискретная структура приближенно заменяется однородной непрерывной системой (сплошной средой, деформируемым телом). При этом определяются величины, характерные для континуальной механики деформируемых тел (модуль Юнга; коэффици-

ент Пуассона; предел пропорциональности; предел текучести; предел прочности; деформации, соответствующие разрушению и т.п.).

Учитывая крайне недостаточный уровень изученности свойств нанотрубок и нанообразований и существующую весьма хорошую базу механических характеристик микрокомпозитных материалов, приведем сначала факты из микромеханики материалов, необходимые для дальнейшего сравнительного обсуждения. Из многих важных достижений механики композитных материалов укажем на два.

Первое достижение относится к пониманию роли механических моделей: один и тот же композит может описываться разнообразными микроструктурными моделями – от сложных многоконтинуальных до дискретных в виде решетки [26, 30, 68, 164]. Каждая модель обладает определенными преимуществами при анализе той или иной конкретной задачи. Обилие моделей свидетельствует о достигнутой глубине понимания в микромеханике материалов.

Второе достижение состоит в том, что для компонентов композитного материала (матрицы, гранул, волокон, слоев) имеется большой набор различных механических характеристик. Приведем здесь для примера перечень такого набора для арамидных волокон (кевларов) [122]: 1) плотность; 2) диаметр одиночного волокна; 3) равновесная влажность; 4) предел прочности при растяжении; 5) удлинение при разрыве; 6) начальный модуль упругости; 7) максимальный модуль упругости; 8) модуль упругости при изгибе; 9) расчетный модуль при осевом сжатии; 10) динамический модуль упругости; 11) доля прочности в петле от предела прочности при растяжении; 12) усталостные свойства (число циклов изгиба до разрушения); 13) ползучесть при нагружении до 0,9 предела прочности; 14) коэффициент трения.

Из приведенных далее сведений о механических характеристиках нанотрубок и нанообразований следует, что они недостаточны и приведенный пример с четырнадцатью характеристиками одного волокна следует понимать как отдаленную цель в наномеханике.

Отдельные типы микрокомпозитов включали армирующие элементы столь малых размеров, что в рамках современной классификации такие материалы следует отнести к наноматериалам, а их наполнители отнести к наночастичкам. Из таких наполнителей укажем здесь кристаллы неорганического титаната с коммерческим названием *фабекс* (fubex) и специальные виды *усов* (whiskers) – кремниевое-углеродные SiC и сапфировые с коммерческим названием *кобвеб* (cobweb) [122].

Файбексы имеют вид микроволокна с диаметром 100 – 160 нм (см. рис. 3.4, ширина рисунка соответствует примерно 20 микронам). Кремниевое-углеродные усы тоже имеют вид длинного волокна с диаметром в сотни нм [122] (см. рис. 3.5, ширина рисунка соответствует примерно 30 микронам). Кобвебы – это длинные скрученные волокна диаметром около 18 нм [122] (см. рис. 3.6, ширина рисунка соответствует примерно 1,1 микрона). Некоторые наночастички можно рассматривать как полученные в развитие исследований высокотехнологичных наполнителей композитных материалов, упомянутых выше – усов и окисей. В частности, сюда следует отнести нанокристаллы окиси церия CeO_2 [122] (см. рис. 3.6, ширина рисунка эквивалентна 250 нм) и окиси цинка ZnO [122] (см. рис. 3.7, ширина рисунка соответствует 500 нм).

Обратимся снова к набору из 14 механических величин, характеризующему микроволокно. Он подтверждает известный в механике факт о том, что

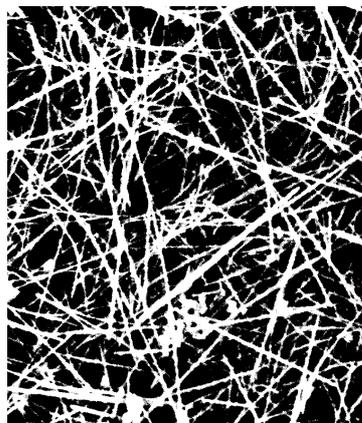


Рис. 3.4

плотность, жесткость и прочность

являются наиболее важными техническими характеристиками материала. В настоящее время количественная информация, относящаяся к техническим характеристикам наноматериалов, представляется в рамках различных научных направлений, исходя как из теоретических подходов, так и экспериментальных исследований, принятых в этих научных направлениях.



Рис.3.5

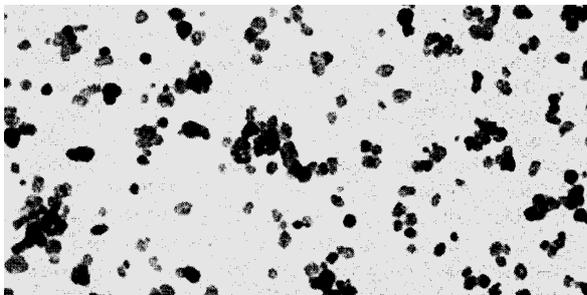


Рис.3.6

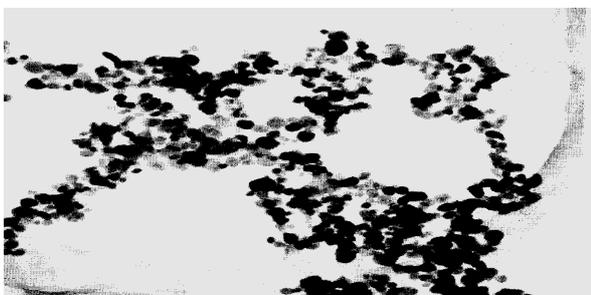


Рис.3.7

По-видимому, целесообразно количественную информацию согласовывать с соответствующими подходами и представлениями механики материалов, включая и общепринятые стандарты для определения соответствующих величин.

Это соображение представляется существенным в связи с тем, что как уже отмечалось ранее, исследования в рамках механики

наноматериалов можно считать заключительным моментом в исследованиях по наноматериалам перед анализом работы наноматериалов в элементах конструкций, что и должно предопределять широкое применение этих материалов.

Полагаем целесообразным напомнить еще раз одно из важных наблюдений из механики микрокомпозитов – механические свойства наполнителей (гранул, волокон, тонкой фольги), определенные со всей строгостью стандартных испытаний, большей частью оказываются несколько (а иногда и даже весьма) иными в случае, когда наполнители являются частью композитного материала.

Может также оказаться справедливым предсказание, что наночастицы как наполнители или как ансамбли будут иметь в действительности несколько отличные механические свойства от предсказанных или вычисленных для отдельно взятой частицы.

Далее, полагая наиболее перспективными волокнистые нанокompозиты, сосредоточим внимание на волокнах как наполнителях.

С целью последующего сравнения приведем сначала в табл. 3.1 сведения о физико-механических свойствах различных перспективных микронаполнителей, которые используются в волокнистых микрокомпозитах; данные табл. 3.1 получены в результате систематизации сведений для различных материалов, которые приведены в монографии [122]. Здесь введены обозначения: E – модуль Юнга; ν – коэффициент Пуассона; γ – удельный вес; $\sigma_{пр}$ – предел прочности при растяжении; $\varepsilon_{разр}$ – деформация разрушения при растяжении.

Таблица 3.1

Тип волокна	Марка волокна	E , ГПа	$\sigma_{пр}$, МПа	$\epsilon_{разр}$, %	γ , кг/дм ³	ν
Углеродное	Высокомодульное	352 – 422	1,76 – 2,88	—	1,94	—
	Высокопрочное	246 – 295	2,46 – 3,16	—	1,76	—
	Тип А	197 – 246	1,93 – 2,28	—	1,74	—
Борное	Диаметр 100, 140, 200 мкм	400	3,45	—	2,6	0,21
Стеклянное	E	73,5	3,50	4,7	2,54	0,20
	S	86,5	4,65	5,3	2,49	—
	D	52,5	2,45	4,6	2,16	—
	C	70,0	2,80	4,0	2,49	—
	L	51,0	1,68	3,2	4,30	—
	M	111,0	3,50	3,1	2,89	—
Керамическое	FP	387	1,41 – 1,62	0,35	3,95	—
	AB – 312	152	1,72	1,2	2,50	—
	AC – 02	159	1,38	1,2	2,80	—
	ZS – 11	96,5	1,03	1,1	3,70	—
Стальная проволока		196,2	3,43	2,0 – 2,5	7,87	0,30

Далее рассмотрим CNT как наиболее используемые наполнители в нанокompозитных материалах. Следуя [104], приведем некоторые сведения о механических свойствах углеродных нанотрубок, включая SWCNT и MWCNT, которые получены экспериментальными и теоретическими методами; в списке литературы из [104] указаны первоисточники.

Так, для модуля Юнга E результаты, полученные экспериментальными методами, представлены на рис. 3.8 и результаты, полученные теоретическими методами, представлены на рис. 3.9. Заметим, что в квадратных скобках на этих рисунках указаны номера первоисточников из списка литературы. Также заметим, что на рис. 3.8 и рис. 3.9 значение модуля Юнга E приведено в ГПа ($1 \text{ ГПа} = 10^{12} \text{ Па}$); кроме того, на этих рисунках значками ■, ● и ▲ отмечены результаты, полученные различными экспериментальными и теоретическими методами, названия которых указаны в верхних частях рисунков.

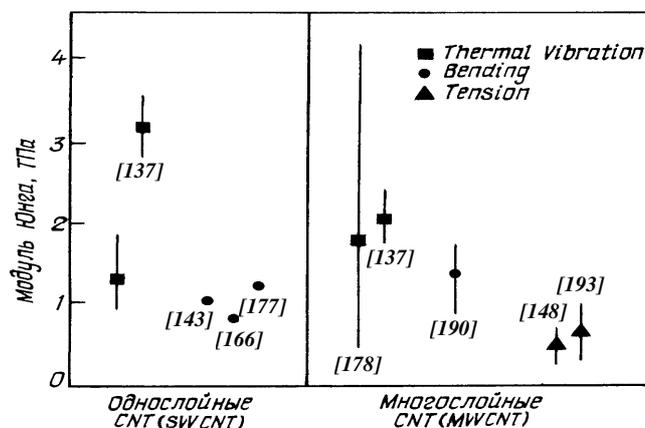


Рис. 3.8

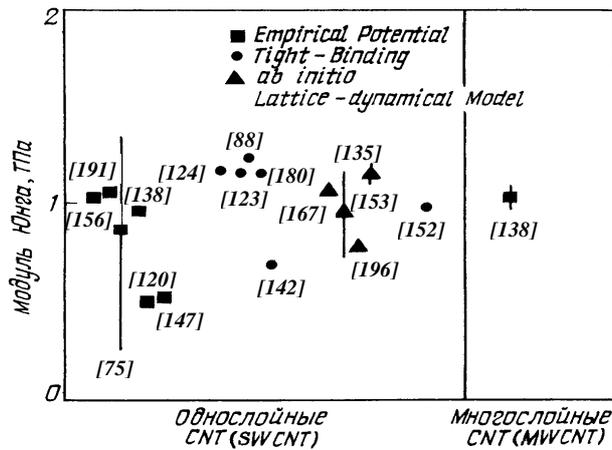


Рис. 3.9

В табл. 3.2 приведены результаты для однослойных, двухслойных, трехслойных и четырехслойных CNT различной хиральности, которые получены теоретическим методом *molecular dynamics simulations* для сравнительно коротких CNT. Здесь введены следующие обозначения: L – длина и D – диаметр CNT; E – модуль Юнга в терапаскалях; σ_l – предел пропорциональности; ϵ_l – деформация, соответствующая пределу пропорциональности; σ_{yield} – предел текучести; ϵ_{yield} – деформация, соответствующая пределу текучести; $\sigma_{str} = \sigma_{fr}$ – предел прочности при одноосном растяжении или напряжения при разрушении; ϵ_{fr} – деформация, соответствующая разрушению; ϵ_{el}^{max} – максимальные упругие деформации, которые могут возникать в CNT.

Таблица 3.2

CNT различной хиральности	$\frac{L}{D}$	E ТПа	$\sigma_l \cdot 10^{-4}$ МПа	$\sigma_{yield} \cdot 10^{-5}$ МПа	$\sigma_{fr} \cdot 10^{-5}$ МПа	$\epsilon_l \cdot 10$	ϵ_{el}^{max}	ϵ_{fr}	- A ТПа	B ТПа
однослойные (10,10)	4,5	1,043	6,103	1,369	1,404	0,585	0,231	0,280	2,625	1,211
	9,1	1,031	6,271	1,421	1,485	0,594	0,236	0,279	2,522	1,190
двухслойные (5,5), (10,10)	4,5	1,161	7,231	1,614	1,624	0,627	0,247	0,279	2,543	1,259
	9,1	1,175	7,287	1,633	1,685	0,621	0,242	0,281	2,810	1,362
трехслойные (5,5), (10,10), (15,15)	4,5	1,000	6,068	1,430	1,434	0,605	0,238	0,281	2,358	1,160
	9,1	0,972	5,645	1,381	1,414	0,611	0,246	0,282	2,275	1,120
четырёхслойные (5,5), (10,10), (15,15), (20,20)	4,5	0,932	6,075	1,343	1,382	0,654	0,235	0,281	2,234	1,103
	9,1	0,872	5,784	1,278	1,327	0,633	0,241	0,280	2,132	1,023

Заметим, что в анализируемых теоретических исследованиях было описано также и нелинейное деформирование CNT; в связи с этим в табл. 3.2 приведены значения постоянных A и B , которые входят в следующее нелинейное соотношение:

$$\sigma = (A\varepsilon + B)\varepsilon \text{ при } \varepsilon_i \leq \varepsilon \leq \varepsilon_{yield} . \quad (3.1)$$

На рис. 3.10 представлена кривая деформирования ($\sigma \sim \varepsilon$) при одноосном растяжении четырехслойной CNT, слои которой имеют хиральность (5,5), (10,10), (15,15) и (20,20), при $(L/D) = 4,5$ и на рис. 3.11 представлена кривая деформирования ($\sigma \sim \varepsilon$) при одноосном растяжении однослойной CNT хиральности (10,10) при $(L/D) = 9,3$. Результаты на рис. 3.10, рис. 3.11 и в табл. 3.2 приведены лишь в качестве примеров; в списке литературы указаны первоисточники, где представлено значительно больше подобных результатов (см., например, [202]). Заметим, что точка P соответствует пределу пропорциональности, точка S – пределу текучести и точка M – разрушению.

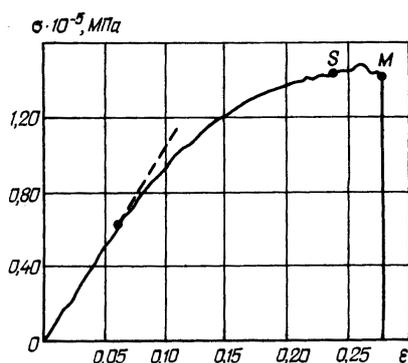


Рис. 3.10

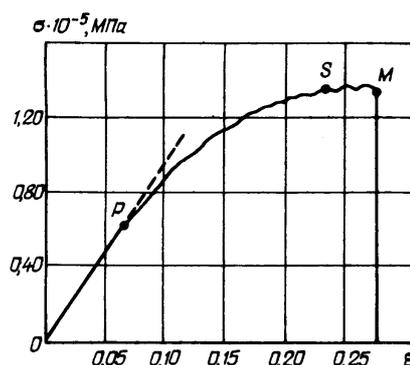


Рис. 3.11

Из анализа указанных выше результатов и аналогичных результатов других авторов следует, что при определении модуля Юнга E для CNT получен существенный разброс; причем этот вывод в равной мере относится как к результатам, полученным экспериментальными методами, так и к результатам, полученным теоретическими методами, применительно и к SWCNT, и к MWCNT.

Однако в числовых расчетах для описания свойств наполнителей приходится выбирать четко определенные значения. Ниже, для примера, укажем механические свойства для наполнителя *четырёх типов*.

Первый тип наполнителя – промышленное углеродное волокно Торнел -300 с такими свойствами: средний диаметр волокна равен 8 микрон; плотность $\rho = 1,75 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$ модуль Юнга $E = 228 \text{ ГПа}$; модуль сдвига $\mu = 88 \text{ ГПа}$; коэффициент Пуассона $\nu = 0,30$ [121]. Напомним, что углеродные волокна являются одним из основных типов высокомодульных наполнителей композитов с органическими связующими. Волокна марки Торнел используются для обеспечения высокой прочности ответственных деталей в изделиях крупнейших аэрокосмических фирм (Локхид, Дженерал Дайнемикс, Нортроп и др.) [121].

Второй тип наполнителя – графитовые усы с такими свойствами: средний диаметр равен 1 микрон, плотность $\rho = 2,25 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, модуль Юнга $E = 1,0 \text{ ТПа}$, модуль сдвига $\mu = 385 \text{ ГПа}$, коэффициент Пуассона $\nu = 0,30$ [122]. Напомним, что усами называют созданные в специальных условиях отдельные кристаллы, имеющие удлиненную форму, более или менее близкую к волокну [122]. Из-за исключительно малого диаметра усов количество дефектов в них существенно меньше, чем в больших кристаллах; поэтому прочностные свойства усов значительно лучше; обычно длина усов превосходит их диаметр от 10 до 200 и более раз. В семидесятые годы количество материалов, из которых изготавливались усы, составляло более 100. В это число входят усы из графита.

Третий тип наполнителя – зигзагообразная CNT с такими свойствами: средний диаметр трубки – 10 нм; плотность $\rho = 1,33 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, модуль Юнга $E = 0,648 \text{ ТПа}$; модуль сдвига $\mu = 221 \text{ ГПа}$; коэффициент Пуассона $\nu = 0,33$ [188].

Четвертый тип наполнителя – хиральная CNT с такими свойствами: средний диаметр трубки – 10 нм, плотность $\rho = 1,40 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, модуль Юнга $E = 1,24 \text{ ТПа}$; модуль сдвига $\mu = 477 \text{ ГПа}$; коэффициент Пуассона $\nu = 0,30$ [188].

Следует заметить, что результаты по определению коэффициента Пуассона ν для CNT анализировались в работах [99, 104]; в [99] указано, что в существующих публикациях коэффициент Пуассона изменяется в таких пределах:

$$0,20 \leq \nu_a \leq 0,35. \quad (3.2)$$

Поскольку в результатах по определению модуля Юнга E , представленных на рис. 3.9, рис. 3.10 и табл. 3.2, имеется существенный разброс, то в [104] предложено при определении теоретического предела прочности на сжатие использовать как бы «среднее» CNT со следующим значением модуля Юнга:

$$E_a \approx (1,00 - 1,20) \text{ ТПа}. \quad (3.3)$$

Необходимо заметить, что изложенные выше результаты по определению модуля Юнга и коэффициента Пуассона для CNT получены при моделировании CNT изотропным упругим телом. Из вида креслообразной и зигзагообразной структур CNT следует, что для этих наполнителей, по-видимому, более предпочтительной моделью является модель трансверсально-изотропного тела, ось изотропии которого совпадает с осью цилиндра, или модель ортотропного тела.

Также отметим, что в нанокompозитах в качестве армирующих элементов могут применяться не только отдельные SWCNT и MWCNT, а также нановеревки, нанопроволоки, нановолокна и другие нанообразования, построенные на основе SWCNT и MWCNT.

В качестве примера возможных армирующих элементов на основе CNT рассмотрим однонаправленную упорядоченную структуру CNT. На рис. 3.12 представлена однонаправленная упорядоченная система CNT, полученная методом «plasma-induced alignment». В левом нижнем углу рисунка указан масштаб изображения, в правом нижнем углу показан фрагмент поперечного сечения системы.

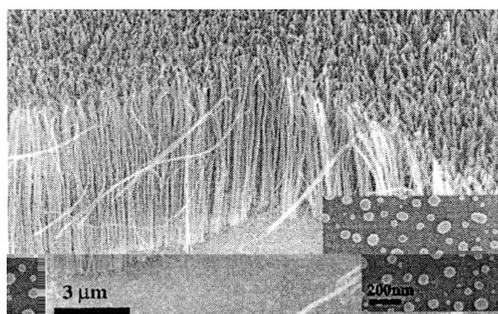


Рис. 3.12

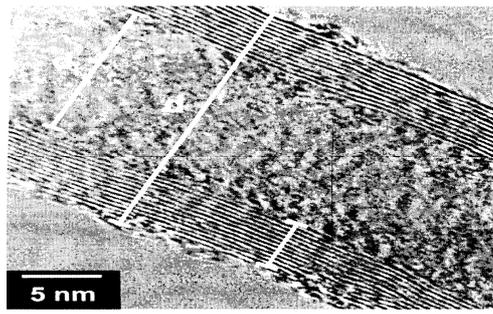


Рис. 3.13

Информация об однонаправленной упорядоченной системе CNT, показанной на рис. 3.12, а также сам рисунок приведены в публикации [103]; в списке литературы к [103] указаны первоисточники.

Рассмотрим далее кратко некоторые сведения относительно геометрических размеров нанообразований. Прежде всего, рассмотрим MWCNT, полученную методом химического осаждения из паров. На рис. 3.13 показано продольное сечение такой трубки и указаны ее толщина, внутренний и внешний диаметры.

Из рис. 3.13 следует, что трубка состоит как бы из однослойных CNT в виде коаксиальных круговых цилиндров, которые поочередно осаждены (методом химического осаждения из паров) друг на друга; при этом взаимодействие между слоями также осуществляется и за счет сил межатомного взаимодействия.

В дальнейшем при обсуждении геометрических размеров нанообразования введем для сокращения безразмерные величины D , h , L и R при таких обозначениях: D , нм – внешний диаметр; h , нм – толщина; L , нм – длина; R , нм = $0,5(D - h)$, нм – радиус срединной поверхности цилиндрической части нанообразования (общепринятый параметр в теории оболочек).

Для сравнительно большого числа MWCNT (около 700 нанотрубок), полученных методом химического осаждения из паров, был выполнен анализ зависимости толщины нановолокна от его внешнего диаметра.

Результаты анализа представлены на рис. 3.14, из которого получена также линейная зависимость в следующем виде:

$$h = -3,0793 + 0,4796D \text{ при } 10 \leq D \leq 70. \quad (3.4)$$

Выражение (3.4), рис. 3.13 и 3.14 взяты из публикации [103]; в списке литературы к [103] указаны первоисточники.

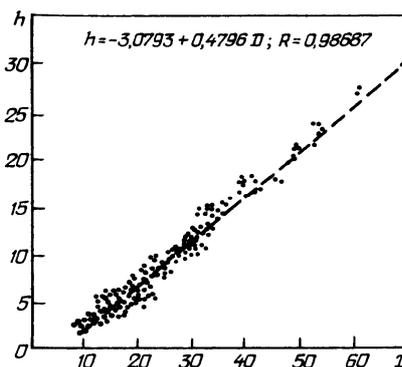


Рис. 3.14

Рассмотрим параметр тонкостенности h/R , который широко используется в теории оболочек; с учетом (3.4) и изложенных выше результатов относительно MWCNT для определения параметра тонкостенности получаем выражение

$$(h/R) = 2(-3,0793 + 0,4796D)/3,0793 + 0,5204D \text{ при } 10 \leq D \leq 70. \quad (3.5)$$

Следуя [103], для рассматриваемых MWCNT в табл. 3.3 приведены вычисленные по (3.5) значения параметра тонкостенности h/R для ряда значений внешнего диаметра D из интервала $10 \leq D \leq 70$.

Таблица 3.3

D	10	20	30	40	50	60	70
h/R	0,41	0,97	1,21	1,35	1,44	1,50	1,54

Из приведенных в табл. 3.3 результатов следует, что MWCNT нельзя, по-видимому, анализировать в рамках подходов и моделей двумерных прикладных теорий тонкостенных оболочек, построенных с привлечением известных гипотез. Возможно, в случае длинноволновых форм (мод) потери устойчивости целесообразно было бы проводить анализ в рамках подходов и моделей прикладных теорий устойчивости пустотелых стержней; все же из опыта анализа родственных явлений микромеханики традиционных композитов следует, что в явлении потери устойчивости нановолокон в матрице не наблюдаются весьма длинноволновые формы (моды) потери устойчивости.

В случае же SWCNT, которые можно полагать тонкостенными оболочками, или тонкостенных MWCNT можно считать возможным применение двумерных прикладных теорий устойчивости тонкостенных оболочек.

Продолжим изложение сведений о геометрических размерах нанообразований, учитывая принятые безразмерные обозначения D , h , L .

В настоящее время принято считать, что в 2000 – 2001 гг. были обнаружены SWCNT с наименьшей толщиной $h = 0,4$. SWCNT также могут образовывать нановеревки (nanoropes) и ансамбли из нанотрубок. Так, нановеревки могут иметь следующие размеры:

$$D \approx 10 \dots 20; L/D \leq 1000. \quad (3.6)$$

Ансамбли из CNT могут иметь следующие геометрические размеры:

$$D \approx 30 \dots 50; L/D \leq 1000. \quad (3.7)$$

Рассмотренные выше MWCNT, образованные методом химического осаждения из паров, были получены со следующими геометрическими параметрами:

$$D < 50; L > 1000. \quad (3.8)$$

В периодических изданиях также описаны MWCNT с параметрами:

$$D \approx 20 \dots 100; L = \text{несколько тысяч}. \quad (3.9)$$

Различного типа *чашкоподобно уложенные углеродные нановолокна* (cup-stacked type carbon-fibers, CSNF) были получены с такими геометрическими параметрами:

$$D = 80 \dots 100; L = 500 \dots 1000, 2500 - 10000, 20000. \quad (3.10)$$

Заметим, что изложенные сведения о значениях геометрических параметров для различных нанообразований представлены в обобщающих публикациях [103 – 105, 116].

3.3. *Описание свойств матрицы (полимерного связующего)*. Отметим, что в практике широко применяются связующие на основе эпоксидных, полиэфирных, фенольных, кремнийорганических и других смол в виде композиций с другими веществами; в связи с этим для связующих указанного типа характерен определенный разброс значений физико-механических постоянных. Значения этих постоянных для типичных связующих приведены в обширной литературе, которая частично указана в списке литературы.

На основе опубликованных сведений ([15] и др.) в первых четырех строках табл. 3.4 показаны пределы изменения значений физико-механических постоянных для типичных связующих, а в трех последних строках – значения физико-механических постоянных для конкретных связующих (композиций), рассмотренных в других публикациях.

Таблица 3.4

Связующее	E , ГПа	$\sigma_{пр}$, МПа	ν	$\epsilon_{разр}$, %	γ , кг/дм ³
Эпоксидное	2,80 – 4,20	28 – 91	0,34 – 0,40	2,6	1,1 – 1,4
Полиэфирное	2,10 – 4,60	42 – 70	0,35 – 0,42	до 6	1,1 – 1,5
Фенолформальдегидное	2,80 – 4,60	42 – 63	0,35	1,5 – 2	1,3 – 1,4
Кремний-органическое	2,90 – 4,00	28 – 35	—	—	1,6 – 1,9
Эпоксиднофенолбутиральная композиция	3,50	41,0	0,40	2,5	—
Эпоксиданилинофурфурольная композиция	5,10	120	0,40	2,5 – 3	—
Эпоксидно-малеиновая композиция	3,15	75	0,38	2,2 – 2,5	—

Из данных таблицы следует, что при проведении «оценочных» расчетов, которые характерны, к примеру, для механики разрушения при приближенном определении

прочностных характеристик, можно приближенно применять «среднее» связующее с такими значениями модуля Юнга и коэффициента Пуассона: $E \approx 3,5$ ГПа, $\nu = 0,4$. Эти значения физико-механических постоянных для «среднего» связующего используются при вычислении теоретического предела прочности нанокомпозитов при сжатии.

Отметим, что для создания ряда композитов используется связующее в виде эпоксидной смолы ЭПОН-828 с такими свойствами: плотность $\rho = 1,21 \cdot 10^3$ кг/м³, модуль Юнга $E = 2,68$ ГПа, модуль сдвига $\mu = 0,96$ ГПа, коэффициент Пуассона $\nu = 0,40$ [121]. Эпоксидной молекулой называют молекулу, содержащую эпоксидную группу. Смола ЭПОН-828 является высокомолекулярной смолой, состоящей из диглицидилового эфира бисфенола А – ДГЭБА (содержащего упомянутую группу) с небольшой добавкой высокомолекулярного полимера [121].

Кроме полимерных связующих, в случае высокопрочных и высокомодульных наполнителей применяется также металлическое связующее (металлическая матрица). Для такой матрицы характерна ее работа при упруго-пластической стадии деформирования; в результате этой работы обеспечивается более равномерная передача нагрузки от матрицы на высокопрочный и высокомодульный наполнитель.

Как металлическая матрица, работающая при упруго-пластической стадии деформирования, наибольшее распространение получил *алюминий*; для описания деформирования алюминия наибольшее распространение получила модель упруго-пластического несжимаемого тела при степенной зависимости между интенсивностью напряжений и деформаций в виде [15]

$$\sigma_u = A \varepsilon_u^k \quad (k = \text{const}). \quad (3.11)$$

Постоянные A и k в (3.11) определяют закономерность деформирования и имеют существенный разброс вследствие влияния технологических процессов обработки и степени чистоты алюминия. В различных литературных источниках для величин A и k приведены разные значения, которые приближенно можно представить в следующем виде: $A \approx 100$ МПа; $k \approx 0,08 \dots 0,40$. Обычно при вычислениях выбирают значения A и k , соответствующие алюминию, который используется для рассматриваемого материала; в связи с этим параллельно с описанием композитного материала с металлической матрицей приводят определение величин A и k для применяемого алюминия с учетом технологических процессов, используемых при создании композитного материала.

3.4. О явлениях на границе раздела в нанокомпозитах. Для анализа этих явлений удобно ввести понятие *геометрической поверхности раздела* нанообразования и полимерной матрицы. Под геометрической поверхностью раздела будем понимать поверхность, размеры и форма которой определяются при описании нанообразования в континуальном приближении.

При объединении нанообразований и полимерной матрицы в нанокомпозит на поверхностях раздела происходят явления с вовлечением более глубоких механизмов, чем это имеет место, например, в случае микрокомпозитов.

Дело в том, что в общем случае нанообразования состоят из системы криволинейных слоев, каждый из слоев состоит из системы атомов, взаимодействие между которыми определяется силами межатомного взаимодействия. В связи с этим, при объединении нанообразований и матрицы в нанокомпозит, очевидно, должно проявляться взаимодействие атомов «крайнего» слоя атомов в нанообразованиях с ближайшими атомами полимерной матрицы за счет сил межатомного взаимодействия. Таким образом, возникает определенный промежуточный слой из материалов нанообразований и полимерной матрицы, внутри которого наблюдается взаимодействие атомов нанообразований и матрицы.

Для примера на рис. 3.15 показана схематически молекулярная структура нанокомпозита *кристаллический полиэтилен – углеродная нанотрубка* (рисунок соответствует указанной в [106] публикации и модифицирован здесь для иллюстрации существования обсуждаемого промежуточного слоя). На рисунке слева представлено поперечное сечение нанокомпозита.

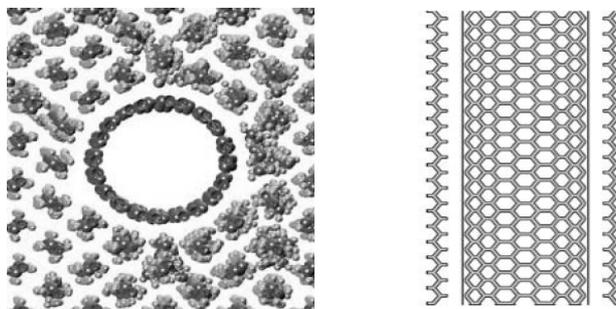


Рис. 3.15

Следует отметить, что исследование указанного выше явления и определение закономерностей, которые его характеризуют, представляется сложной и актуальной физико-химической проблемой. Решение этой проблемы может быть осуществлено только представителями соответствующих научных направлений.

В рамках механики нанокомпозитов, для описания явлений в промежуточном слое в случаях моделирования нанокомпозитов, подобных рассмотренному выше, целесообразно воспользоваться традиционными подходами механики, развитыми ранее при рассмотрении родственных проблем.

Традиция в механике при анализе явлений, происходящих в промежуточных тонких слоях или на поверхностях тонких тел, состоит в *моделировании указанных явлений некоторыми граничными условиями.*

При этом *граничные условия «переносятся»* или *«сносятся»* на некоторую, в определенном смысле близкую, но более простую поверхность. Рассмотрим несколько примеров.

Пример 1. В классической теории обтекания крыла граничные условия на поверхности крыла *«сносятся»* на хорду крыла.

Пример 2. В классической теории контактного взаимодействия упругих тел в случае, когда подошва штампа имеет небольшие отклонения от плоской формы, граничные условия контактного взаимодействия *«сносятся»* на плоскую границу.

Пример 3. В проблеме динамического взаимодействия жидкости и упругих (в том числе и тонкостенных) тел граничные условия на колеблющейся границе раздела *«сносятся»* на неподвижную границу раздела.

Учитывая отмеченные выше традиционные в механике подходы и практику моделирования нанообразований и матрицы континуальными средами, можно при создании основ механики нанокомпозитов предложить следующий подход, соответствующий принятой в механике точности:

целесообразно явления, происходящие в тонком промежуточном слое (нанообразование + полимерная матрица), моделировать определенными граничными условиями сопряжения двух сред и сносить (или переносить) указанные условия на геометрическую поверхность раздела нанообразований и матрицы.

Установление конкретной структуры граничных условий, отражающих явления в промежуточном слое, все еще является проблематичным вопросом, так как физики и химии еще не построили достаточно обоснованную теорию указанных явлений.

В связи с проблематичностью установления конкретной структуры граничных условий на геометрической границе раздела приобретает особую актуальность разработка двусторонних оценок для этих условий, позволяющих также оценить и значения соответствующих величин.

С точки зрения механики, наиболее «жесткому» или совершенному соединению двух сред (в данном случае, соединению нанообразование – матрица) в континуальном описании соответствуют условия полного контакта (непрерывность векторов напряжений и перемещений) на границе раздела сред; наиболее «податливому» или несовершенному соединению двух сред соответствуют условия «скользящего» контакта.

Таким образом, *проведение исследований нанокомпозитов при двух указанных выше типах граничных условий на геометрической поверхности раздела дают возможность получить двухсторонние оценки для рассматриваемых величин*

при проявлении самых различных физико-химических механизмов в промежуточном слое с учетом сил межатомного взаимодействия.

Следует подчеркнуть, что с применением указанных выше двух типов граничных условий были получены результаты в механике разрушения микрокомпозитов при сжатии, когда начало процесса разрушения определяется явлением потери устойчивости во внутренней структуре микрокомпозита.

Также необходимо отметить, что и в механике микрокомпозитов существуют многочисленные проблемы, связанные с необходимостью обеспечения соответствующей адгезионной прочности на поверхностях раздела. Эти проблемы определяются различными механизмами в промежуточном слое. Однако эти механизмы в микрокомпозитах не связаны с проявлением сил межатомного взаимодействия в отличие от нанокомпозитов, в которых это проявление может быть существенным.

4. Общий подход к построению механики нанокомпозитов.

4.1. Основные проблемы, возникающие при построении механики нанокомпозитов. Как следует из предложенного обсуждения, привлечение механики к исследованию наноматериалов является необходимым этапом в развитии нанотехнологий и наноматериалов и имеет целью обеспечить анализ наноматериалов на континуальном уровне и далее переход от анализа наноматериалов к анализу элементов конструкций из наноматериалов. Предыдущий опыт развития механики дает основания считать, что на номатериалы как конструкционные материалы в большинстве случаев имеют перспективу применения лишь в качестве нанокомпозитов.

В связи с этим дальше, следуя в основном статье [106], рассмотрим основные проблемы, которые возникают при формировании механики нанокомпозитов. В качестве матрицы таких материалов будут рассматриваться полимерные материалы, что является общепринятым в большинстве публикаций по нанокомпозитам.

При построении основ механики нанокомпозитов возникает ряд проблем, которые могут быть сгруппированы в **четыре основные проблемы** [106]:

- проблема 1. Описание свойств нанообразований, применяемых в качестве наполнителя;
- проблема 2. Описание свойств матрицы (полимерного связующего);
- проблема 3. Описание явлений на поверхностях раздела нанообразований и матрицы;
- проблема 4. Определение усредненных свойств нанокомпозита, позволяющих осуществить переход к механике элементов конструкций.

Под терминами *описание* и *определение* подразумевается построение механических моделей, позволяющих описать и определить соответствующие явления и свойства. Необходимо отметить, что проблемы 1 – 4 уже частично обсуждались ранее. Ниже они будут рассмотрены в весьма краткой форме.

4.2. *Определение усредненных свойств нанокompозитов, позволяющих осуществить переход к механике элементов конструкций.* Изложенные выше соображения о моделировании нанонаполнителей, матрицы и условий на границе раздела сред в рамках механики нанокompозитов с полимерной матрицей создают теоретические предпосылки для исследования основных проблем, возникающих в механике нанокompозитов: статических и динамических проблем, проблем устойчивости и разрушения. При проведении таких исследований можно использовать постановки задач и методы решения по аналогии с соответствующими подходами, разработанными в рамках механики микрокомпозитов (см., например, многотомные монографии [20, 25, 26, 73, 74]).

В упомянутых исследованиях традиционно можно применять модель кусочно-однородной среды и модель однородной среды с усредненными свойствами.

При проведении же исследований в рамках механики элементов конструкций из нанокompозитов, по-видимому, наиболее перспективным, а может и единственно возможным, является подход, когда нанокompозит (кусочно-однородный материал) заменяется однородным материалом с усредненными свойствами.

Таким образом, в задачах механики элементов конструкций из нанокompозитов целесообразно сначала применить *принцип гомогенизации* и затем уже рассматривать нанокompозит как однородный материал с усредненными свойствами.

Применительно к определению усредненных свойств нанокompозитов, вероятно, можно выделить **два подхода**:

первый подход – определение усредненных постоянных в рамках модели анизотропного упругого однородного тела (структурной модели первого порядка);

второй подход – определение усредненных значений параметров в рамках структурных моделей второго порядка.

Применительно к нанокompозитам, при определении усредненных постоянных в рамках модели анизотропного упругого однородного тела можно применять постановки задач и методы исследования, которые разработаны для зернистых, волокнистых и слоистых микрокомпозитов детерминированной и стохастической структур. Постановки задач такого типа и методы их исследования изложены в многочисленных публикациях (например, в соответствующих томах многотомного издания [26]).

Необходимо отметить, что в этом случае величины усредненных постоянных являются асимптотически точными и следуют из строгих результатов, полученных в рамках трехмерной теории при определенных условиях.

Применительно к теории распространения волн эти условия соответствуют ситуации, когда отношение геометрического параметра, характеризующего внутреннюю структуру нанокompозита, к длине волны стремится к нулю, т.е. как-бы соответствует длинноволновому приближению. Аналогичные условия применяются и в других проблемах статике, динамики, устойчивости и разрушения нанокompозитов.

4.3. *Краткая формулировка основного подхода.* Перспективные нанокompозиты можно определить как создаваемые в настоящее и будущее время материалы, которые могут применяться в элементах конструкций с учетом особенностей нагружения и оптимального соответствия работы элементов при этом нагружении. Такая оптимальность осуществляется путем создания анизотропии деформационных и прочностных свойств элементов конструкций. Возможность создания необходимой анизотропии является одной из наиболее характерных особенностей композитов наряду с высокой прочностью и высокомодульностью.

Указанные особые свойства можно сформировать в нанокompозитах лишь при выстраивании в направлениях преимущественного армирования согласованных с силовыми потоками достаточно удлиненных и прямолинейных нанообразований (CNT, нановеревки, нановолокна и т.д.) в качестве армирующих элементов, которые должны быть высокомодульными.

Подобно случаям макро- и микрокомпозитов, прогнозирование поведения нанокомпозитов при механических воздействиях может быть реализовано преимущественно за счет теоретических исследований. В связи с этим значение таких исследований трудно переоценить; особенно для создаваемых в будущем нанокомпозитов, учитывая и стратегию технологических разработок.

Следует заметить, что в настоящее время подавляющее число публикаций по нанокомпозитам посвящено анализу нанокомпозитов при дисперсном распределении в матрице сравнительно коротких нанообразований в качестве наполнителя для случаев отсутствия четко выраженных направлений преимущественного армирования. Эти дисперсные нанокомпозиты можно классифицировать как тип упрочненной матрицы, что часто находит отражение и в терминологии соответствующих публикаций. Однако разработки такого типа не могут определять развитие перспективных нанокомпозитов, в которых армирование согласовано с нагружением.

Приведенные выше соображения свидетельствуют о том, что при построении основ механики нанокомпозитов с полимерной матрицей вполне обоснованным является **основной подход**, под которым авторы понимают **совокупность концепций, моделей и постановок задач, развитие методов исследований и получение основных результатов, адекватных рассматриваемым явлениям в перспективных нанокомпозитных материалах при механических воздействиях.**

Сформулированный основной подход состоит из следующих **четырёх частей**.

Часть I. Моделирование нанообразований линейным упругим изотропным однородным телом с усредненными значениями упругих постоянных, полученными с привлечением концепции *континуализации* из результатов, учитывающих действие сил межатомного взаимодействия.

Часть II. Моделирование полимерной матрицы (связующего) линейным изотропным однородным упругим или вязкоупругим телом. Аналогичное моделирование традиционно применялось и при построении основ механики микрокомпозитов. При умеренных температурах или при сравнительно кратковременном нагружении применительно к нанокомпозитам можно моделировать полимерную матрицу линейным изотропным упругим телом.

Часть III. Моделирование взаимодействия нанообразований и полимерной матрицы (в тонком промежуточном слое с учетом сил межатомного взаимодействия) определенными граничными условиями с переносом этих условий на *геометрическую* поверхность раздела. Применение граничных условий полного контакта (непрерывность векторов напряжений и перемещений) и граничных условий скользящего контакта для двусторонних оценок исследуемых величин.

Часть IV. Определение усредненных значений упругих постоянных для нанокомпозитов с привлечением различных методов *гомогенизации*, что обеспечивает переход к механике элементов конструкций из нанокомпозитов.

Таким образом, в рамках основного подхода проводятся исследования различных проблем статике, динамике, устойчивости и разрушения механики нанокомпозитных материалов и механики элементов конструкций из этих материалов.

Как уже отмечалось ранее, при анализе проблем механики нанокомпозитов применимы модель кусочно-однородной среды (после реализации концепции *континуализации* для наноапполнителей) и модель однородного анизотропного тела с усредненными значениями упругих постоянных (после реализации концепции *континуализации* для наноапполнителей и последующей реализации концепции *гомогенизации* для полученной кусочно-однородной среды). Отмеченные две модели обсуждались подробно выше.

При анализе проблем механики элементов конструкций из нанокompозитов предпочтительным является применение модели однородного анизотропного тела с усредненными значениями упругих постоянных.

Безусловно, для механики элементов конструкций из нанокompозитов также актуальным является анализ многослойных конструкций (например, построение моделей и теорий многослойных стержней, пластин и оболочек). Все же, даже в этом случае для каждого отдельного элемента конструкции (для каждого слоя) применяется модель однородного анизотропного тела с усредненными значениями упругих постоянных.

В рамках основного подхода получен ряд новых результатов, которые изложены в [99, 103 – 106, 116] и в ряде других публикаций.

Необходимо отметить, что в настоящее время уже опубликован ряд обзоров по различным проблемам механики нанокompозитов [66, 105 – 107, 133, 144, 172, 175, 181, 183]. Из этих обзоров целесообразно отметить статью [175].

Также отметим, что существенным моментом в общем подходе построения основ механики нанокompозитов является второе положение части III, в соответствии с которым целесообразно получить двухсторонние оценки для исследуемых величин, основанные на исследованиях при граничных условиях полного контакта (непрерывность векторов напряжений и перемещений) и скользящего контакта (непрерывность нормальных составляющих векторов напряжений и перемещений) на *геометрической* границе раздела наполнителя и матрицы.

Полученные указанным выше способом двухсторонние оценки дают возможность определить значения исследуемых величин для разнообразных физико-химических процессов, происходящих в промежуточном слое между наполнителем и полимерной матрицей.

4.4. О классификации нанокompозитов. Во введении приведены примеры нанообразований, большинство из которых могут выступать в качестве наполнителей (армирующих элементов) при создании нанокompозитов на основе различных связующих (матриц).

Наличие к настоящему моменту большого числа принципиально отличающихся по форме и структуре нанообразований приводит к необходимости рассматривать в классификации нанокompозитов как уже созданные нанокompозиты, так и различные общепринятые модели (типы) композитов, которые можно применять при изучении нанокompозитов. Целесообразно также отметить, что международная информационная база по нанокompозитам еще только активно формируется; в связи с этим в настоящее время еще не представляется возможным предложить на ее основе всеохватывающую или исчерпывающую классификацию нанокompозитов.

Ниже приведем вариант первичной классификации нанокompозитов.

I-я группа. Нанокompозиты в виде матрицы (связующего), дисперсно упрочненной отдельными частицами нанообразований при условии весьма малой концентрации нанообразований.

Такие нанокompозиты получили широкое применение в исследованиях различных научных центров; при этом в качестве матрицы рассматриваются различные полимерные композиции.

На рис. 4.1 и рис. 4.2 показаны в качестве примера конкретные нанокompозиты первой группы, в которых матрица одна и та же – резина EPDM (ethylene propylene diene monomer). Нанообразования – разные: на рис. 4.1 слева показан нанокompозит с дисперсной фазой из черного графита *CB29* и справа – из окиси кремния *Silica210*; на рис. 4.2 слева показан нанокompозит с дисперсной фазой из окиси кремния *Silica150* и справа – из наночастичек кальция *Cal20* [151].

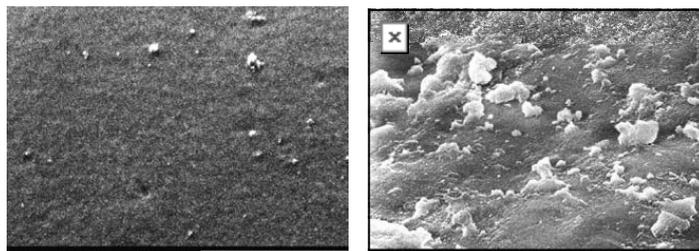


Рис.4.1

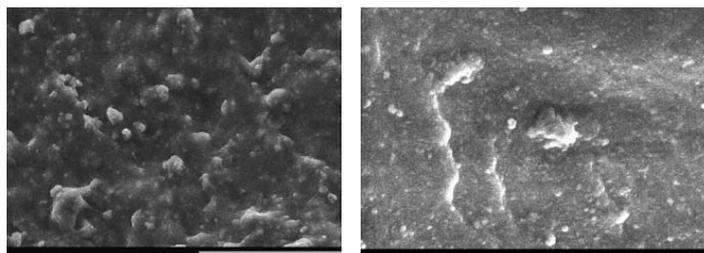


Рис.4.2

Наноккомпозиты первой группы могут выступать в качестве матрицы при создании новых наноккомпозитов; в этом случае на последующем этапе создания наноккомпозита дополнительно вводятся и другие нанообразования в виде нано-наполнителей. На рис. 4.3 показан пример такого гибридного наноккомпозита, матрица которого составлена из дисперсной смеси смолы поликарбоната и графитовых нановолокон; армирующими волокнами являются графитовые микро-волокна [151]. При исследовании наноккомпозитов первой группы вначале проводится процедура континуализации для каждой отдельной наночастички; в результате наночастичка описывается моделью однородного материала с усредненными свойствами и в целом к наноккомпозиту применяется модель кусочно-однородного материала (*вторая модель*). На последующем этапе проводится процедура гомогенизации, в результате чего приходят к модели однородного материала с усредненными свойствами (*третья модель*).

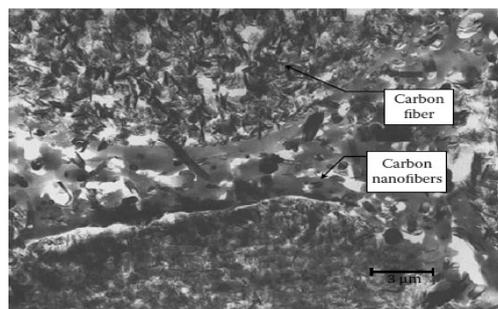


Рис. 4.3

Если при изготовлении наноккомпозитов этой группы технология не создает направления преимущественного армирования, то такие наноккомпозиты могут моделироваться однородным изотропным материалом. В этом случае модуль Юнга и коэффициент Пуассона материала определяются значениями этих же постоянных для матрицы и наночастичек, а также объемной концентрацией наночастичек.

Если при изготовлении наноккомпозитов этой группы технология создает направления преимущественного армирования, то такие наноккомпозиты могут моделироваться однородным трансверсально-изотропным материалом в случае присутствия одного направления или однородным ортотропным материалом в случае присутствия трех направлений. На рис. 4.4 показан пример создания одного преимущественного направления армирования с помощью магнитного поля [121]. Наноккомпозит изготовлен из полимерной матрицы (материал – полиметилсилоксан или силиконовое масло) со слабым армированием графитовых волокон VGCF (vapor-grown carbon fibers) диаметром 150 нм. Слева показана внутренняя структура до приложения магнитного поля и справа – после приложения.

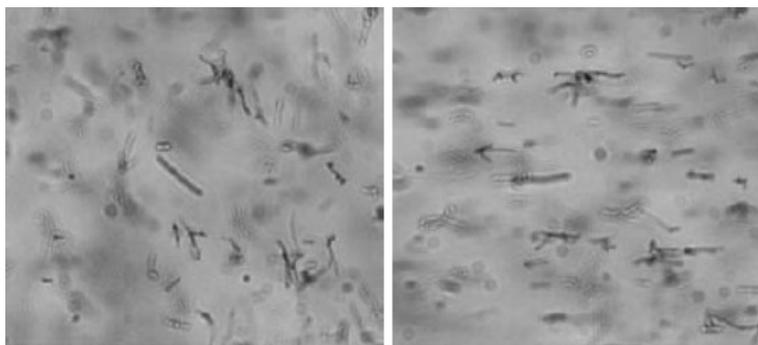


Рис.4.4

II-я группа. Слоистые наноккомпозиты.

Под слоистыми наноккомпозитами понимаются наноккомпозитные материалы, в которых геометрические размеры армирующих элементов (наполнителя) в одном направлении значительно (на несколько порядков) меньше, чем их размеры в двух других взаимно перпендикулярных направлениях.

В случае слоистых наноккомпозитов термины *армирующий элемент (наполнитель)* и *матрица (связующее)* имеют достаточно условный характер, так как наполнитель и матрица с точки зрения геометрической формы представляют собой слои из различных материалов. Поэтому в слоистых наноккомпозитах под армирующими элементами обычно понимают слои из более жесткого материала; следовательно, под матрицей в этом случае понимают слои из менее жесткого материала.

При формировании слоистых наноккомпозитов из отдельных монослоев, в качестве материала которых могут выступать наноккомпозиты первой группы, матрицей можно называть монослои из этих же материалов при меньшей концентрации частиц.

Заметим, что даже при одной и той же матрице, а также при одних и тех же частицах нанокобразований (наполнителя) монослои наноккомпозитов первой группы могут представлять собой материалы с различными жесткостными параметрами за счет различной концентрации частиц нанокобразований.

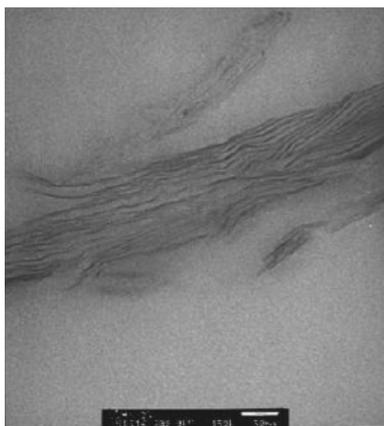


Рис. 4.5

При исследовании слоистых наноккомпозитов необходимо учитывать, что материалы монослоев обычно уже моделируются однородными материалами с усредненными свойствами. Таким образом, слоистые наноккомпозиты моделируются кусочно-однородными материалами (*вторая модель*). Поэтому при анализе второй группы наноккомпозитов переходят от *второй* модели к *третьей* посредством применения процедуры гомогенизации.

На рис. 4.5 показан наноккомпозит (черточка внизу соответствует 50 нм) с матрицей из AESO (acrylated epoxidized soybean oil), слабо армированной (с объемным содержанием 0,05) пакетами из отдельных полос глины, разделенных молекулами триглицерида [151].

На рис. 4.6 показан слоистый наноккомпозит, состоящий из очень четко выраженных нанослоев меди и ниобия высотой 75 нм.

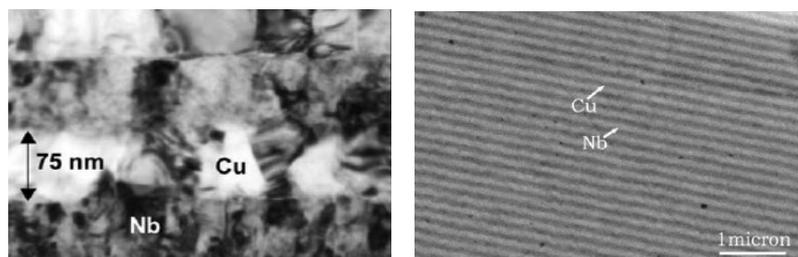


Рис.4.6

III-я группа. Волокнистые нанокомпозиты.

Под волокнистыми нанокомпозитами понимаются нанокомпозитные материалы, в которых геометрические размеры армирующих элементов (наполнителя) в двух взаимно перпендикулярных направлениях имеют одинаковый порядок и эти размеры значительно (на несколько порядков) меньше, чем их размер в третьем взаимно перпендикулярном направлении.

Для волокнистых нанокомпозитов, в отличие от слоистых нанокомпозитов (II группа), четко идентифицируются понятия армирующие элементы (наполнитель) и связующее (матрица), так как в качестве армирующих элементов выступают различные волокноподобные нанобразования, включая достаточно длинные и сравнительно короткие нанобразования; в качестве связующего (матрицы) могут выступать различные материалы – от полимерных до керамических или металлических материалов, в том числе и нанокомпозиты I-й группы.

При применении углеродных или других нанотрубок в качестве наполнителя в волокнистых нанокомпозитах при их исследовании вначале к ним применяется процедура континуализации, которая реализуется методами физики твердого тела. При таком подходе нанотрубки моделируются однородным материалом с усредненными постоянными. Матрица также моделируется однородным материалом с усредненными постоянными (*вторая модель*), включая вариант, когда сама матрица также является нанокомпозитным материалом I-й группы.

В рамках применения указанной цепочки моделей нанокомпозиты III-й группы моделируются кусочно-однородным материалом (*вторая модель*). В конце цепочки анализ волокнистых нанокомпозитов приводится с помощью процедуры гомогенизации к анализу однородных материалов с усредненными постоянными (*третья модель*).

Следует отметить, что в волокнистых нанокомпозитах в качестве армирующих элементов (наполнителя) используются разнообразные волокноподобные нанобразования (наноансамбли, нановеревки, наножгуты, нанопроволоки, нановолокна и т.п.), созданные из однослойных и многослойных нанотрубок. Количество разнообразных волокноподобных нанобразований, которые используются в качестве армирующих элементов, столь велико, что в настоящее время, по-видимому, классифицировать их по структуре и форме представляется невозможным.

Ниже на рис. 4.7 покажем только один пример гибридного нанокомпозита поликарбонатная смола – графитовые волокна, который можно отнести к третьей группе. Слева показано сечение, перпендикулярное направлению волокон, справа сечение, параллельное направлению волокон. Предлагаемый в статье общий подход построения механики нанокомпозитов позволяет предложить вариант программы исследования волокнистых нанокомпозитов. Согласно этой программе, на первом этапе применяется процедура континуализации для каждой нанотрубки, входящей в волокноподобное нанобразование. Эта процедура реализуется методами физики твердого тела. В результате на первом этапе каждая нанотрубка моделируется однородным материалом с усредненными постоянными.

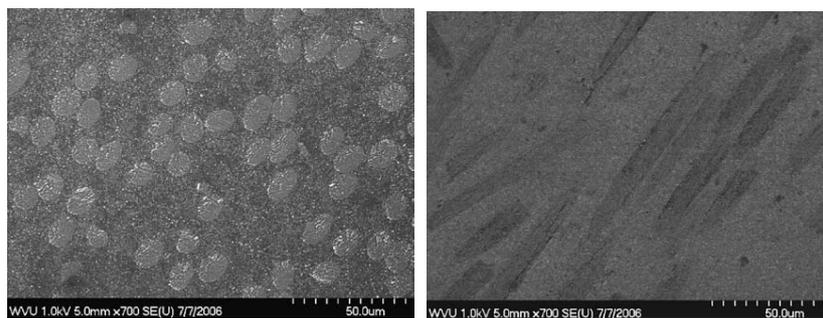


Рис. 4.7

На последующем этапе с учетом указанного выше моделирования для каждой нанотрубки и соответствующего моделирования части матрицы, входящей в волокноподобное nanoобразование, проводится процедура гомогенизации и в результате это nanoобразование моделируется однородным материалом с усредненными постоянными.

При указанной последовательности подходов волокнистый наноккомпозит (волоконноподобные nanoобразования + матрица) представляет собой кусочно-однородный материал; в связи с этим на заключительном этапе исследования применяется процедура гомогенизации и наноккомпозит моделируется однородным материалом с усредненными постоянными (*третья модель*).

Для примера на рис. 4.8 приведен вид внешней поверхности волокнистого наноккомпозита, плотноармированного (0,6 матрица и 0,4 волокна) и изготовленного из полимерной матрицы PET (polyethylene terephthalate) и полимерных нановолокон LCP (liquid crystalline polymer).

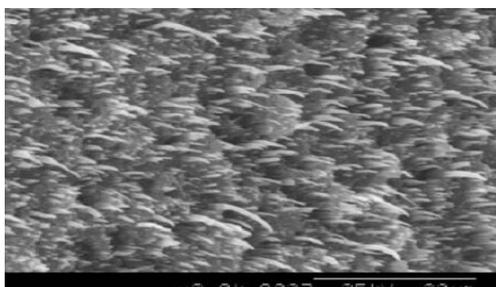


Рис. 4.8

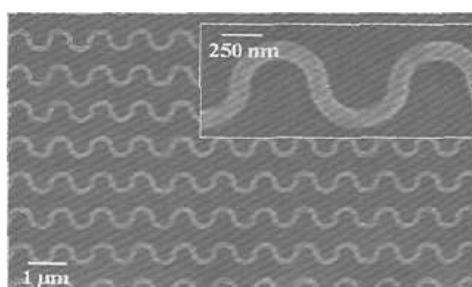


Рис. 4.9

На рис. 4.9 показан иной пример – композитный материал с четко выраженными отдельными волокнами сложной геометрической формы, моделирование которого представляется сложной проблемой [197].

В заключение к весьма краткой информации, относящейся к волокнистым наноккомпозитам, следует добавить, что в ряде случаев волокноподобные nanoобразования имеют столь сложную пространственную геометрическую форму, что ее теоретический анализ, по-видимому, не представляется возможным или целесообразным.

IV-я группа. Зернистые наноккомпозиты.

Под зернистыми наноккомпозитами понимаются наноккомпозитные материалы, в которых геометрические размеры армирующих элементов (наполнителя) в трех взаимно перпендикулярных направлениях являются величинами одного порядка.

К зернистым наноккомпозитам относятся, в частности, и наноккомпозиты I-й группы, если в них наночастицы имеют геометрические размеры (в трех взаимно перпендикулярных направлениях) одного порядка и зерноподобную форму (форму гранул, в связи с чем такие композиты иногда называют гранулированными). В зернистых нано-

композитах армирующие элементы могут представлять собой отдельные нанотрубки или состоять из зерноподобных нанообразований.

Для примера на рис. 4.10 показан зернистый нанокомпозит, изготовленный из смолы EPDM (ethylene propylene diene monomer), армированной зернами из окиси кремния Silica185 [131].

При исследовании зернистых нанокомпозитов применяется последовательность (цепочка) подходов, получаемых процедурами континуализации и гомогенизации по аналогии с соответствующими ситуациями в волокнистых нанокомпозитах. Следует принять во внимание, что приведенные применительно к волокнистым нанокомпозитам более подробные сведения в равной мере относятся и к зернистым нанокомпозитам.

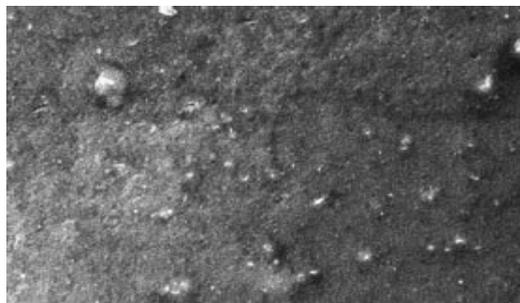


Рис. 4.10

V-я группа. Сложные нанокомпозиты.

В ряде случаев нанокомпозиты имеют столь сложную внутреннюю структуру (сложной может быть как сама структура, так и форма армирующих элементов), что ее затруднительно осмыслить и описать с привлечением традиционных теоретических подходов. Такие нанокомпозиты отнесем к V-й группе.

При исследовании сложных нанокомпозитов с точки зрения механики представляется целесообразным применять экспериментальные методы. Однако существуют случаи, когда возможен определенный теоретический анализ [106 – 108, 114 – 116].

Необходимо отметить, что выше изложен один из возможных вариантов классификации нанокомпозитов; безусловно, приведенная классификация не является исчерпывающей и всеобъемлющей. Все же для более четкой ориентации в результатах, содержащихся в многочисленных публикациях по механике нанокомпозитов (обилие конкретных результатов уже отмечалось ранее), представляется целесообразным применять и предложенную выше классификацию.

В заключение отметим, что в сентябре 2010 г. опубликовано семитомное издание энциклопедического характера *Handbook of Nanophysics*. Ed. Klaus D. Sattler (с выходными данными издательства – Boca Raton – London – New York: CRC Press, Taylor and Francis Group, 2011) [198]. По-видимому, это издание можно считать наиболее объемным в области наночастиц и наноматериалов и их применения в различных современных отраслях естествознания, что отражено в названиях томов, приведенных в списке литературы к настоящей статье. Издание подготовлено большой группой ведущих специалистов из различных стран всего мира. Результаты, входящие в каждый том, представлены в виде отдельных глав с указанием авторов каждой главы; главы же объединены в тематические части. Первый том имеет название *HANDBOOK OF NANOPHY-SICS. Principles and Methods* и состоит из 40 глав, которые объединены в 6 частей. Наномеханике посвящена одна часть «Part IV. Nanomechanics», в которую включены главы 22 – 24. Глава 24 (Guz I.A., Rushchitsky J.J., Guz A.N. Mechanical Models for Nanomaterials, P. 24 – 1 – 24 – 12) подготовлена на основе результатов, изложенных более полно в монографии авторов [196].

Приведенная далее библиография соответствует, как и большая часть статьи, монографии: Гузь А.Н., Рушчицкий Я.Я., Гузь И.А. Введение в механику нанокомпозитов. – Киев: Ин-т механики им. С.П.Тимошенко, 2010. – 398 с., однако представляет собой несколько расширенный по сравнению с монографией список публикаций.

РЕЗЮМЕ. Викладено загальний погляд на механіку нанокомпозитних матеріалів, що дозволяє сформулювати систему підходів і методів аналізу в наномеханіці композитних матеріалів. Обговорюється місце механіки в дослідженні матеріалів і структурні рівні, які поділяють механіку на макромеханіку, мезомеханіку, мікромеханіку і наномеханіку. Запропоновано короткий історичний нарис розвитку технології створення наноматеріалів, дано приклади різних нанотехнологій і наноматеріалів, описано типові наноматеріали і їх властивості. Окремо розглянуто матриці та армуючі елементи нанокомпозитних матеріалів і їх фізичні властивості, пропонується варіант класифікації нанокомпозитних матеріалів. Особливу увагу приділено моделюванню в структурній наномеханіці композитів, принципам континуалізації і гомогенізації, краєвим і приповерхневим ефектам, границям застосування континуального підходу, двостороннім оцінкам. Обговорено дві основні моделі в рамках основного підходу як сукупності концепцій, моделей і постановок задач, розвиток методів дослідження і отримання основних результатів, адекватних механічним явищам в нанокомпозитах. Представлений матеріал відповідає, в основному, книзі: Гузь А.Н., Рушицкий Я.Я., Гузь И.А. Введение в механику нанокомпозитов. – Киев: Ин-т механики им. С.П.Тимошенко, 2010. – 398 с.

1. Акбаров С.Д., Гузь А.Н. О напряженном состоянии в композитном материале с искривленными слоями с малой концентрацией наполнителя // Мех. композитов материалов. – 1984. – № 6. – С. 990 – 996.
2. Акбаров С.Д., Гузь А.Н. К механике композитных материалов с искривленными структурами // ДАН СССР. – 1985. – **281**, № 1. – С. 37 – 41
3. Акбаров С.Д., Гузь А.Н. Об одном эффекте в механике разрушения композитных материалов // ДАН СССР. – 1986. – **290**, № 1. – С. 23 – 26.
4. Ван Фо Фы Г.А. Теория армированных материалов. – К.: Наук. думка, 1971. – 232 с.
5. Ванин Г.А. Микромеханика композиционных материалов. – К.: Наук. думка, 1985. – 304 с.
6. Гузь А.Н. Об определении теоретического предела прочности на сжатие армированных материалов // Докл. АН УССР, сер. А. – 1969. – № 3. – С. 236 – 238.
7. Гузь А.Н. Устойчивость трехмерных деформируемых тел. – К.: Наук. думка, 1971. – 275 с.
8. Гузь А.Н. Устойчивость упругих тел при конечных деформациях. – К.: Наук. думка, 1973. – 272 с.
9. Гузь А.Н. О континуальной теории композитных материалов с мелкомасштабными искривлениями в структуре // ДАН СССР. – 1983. – **268**, № 2. – С. 307 – 313.
10. Гузь А.Н. О теории колебаний композитных материалов с мелкомасштабными искривлениями в структуре // ДАН СССР. – 1983. – **270**, № 4. – С. 824 – 827.
11. Гузь А.Н. О критерии хрупкого разрушения при сжатии материалов с дефектами // Докл. АН СССР. – 1985. – **285**, № 4. – С. 828 – 831.
12. Гузь А.Н. Основы трехмерной теории устойчивости деформируемых тел. – К.: Вища шк., 1986. – 512 с.
13. Гузь А.Н. Механика разрушения композитных материалов при сжатии. – К.: Наук. думка, 1990. – 630 с.
14. Гузь А.Н. Упругие волны в телах с начальными (остаточными) напряжениями. – К.: «А.С.К.» 2004. – 672 с.
15. Гузь А.Н. Основы механики разрушения композитов при сжатии: В 2 томах. – К.: Литера, 2008.
 - Т.1. Разрушение в структуре материала. – 592 с.
 - Т.2. Родственные механизмы разрушения. – 736 с.
16. Гузь А.Н., Головач В.Т. Дифракция упругих волн в многосвязных телах. – К.: Наук. думка, 1972. – 256 с.
17. Гузь А.Н., Гузь Г.В. К механике композитных материалов с крупномасштабным искривлением наполнителя // Механика композитных материалов. – 1982. – № 4. – С. 634 – 641.
18. Гузь И.А. Устойчивость композита при сжатии вдоль трещины на границе раздела слоев // Докл. АН СССР. – 1992. – **325**, № 3. – С. 455 – 458.
19. Гузь И.А. Устойчивость композита при сжатии вдоль двух макротрещин на границе раздела слоев // Докл. АН СССР. – 1993. – **328**, № 4. – С. 437 – 439.
20. *Композитные материалы*: В 8 томах / (Под общей ред. Л.Браутмана и Л.Крока). (Перевод с англ.). – Москва: Т.1, 2, 5 и 6. – Мир; Т.3, 4, 7 и 8. – Машиностроение. – 1978 – 1979.
 - Т.1. Поверхности раздела в металлических композитах. – 1978. – 438 с.
 - Т.2. Механика композитных материалов. – 1978. – 564 с.
 - Т.3. Применение композитных материалов в технике. – 1979. – 511 с.
 - Т.4. Композитные материалы с металлической матрицей. – 1978. – 508 с.
 - Т.5. Разрушение и усталость. – 1978. – 484 с.
 - Т.6. Поверхности раздела в полимерных композитах. – 1978. – 294 с.
 - Т.7. Анализ и проектирование конструкций. Ч.1. – 1979. – 300 с.
 - Т.8. Анализ и проектирование конструкций. Ч.2. – 1979. – 264 с.
21. *Композиционные материалы волокнистого строения* / Под ред. И.Н.Францевича, Д.М.Карпиноса. – К.: Наук. думка, 1970. – 403 с.

22. Косевич А.М. Теория кристаллической решетки (физическая механика кристаллов). – Харьков: Вища шк., 1988. – 304 с.
23. Кристенсен Р.М. Введение в механику композитов. – М.: Наука, 1982. – 334 с. – (*Christensen R.M. Mechanics of Composite Materials. – New York: John Wiley&Sons, 1979.*)
24. Лэфф Д. (*Leff D.*) Правда о нанотехнологии // ZDNet.ru. – 2002.
25. Механика композитных материалов и элементов конструкций: В 3-х томах (Под общей ред. А.Н.Гузя). – К.: Наук. думка, 1982 – 1983.
 - Т.1. Механика материалов. (Под ред. Л.П.Хорошуна), 1982. – 454 с.
 - Т.2. Механика элементов конструкций. (Под ред. Я.М.Григоренко), 1982. – 605 с.
 - Т.3. Прикладные исследования, 1983. – 345 с.
26. Механика композитов. В 12 томах (Под общей ред. А.Н.Гузя). – К.: Т.1 – 4, Наук. думка; Т.5 – 12, «А.С.К.». – 1993 – 2003.
 - Т.1. Статика материалов. (Под ред. В.Т.Головчана), 1993. – 454 с.
 - Т.2. Динамика и устойчивость материалов. (Под ред. Н.А.Шульги), 1993. – 430 с.
 - Т.3. Статистическая механика и эффективные свойства материалов. (Под ред. Л.П. Хорошуна), 1993. – 390 с.
 - Т.4. Механика материалов с искривленными структурами. (Под ред. А.Н.Гузя и С.Д. Акбарова), 1995. – 320 с.
 - Т.5. Механика разрушения. (Под ред. А.А.Каминского), 1996. – 340 с.
 - Т.6. Технологические напряжения и деформации в материалах. (Под ред. Н.А.Шульги и В.Т.Томашевского), 1997. – 396 с.
 - Т.7. Концентрация напряжений. (Под ред. А.Н.Гузя, А.С.Космодамианского и В.П. Шевченко), 1998. – 388 с.
 - Т.8. Статика элементов конструкций. (Под ред. Я.М.Григоренко), 1999. – 382 с.
 - Т.9. Динамика элементов конструкций. (Под ред. В.Д.Кубенко), 1999. – 384 с.
 - Т.10. Устойчивость элементов конструкций. (Под ред. И.Ю.Бабича), 2001. – 376 с.
 - Т.11. Численные методы. (Под ред. Я.М.Григоренко и Ю.Н.Шевченко), 2002. – 448 с.
 - Т.12. Прикладные исследования. (Под ред. А.Н.Гузя и Л.П.Хорошуна), 2003. – 400 с.
27. Разрушение: В 7-ми т.: Пер. с англ. / Под ред. Г.Либливица. – М.: Мир, Машиностроение, Металлургия, 1973 – 1976. – Т. 1 – 7.
28. Розен Б.У. Механика упрочнения композиций // Волокнистые композиционные материалы. – М.: Мир, 1967. – С. 54 – 96.
29. Руцицкий Я.Я. Элементы теории смеси. – К.: Наук. думка, 1991. – 160 с.
30. Руцицкий Я.Я., Журнал С.І. Хвилі в матеріалах з мікроструктурою. – К.: Ін-т. механіки ім. С.П.Тимошенка, 1998. – 377 с.
31. Слепян Л.И. Механика трещин. – Ленинград: Судостроение, 1990. – 296 с.
32. Суздалев И.П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. – М.: КомКнига, 2006. – 592 с. (Серия "Синергетика: от прошлого к будущему).
33. Стікс Г. Мала велика наука // Світ науки (укр. переклад журналу Scientific American). – 2001. – № 5(11) – С. 16 – 21.
34. Тарнопольский Ю.М., Розе А.В. Особенности расчета деталей из армированных пластиков. – Рига: Зинатне, 1969. – 275 с.
35. Успехи механики: В 6-и томах / Под ред. А.Н.Гузя. Т.1. – К.: Изд-во «А.С.К.», 2005. – 776 с.
36. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов: В 2 томах / Под редакцией В.Е.Панина. Сибирская издательская фирма РАН. – Новосибирск: Наука, 1995.
 - Т.1. Панин В.Е., Егорушкин В.Е., Макаров П.В. и др. – 298 с.
 - Т.2. Панин В.Е., Макаров П.В., Псахье С.Е. и др. – 320 с.
37. Черепанов Г.П. Механика разрушения композиционных материалов. – М.: Наука, 1983. – 298 с.
38. Шульга Н.А. Основы механики слоистых сред периодической структуры. – К.: Наук. думка, 1981. – 200 с.
39. Adler R., Ewing J., Taylor P. Citation Statistics. Report of the Joint Committee on Quantitative Assessment of Research from IMU, ICIAM and IMS. – 2008. – P. 1 – 26.
40. Agbenyega J. Boron Buckyballs. Research News // Materials Today. – 2009. – 12, N 1 – 2. – P. 9.
41. Akbarov S.D., Guz A.N. Method of solving problems in mechanics of composite materials with bent layers // Sov. Appl. Mech. – 1984. – 20, N 4. – P. 299 – 304.
42. Akbarov S.D., Guz A.N. Method of solving problems in mechanics of fiber composites with curved structures // Sov. Appl. Mech. – 1984. – 20, N 9. – P. 777 – 784.

43. Akbarov S.D., Guz A.N. Model of a piecewise-homogeneous body in the mechanics of laminar composites with fine-scale curvatures // *Sov. Appl. Mech.* – 1985. – **21**, N 4. – P. 313 – 318.
44. Akbarov S.D., Guz A.N. Stress state of a fiber composite with curved structures with a low fiber concentration // *Sov. Appl. Mech.* – 1985. – **21**, N 6. – P. 560 – 565.
45. Akbarov S.D., Cilli A., Guz A.N. The theoretical strength limit in compression of viscoelastic layered composite materials // *Composites. Part B.* – 1999. – **30**, N 5. – P. 465 – 472.
46. Akbarov S.D., Guz A.N. *Mechanics of Curved Composites.* – Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2000. – 464 p.
47. Akbarov S.D., Guz A.N. Continuum Approaches in the Mechanics of Curved Composites and Associated Problems for Structural Members // *Int. Appl. Mech.* – 2002. – **38**, N 11. – P. 1285 – 1308.
48. Akbarov S.D., Guz A.N. Mechanics of Curved Composites (Piecewise-Homogeneous Body Model) // *Int. Appl. Mech.* – 2002. – **38**, N 12. – P. 1415 – 1439.
49. Akbarov S.D., Guz A.N. Mechanics of curved composites and some related problems for structural members // *Mechanics of Adv. Mater. and Structures.* – 2004. – **11**, N 6, Part II. – P. 445 – 516.
50. Andreeva D.V., Shchukin D.G. Smart self-repairing protective coatings // *Materials Today.* – 2008. – **11**, N 10. – P. 24 – 30.
51. Attard G.S., Barlett P.N., Coleman N.R.B., Elliott J.M., Owen J.R., Wang J.H. *Science.* – 1997. – **278.** – P. 838 – 840.
52. Attard G.S., Glyde J.C., Goltner C. *Nature.* – 1995. – **378.** – P. 366 – 368.
53. Bedford A., Drumheller G.S., Sutherland H.J. On modeling the dynamics of composite materials. In: S.Nemat-Nasser, *Mechanics Today.* – **3.** – New York: Pergamon Press, 1976. – P. 1 – 54.
54. Bedford A., Drumheller G.S. Theories of immiscible and structured mixtures // *Int. J. Eng. Sci.* – 1983. – **21**, N 8. – P. 863 – 960.
55. Bichoutskaia E., Popov A.M., Lozovik Y.E. Nanotube-based data storage devices // *Materials Today.* – 2008. – **11**, N 6. – P. 38 – 43.
56. *BIMat.com: Biologically Inspired Materials. Advanced Biomolecular and Biomimetic materials.* 2007.
57. Binnig G., Rohrer H. Scanning Tunneling Microscopy - from birth to adolescence // *Review of Modern Physics.* – 1987. – **59.** – P. 615 – 625.
58. Biot M.A. Surface instability in finite anisotropic elasticity under initial stress // *Proc. of Royal Soc.* – 1963. – **273.** – N 1354.
59. Biot M.A. Interfacial instability in finite elasticity under initial stress // *Proc. Roy. Soc.* – 1963. – **273.** – N 1354.
60. Biot M.A. *Mechanics of incremental deformations.* – New York: Wiley, 1965. – 504 p.
61. Biot M.A. Fundamental skin effect in anisotropic solid mechanics // *Int. J. Solids and Struct.* – 1966. – **2.** – P. 645 – 663.
62. Born M., Kun Huang. *Dynamical Theory of Crystall Lattices.* – Oxford: Oxford University Press, 2007. – 432 p. – (Русск. Перевод: Борн М., Хуан Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток. – М.: ИЛ, 1958).
63. Brenner D.W. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films // *Physical Review.* – 1990. – **B42.** – P. 9458 – 9471.
64. Briseno A.L., Mannsfeld S.C.B., Jenekhe S.A., Bao Z., Xia Y. Introducing organic nanowire transistors // *Materials Today.* – 2008. – **11**, N 4. – P. 38 – 47.
65. Buehler M., Ackbarow T. Fracture mechanics of protein materials // *Materials Today.* – 2007. – **10**, N 9. – P. 46 – 58.
66. Buryachenko V.A., Roy A., Lafdi K., Anderson K.L., Chellapilla S. Multiscale mechanics of nanocomposites including interface: Experimental and numerical investigation // *Composites Science and Technology.* – 2005. – **65.** – P. 2435 – 2465.
67. Cassel A.M., Raymakers J.A., Kong J., Dai H. *J. Phys. Chem.* – 1999. – **B103.** – P. 6484 – 6492.
68. Cattani C., Rushchitsky J.J. *Wavelet and Wave Analysis as applied to Materials with Micro or Nanostructures.* – Singapore-London: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2007. – 466 p.
69. Cattani C., Rushchitsky J.J., Sinchilo S.V. Comparative Analysis of the Profile Evolutions of an Elastic Harmonic Wave Caused by the Second and Third Harmonics // *Int. Appl. Mech.* – 2004 – **40**, N 2. – P. 183 – 189.
70. Cattani C., Rushchitsky J.J., Sinchilo S.V. Physical Constants of Certain Type of Nonlinearly Elastic Fibrous Micro- and Nanocomposites in Presence of Heavy and Soft Nonlinearities // *Int. Appl. Mech.* – 2005. – **41**, N 12. – P. 1368 – 1377.
71. Chen Y., Fitzgerald J., Chadderton L.T., Chaffron L. *J. of Metastable and Nanocrystalline Materials.* – 1999. – **2**, N 6. – P. 375 – 380.
72. Cleland A.N. *Foundations of Nanomechanics. From Solid-State Theory to Device Applications.* Series «Advanced Texts in Physics». – Berlin: Springer-Verlag, 2003. – 436 p.

73. *Comprehensive Composite Materials*. In 6 volumes (Editors-in-Chief: A.Kelly, C.Zweben). – Elsevier. – 2006.
- Vol. 1. Fiber reinforcements and general theory of composites. (Ed.: Tsu-Wei Chou), 2006. – 802 p.
 - Vol. 2. Polymer matrix composites. (Eds.: R.Talreja, J.-A.E.Månson), 2006. – 669 p.
 - Vol. 3. Metal matrix composites. (Ed.: T.W.Clyne), 2006. – 669 p.
 - Vol. 4. Carbon / Carbon, Cement and Ceramic Composites. (Ed.: R.Warren), 2006. – 697 p.
 - Vol. 5. Test methods, nondestructive evaluation, and smart materials. (Eds.: L.Carlsson, R.L. Crane, K.Uchino), 2006. – 632p.
 - Vol. 6. Design and applications. (Eds.: W.G.Bader, K.Kedsvard, Y.Sawada), 2006. – 809 p.
74. *Comprehensive Structural Integrity*. In 10 volumes (Int. Advisory Board: Ian Milne, R.O. Ritchie, B.Karihaloo). – Elsevier, 2006.
- Vol. 1. Structural integrity assessment - examples and case studies.(Eds.: Ian Milne, R.O.Ritchie, B.Karihaloo), 2006.
 - Vol. 2. Fundamental theories and mechanisms of failure. (Eds.: B.Karihaloo, W.G.Knauss), 2006.
 - Vol. 3. Numerical and computational methods. (Eds.: R.de Borst, H.A.Mang), 2006.
 - Vol. 4. Cyclic loading and fatigue. (Eds.: R.O. Ritchie, Y.Murakami), 2006.
 - Vol. 5. Creep and high-temperature failure. (Ed.: A.Saxena), 2006.
 - Vol. 6. Environmentally-assisted fracture. (Eds.: J.Petit, Peter Scott), 2006.
 - Vol. 7. Practical failure assessment methods. (Eds.: R.A.Ainsworth, K.-H.Schwalbe), 2006.
 - Vol. 8. Interfacial and nanoscale failure. (Eds.: W.Gerberich, Wei Yang), 2006.
 - Vol. 9. Bioengineering. (Eds.: Yin-Wing Mai, Swee-Hin Teoh), 2006.
 - Vol. 10. Indexes.
75. *Cornwell C.F., Wille L.T.* Elastic properties of single-walled carbon nanotubes in compression // *Solid State Commun.* – 1997. – **101**. – P. 555 – 558.
76. *Curl R.F.* Dawn of the fullerenes: conjecture and experiment (Nobel lecture) // *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* – 1997. – **36(15)**. – P. 1566 – 1577.
77. *Daniel I.M., Ishai O.* *Engineering Mechanics of Composite Materials*, 2nd edition. – New York – Oxford: Oxford University Press, 2006. – 411 p.
78. *Dedecker P.* Building a better gecko. *Biomaterials. Research news // Materials Today.* – 2008. – **11**, N 11. – P.11.
79. *Dow N.F. Grunfest I.J.* Determination of most needed potentially possible improvements in materials for ballistic and space vehicles. In: General Electric Co., Space Sci. Lab., TIRS 60 SD 389, June 1960.
80. *Drexler E.K.* *Engines of Creation, the Coming Age of Nanotechnology.* – London: Fourth Estate, 1990. – 296 p.
81. *Ducker W.A., Cook R.F., Clarke D.R.* Force measurements using an AC Atomic Force Microscope // *J. Appl. Phys.* – 1990. – **67**. – P. 4045 – 4052.
82. *Endo M., Kim Y.A., Hayashi T., Fukai Y., Oshida K., Terrones M., et al.* Structural characterization of cup-packed-type nanofibers with an entirely hollow core // *Appl.Phys.Lett.* – 2002. – **80**, N 7. – P. 1267 – 1269.
83. *Endo M., Kim Y.A., Ezaka M., Osada K., Yanagisawa T. Hayashi T. et al.* Selective and efficient impregnation of metal nanoparticles on cup-stacked-type carbon nanofibers // *Nanoletters.* – 2003. – **3**, N 6. – P. 723 – 726.
84. *Fahmi A., Pietsch T., Mendoza C., Cheval N.* Functional hybrid materials // *Materials Today.* – 2009. – **12**, N 5. – P. 44 – 50.
85. *Feynman R.* There's plenty of room at the bottom // California Institute of Technology, February 1960. www.its.caltech.edu/~feynman.
86. *Golovchenko J.* The tunneling microscope: A new look at the Atomic World // *Science.* – 1986. – **232**. – P. 48 – 56.
87. *Gould P.* Truly three-dimensional photonic metamaterials. *Research news // Materials Today.* – 2008. – **11**, N 7 – 8. – P. 10.
88. *Goze C., Vaccarini L., Henrard L., Bernier P., Hernandez E., Rubio A.* Elastic and mechanical properties of carbon nanotubes // *Synth. Met.* – 1999. – **103**, N 18. – P. 2500 – 2501.
89. *Greentree A.D., Fairchild B.A., Hossain F.M., Prawer S.* Diamond integrated quantum photonics // *Materials Today.* – 2008. – **11**, N 9. – P. 22 – 31.
90. *Guz A.N.* The stability of orthotropic bodies // *Sov. Appl. Mech.* – 1967. – **3**, N 5. – P. 29 – 38.
91. *Guz A.N.* On constructing the theory of stability of unidirectional fibrous materials // *Sov. Appl. Mech.* – 1969. – **5**, N 2. – P. 62 – 70.
92. *Guz A.N.* Mechanics of composite materials with a small-scale structural flexure // *Sov. Appl. Mech.* – 1983. – **19**, N 5. – P. 383 – 392.

93. *Guz A.N.* Quasi-uniform states in composites with small-scale curvatures in the structure // *Sov. Appl. Mech.* – 1983. – **19**, N 6. – P. 479 – 489.
94. *Guz A.N.* Three-dimensional stability theory of deformed bodies. Internal instability // *Sov. Appl. Mech.* – 1985. – **21**, N 11. – P. 1023 – 1034.
95. *Guz A.N.* Fundamentals of the three-dimensional theory of stability of deformable bodies. – Berlin: Springer – Verlag, 1999. – 555 p.
96. *Guz A.N.* On Description and Studying Some Nonclassical Problems of Fracture Mechanics and Corresponding Mechanisms // *Int. Appl. Mech.* – 2000. – **36**, N 12. – P. 1537 – 1564.
97. *Guz A.N.* Constructing of the Three-Dimensional Theory of Stability of Deformable Bodies // *Int. Appl. Mech.* – 2001. – **37**, N 1. – P. 1 – 38.
98. *Guz A.N.* On One Two-Level Model in the Mesomechanics of Compression Fracture of Cracked Composites // *Int. Appl. Mech.* – 2003. – **39**, N 3. – P. 274 – 285.
99. *Guz A.N.* Three-Dimensional Theory of Stability of a Carbon Nanotube in a Matrix // *Int. Appl. Mech.* – 2006. – **42**, N 1. – P. 19 – 31.
100. *Guz A.N., Dekret V.A.* Stability loss in nanotube reinforced composites // *CMES–Computer Modeling in Engineering and Science.* – 2009. – **49**, N 1. – P. 69 – 80.
101. *Guz A.N., Guz I.A.* Analytical solution of stability problem for two composite half-planes compressed along interfacial cracks // *Composites. Part B.* – 2000. – **31**, N 5. – P. 403 – 418.
102. *Guz A.N., Guz I.A.* Mixed Plane Problems of Linearized Mechanics of Solids. Exact Solutions // *Int. Appl. Mech.* – 2004. – **40**, N 1. – P. 1 – 29.
103. *Guz A.N., Guz I.A.* On Models in the Theory of Stability of Multi-Walled Carbon Nanotubes // *Int. Appl. Mech.* – 2006. – **42**, N 6. – P. 617 – 628.
104. *Guz A.N., Rodger A.A., Guz I.A.* On Developing the Theory of Compressible Failure of Nano-Composites // *Int. Appl. Mech.* – 2005. – **41**, N 3. – P. 233 – 255.
105. *Guz A.N., Rushchitskii Ya.Ya.* Nanomaterials: on the Mechanics of Nanomaterials // *Int. Appl. Mech.* – 2003. – **39**, N 11. – P. 1271 – 1293.
106. *Guz A.N., Rushchitsky J.J., Guz I.A.* Establishing Fundamentals of the Mechanics of Nanocomposites // *Int. Appl. Mech.* – 2007. – **43**, N 3. – P. 247 – 271.
107. *Guz A.N., Rushchitsky J.J., Guz I.A.* Comparative computer modeling of carbon-polymer composites with carbon or graphite microfibers or carbon nanotubes // *CMRS–Computer Modeling in Engineering and Sciences.* – 2007. – **17**, N 1. – P. 44 – 59.
108. *Guz A.N., Rushchitsky J.J., Guz I.A.* On Constructing the Foundations of Mechanics of Nanocomposites // *Int. Appl. Mech.* – 2007. – **43**, N 3. – P. 246 – 278.
109. *Guz I.A.* Estimation of Critical Loading Parameters for Composites with Imperfect Layer Contact // *Int. Appl. Mech.* – 1992. – **28**, N 5. – P. 291 – 295.
110. *Guz I.A.* Investigation of the Stability of a Composite in Compressing Along Two Parallel Structural Cracks at the Layer Interfaces // *Int. Appl. Mech.* – 1994. – **30**, N 11. – P. 841 – 847.
111. *Guz I.A.* Problems of the Stability of Composite Materials in Compression Along Interlaminar Cracks: Periodic System of Parallel Microcracks // *Int. Appl. Mech.* – 1995. – **31**, N 7. – P. 551 – 557.
112. *Guz I.A.* Computer aided investigations of composites with various interlaminar cracks // *ZAMM.* – 1996. – **76**, Suppl. N 5. – P. 189 – 190.
113. *Guz I.A., Guz A.N., Rushchitsky J.J.* Modelling properties of micro- and nanocomposites with brush-like reinforcement - Modellierung der Eigenschaften von Mikro und Nanoverbundwerkstoffen mit burstenartigen Verstärkungen // *Math.-Wiss. und Werkstofftech.* – 2009. – **40**, N 3. – P. 33 – 39.
114. *Guz I.A., Rodger A.A., Guz A.N., Rushchitsky J.J.* Prediction the properties of micro- and nano-composites – from microwhiskers to bristled centipedes // *Philos.Trans. of the Royal Society of London.* – 2007. – **246**, N 3. – P. 264 – 268.
115. *Guz I.A., Rodger A.A., Guz A.N., Rushchitsky J.J.* Predicting the properties of nano-composites with brush-like reinforcement // Abstracts of the International Conference CNTNET 07 "Carbon Nano Tubes New Engineering Technologies", University of Cambridge, Trinity College, September 10 – 12. – 2007. – P. 29.
116. *Guz I.A., Rodger A.A., Guz A.N., Rushchitsky J.J.* Developing the mechanical models for nano- materials // *Composites. Part. A: Applied Science and Manufacturing.* – 2007. – **38**, N 4. – P. 1234 – 1250.
117. *Guz I.A., Rushchitsky J.J.* Comparison of mechanical properties and effects in micro and nanocomposites with carbon fillers (carbon microfibers, graphite microwhiskers and carbon nanotubes) // *Mech.Comp. Mater.* – 2004. – **40**, N 2. – P. 179 – 190.
118. *Guz I.A., Rushchitsky J.J.* Comparison of Characteristics of Wave Evolution in Micro and Nanocomposites with Carbon Fillers // *Int. Appl. Mech.* – 2004. – **40**, N 7. – P. 785 – 793.
119. *Guz I.A., Rushchitsky J.J.* Computational simulation of harmonic wave propagation in fibrous micro- and nano-composites with carbon or graphite microfibers or carbon nanotubes // *Composites Science and Technology.* – 2007. – **64**, N 4. – P. 861 – 866.
120. *Halicioglu T.* Stress calculations for carbon nanotubes // *Thin Solid Films.* – 1998. – **312**. – P. 11 – 14.

121. *Handbook of Composites*. Ed. G.Lubin. – New York: Van Nostrand Reinhold Company, 1982. (Рус. перевод – Справочник по композиционным материалам: В 2-х книгах / Под ред. Дж.Любина. – М.: Машиностроение, 1988. – 447 с., 580 с.).
122. *Handbook of Fillers and Reinforcements for Plastics*. Eds Katz H.S., Milewski J.V. – New York: Van Nostrand Reinhold Company, 1978.
123. *Hernandez E., Goze C., Bernier P., Rubio A.* Elastic properties of C and $BxCyNz$ composite nanotubes // *Phys. Rev. Lett.* – 1998. – **80**. – P. 4502 – 4505.
124. *Hernandez E., Goze C., Bernier P., Rubio A.* Elastic properties of single-wall nanotubes // *Appl. Phys.* – 1999. – **A68**. – P. 287 – 292.
125. *Heintz M.* Novel materials in the environment. The 27th report of the British Royal Commission on Environmental Pollution (RCEP) focusing on nanotechnology // *Materials Today*. – 2009. – **12**, N 1 – 2. – P. 6.
126. <http://nepp.nasa.gov/whisker> 2007.
127. *Kassner M.E., Nemat-Nasser S., Shigang Sua* and others. New directions in mechanics // *Mechanics of Materials*. – 2005. – **37**. – P. 231 – 259.
128. *Kelly A.* Composites in context // *Composites Science and Technology*. – 1985. – **23**. – P. 171 – 199.
129. *Krishnan A., Dujardin E., Ebbesen T.W., Yianilos P.N., Treacy M.M.J.* Young's modulus of single-walled carbon nanotubes // *Phys. Rev.* – 1998. – **B58**. – P. 14013 – 14019.
130. *Kröner E.* Allgemeine Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen // *Arch. Rat. Mech. and Anal.* – 1960. – **4**, N 4. – P. 18 – 334. – (Русск. перевод: – Кренер Э. Общая континуальная теория дислокаций и собственных напряжений. – М.: Мир, 1965. – 102 с.)
131. *Kroto H.* Symmetry, space, stars, and C60 (Nobel lecture) // *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* – 1997. – **36(15)**. – P. 1578 – 1593.
132. *Ladden S.* Knedel-Like Nanoparticles // *Math.-Wiss. und Werkstofftech.* – 2009. – **40**, N 3. – P. 45.
133. *Lau K.T., Hui D.* The revolutionary creating of new advanced carbon nanotube composite // *Composites. Part B: Engineering*. – 2002. – **33**. – P. 263 – 277.
134. *Lau K., Li H.L., Lim D.S., Hui D.* Recent research and development on nanotube / polymer composites // *Annals of Eur. Acad. Sci.* – 2003. – **1(1)**. – P. 318 – 333.
135. *Lier G.V., Alsenoy C.V., Doran V.V., Geerlings P.* Ab initio study of the elastic properties of single-walled carbon nanotubes and graphene // *Chem. Phys. Lett.* – 2000. – **326**. – P. 181 – 185.
136. *Lourie O., Cox D.M., Wagner H.D.* Buckling and collapse of embedded carbon nanotubes // *Phys. Rev. Letters*. – 1998. – **81**, N 8. – P. 1638 – 1641.
137. *Lourie O., Wagner H.D.* Evaluation of Young's modulus of carbon nanotubes by micro-raman spectroscopy // *J. Mater. Res.* – 1998. – **13**. – P. 2418 – 2422.
138. *Lu J.P.* Elastic properties of carbon nanotubes and nanoropes // *Phys. Rev. Letters*. – 1997. – **79**. – P. 1297 – 1300.
139. *Milton G.W.* The theory of composites. – Cambridge: Cambridge University Press, 2002. – P. 346.
140. *Mitchell I.V.* Pillared Layered Structures: Current Trends and Applications. – London: Elsevier Applied Science, 1990. – 480 p.
141. *Möbius G., Inkson B.J.* Nanoscale tomography in materials science // *Materials Today*. – 2007. – **10**, N 12. – P. 18 – 25.
142. *Molina J.M., Savinsky S.S., Khokhriakov N.V.* A tight-binding model for calculation of structures and properties of graphitic nanotubes // *J. Chem. Phys.* – 1996. – **104**. – P. 4652 – 4656.
143. *Muster J., Burghard M., Roth S., Duesberg G.S., Hemander E., Rubio A.* Scanning force microscopy characterization of individual carbon nanotubes on electrode arrays // *J.Vac. Sci. Technol.* – 1998. – **B16**. – P. 2796 – 2801.
144. *Nalwa H.S.* Handbook of Nanostructured Materials and Nanotechnology. – San Diego: Academic Press, 2000. – 524 p.
145. *Nanostructured Materials*. Ed. G.Wilde. – Amsterdam: Elsevier, 2009. – 383 p.
146. *Nystrom A.M., Bartels J.W., Du W.-J., Wooley K.I.* Perfluorocarbon-Loaded Shell Crosslinked Kne del-Like Nanoparticles: Lessons regarding Polymer Mobility and Self-Assembly // *J. Polymer Science: Part A: Polymer Chemistry*. – 2009. – **47**. – P. 1023 – 1037.
147. *Overney G., Zhong W., Tomanek D.* Structural rigidity and low-frequency vibrational models of long carbon tubules // *Z. Phys. D: Atoms Mol. Clusters*. – 1993. – **27**. – P. 93 – 96.
148. *Pan Z.W., Xie S.S., Lu L., Chang B.H., Sun L.F., Zhou W.Y., Wang G.* Tensile test of ropes of very long aligned multiwall carbon nanotubes // *Appl. Phys. Lett.* – 1999. – **74**. – P. 3152 – 3154.
149. *Pang L.S.K., Vassallo A.M., Wilson M.A.* Energy and Fuels. – 1992. – **6**. – P. 176 – 179.
150. *Plawsky J.L Kim J.K., Schubert E.F.* Engineered nanoporous and nanostructured films // *Materials Today*. – 2009. – **12**, N 6. – P. 36 – 45.
151. *Polymer nanocomposites handbook*. Editors: Gupta R.K., Kennel E., Kim K.-J. – Boca Raton: CRC Press, Taylor & Francis Group, 2008. – 549 p.

152. *Popov V.N., Van Doren V.E., Balkanski M.* Elastic properties of single-walled carbon nanotubes // *Phys. Rev.* – 2000. – **B61**. – P. 3078 – 3084.
153. *Prylutskiy Y.I., Durov S.S., Ogloblya O.V., Buraneva E.V., Scharff P.* Molecular dynamics simulations of mechanical, vibrational and electronic properties of carbon nanotubes // *Comput. Mater. Sci.* – 2000. – **17**. – P. 352 – 355.
154. *Qian D., Wagner G.J., Liu W.K., Yu M.F., Ruoff R.S.* Mechanics of Carbon Nanotubes // *Appl. Mech. Rev.* – 2002. – **55**. – P. 495 – 530.
155. *READE.com:* READE Advanced Materials – Filler Reinforcements. – 2007.
156. *Robertson D.H., Brenner D.W., Mintmire J.W.* Energetics and nanoscale graphitic tubules // *Phys. Rev.* – 1992. – **B45**. – P. 12592 – 12595.
157. *Rosen B.W.* Mechanics of composite strengthening // *Fiber Composite Materials.* – Amer. Society for Metal, Metals Park, Ohio. – 1965. – P. 37 – 75.
158. *Roukes M.* Nanoelectromechanical systems face the future // *Physics World.* – 2001. – **14**, №2.
159. *Roukes M.* A place is really enough // *Scientific American.* – 2001. – **5**. – P. 32 – 39.
160. *Rushchitsky J.J.* On the Self-Switching of Hypersonic Waves in Cubic Non-Linear Elastic Nanocomposites // *Int. Appl. Mech.* – 2009. – **45**, N 1. – P. 73 – 93.
161. *Rushchitsky J.J.* On Sensitivity of Structural Models of Composite Materials to Structural Length Scales // *Int. Appl. Mech.* – 2006. – **42**, N 12. – P. 1364 – 1370.
162. *Rushchitsky J.J.* Nonlinear Waves in Solid Mixtures (Review) // *Int. Appl. Mech.* – 1997. – **33**, N 1. – P. 3 – 38.
163. *Rushchitsky J.J.* Interaction of waves in solid mixtures // *Appl. Mech. Rev.* – 1999. – **52**, N 2. – P. 35 – 74.
164. *Rushchitsky J.J.* Extension of the Microstructural Theory of Two-Phase Mixtures to Composite Materials (Review) // *Int. Appl. Mech.* – 2000. – **36**, N 5. – P. 586 – 614.
165. *Rushchitsky J.J., Cattani C., Sinchilo S.V.* Cubic nonlinearity in elastic materials: theoretical prediction and computer modelling of new wave effects // *Mathematical and Computer Modelling in Dynamical Systems.* – 2004. – **10**, N 3 – 4. – P. 331 – 352.
166. *Salventat J.P., Briggs G.A.D., Bonard J.M., Bacsá R.R., Kulik A.J.* Elastic and shear moduli of single-walled carbon nanotube ropes // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – **82**. – P. 944 – 947.
167. *Sanchez-Portal D., Artacho E., Soler J.M., Rubio A., Ordejon P.* Ab initio structural, elastic and vibrational properties of carbon nanotubes // *Phys. Rev.* – 1999. – **B59**. – P. 12678 – 12688.
168. *Schuerch H.* Boron Filament Composite Materials for Space Structures. P.1: Compressive Strength of Boron Metal Composite // *Astro Research Corp. Santa Barbara (Ca), Report NARC-R-168.* – 1964.
169. *Schuerch H.* Prediction of compressive strength in uniaxial Boron fibermetal composite materials // *AIAA Journal.* – 1966. – **4**, N 1. – P. 102 – 106.
170. *Sealy C.* Taking a nacre-inspired approach to composites // *Materials Today.* – 2008. – **11**, N 4. – P. 15.
171. *Smalley R.E.* Discovering the fullerenes (Nobel lecture) // *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* – 1997. – **36 (15)**. – P. 1594 – 1601.
172. *Srivastava D., Wei Ch., Cho K.* Nanomechanics of carbon nanotubes and composites // *Appl. Mech. Rev.* – 2003. – **56**. – P. 215 – 229.
173. *Tersoff J.* Empirical interatomic potential for carbon, with applications to amorphous carbon // *Physical Review Letters.* – 1988. – **61**. – P. 2879 – 2882.
174. *Tersoff J.* New empirical approach for the structure and energy of covalent systems // *Physical Review.* – 1988. – **B37**. – P. 6991 – 7000.
175. *Thostenson E.T., Li C., Chou T.-W.* Nanocomposites in context (review) // *Composites Science and Technology.* – 2005. – **65**. – P. 491 – 516.
176. *Thostenson E.T., Chou T.W.* Nanotube buckling in aligned multi-wall carbon nanotube composites // *Carbon.* – 2004. – **42**, N 14. – P. 3015 – 3018.
177. *Tombler T.W., Zhou C., Alezseyev L., Kong J., Dai H.L., Jaganthi C.S., Tang M., Wu S.Y.* Reversible electromechanical characteristics of carbon nanotubes under local-probe manipulation // *Nature.* – 2000. – **405**. – P. 769 – 772.
178. *Treacy M.M.J., Ebbesen T.W., Gibson J.M.* Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes // *Nature.* – 1996. – **381**. – P. 678 – 680.
179. *Truesdell C.* A first course in rational continuum mechanics. – Baltimore: The John Hopkins University, 1972. – P. 592.
180. *Vaccarini L., Goze C., Henrard L., Hernandez E., Bernier P., Rubio A.* Mechanical and electronic properties of carbon and boron-nitride nanotubes // *Carbon.* – 2000. – **38**. – P. 1681 – 1690.

181. Vaia R.A., Wagner H.D. Framework for nanocomposites // *Materials Today*. – 2004. – **4**, N 10. – P. 32 – 37.
182. Valavala P.K., Clancy T.C., Odegard G.M., Gates T.S. Nonlinear multiscale modeling of polymer materials // *Int. J. Solids Str.* – 2007. – **44**. – P. 1161 – 1179.
183. Wagner H.D., Vaia R.A. Nanocomposites: issues the interface // *Materials Today*. – 2004. – **4**, N 10. – P. 38 – 42.
184. Wang M.C.P., Gates B.D. Directed assembly of nanowires // *Materials Today*. – 2009. – **12**, N 5. – P. 34 – 43.
185. Wang Y., Tang Z., Liang X., Liz-Marzan L.M., Kotov N.A. SiO₂-coated CdTe nanowires: bristled nanocentipedes // *Nano Letters*. – 2004. – N 2. – P. 225 – 231.
186. Weisenhorn A.L., Hansma P.K., Albrecht T.R., Quate C.F. Forces in Atomic Force Microscopy in Air and Water // *Appl. Phys. Lett.* – 1989. – **54**. – P. 2651 – 2653.
187. Wilson N., Kannangara K., Smith G., Simmons M., Raguse B. *Nanotechnology. Basic Science and Emerging Technologies*. – Boca Raton – London: Chapman & Hall / CRC, 2002. – 271 p.
188. Windle A.H. Two defining moments: A personal view by Prof. Alan H. Windle // *Composites Science and Technology*. – 2007. – **67**, N 4. – P. 929 – 930.
189. Wong E.W., Sheehan P.E., Lieber C.M. Nanobeam mechanics: elasticity, strength and toughness of nanorods and nanotubes // *Science*. – 1997. – **277**. – P. 1971 – 1975.
190. Yakobson B.L., Brabec C.J., Bernhole J. Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear response // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – **76**. – P. 2511 – 2514.
191. Yu L.M.Y., Leipzig N.D., Shoichet M.S. Promotion neuron adhesion and growth // *Materials Today*. – 2008. – **11**, N 5. – P. 36 – 43.
192. Yu M.F., Lourie O., Dyer M.J., Moloni K., Kelly T.F., Ruoff R.S. Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile // *Science*. – 2000. – **287**. – P. 454 – 458.
193. Zhang M., Li J. Carbon nanotube in different shapes // *Materials Today*. – 2009. – **12**, N 6. – P. 12 – 18.
194. Zhang P., Jiang H., Huang Y., Geubelle P.H., Hwang K.C. An atomistic-based continuum theory for carbon nanotubes : analysis of fracture nucleation // *J. Mech. and Phys. Solids*. – 2004. – **52**. – P. 977 – 998.
195. Zhou G., Duan W., Gu B. First-principles study on morphology and mechanical properties of single-walled carbon nanotubes // *Chem. Phys. Lett.* – 2001. – **333**. – P. 344 – 349.
196. Гузь А.Н., Руцицкий Я.Я., Гузь И.А. Введение в механику наноккомпозитов. – К.: Ин-т механики им. С.П.Тимошенко, 2010. – 398 с.
197. Busutil K. They do it with mirrors // *Materials Today*. – 2010. – **13**, N 10. – P. 11.
198. *Handbook of Nanophysics*. Ed. K.D. Sattler. – Boca Raton – London: CRC Press, Taylor and Francis Group, 2011.
 Vol.1. *Handbook of Nanophysics. Principles and Methods*. – 827 p.
 Vol.2. *Handbook of Nanophysics. Clusters and Fullerenes*. – 909 p.
 Vol.3. *Handbook of Nanophysics. Nanoparticles and Quantum Dots*. – 716 p.
 Vol.4. *Handbook of Nanophysics. Nanotubes and Nanowires*. – 784 p.
 Vol.5. *Handbook of Nanophysics. Functional Nanomaterials*. – 787 p.
 Vol.6. *Handbook of Nanophysics. Nanoelectronics and Nanophotonics*. – 779 p.
 Vol.7. *Handbook of Nanophysics. Nanomedicine and Nanorobotics*. – 887 p.
199. Koo J.H. *Polymer Nanocomposites: Processing, Characterization, and Application*. – New York: McGraw-Hill, 2006. – 289 p.
200. Liew K.M., He X.Q., Wang C.H. On the study of elastic and plastic properties of multi-walled carbon nanotubes under axial tension using molecular dynamics simulation // *Acta Materialia*. – 2004. – **52**. – P. 252 – 2527.
201. *Polymer Nanocomposites*. Eds. Mai Y.-W., Yu Z.-Z. – Cambridge: Woodhead Publishing Limited, 2009. – 608 p.
202. *Polymer Nanocomposites Handbook*. Eds. Gupta R.K., Kennel E., Kim K.-J. – Boca Raton – London: CRC Press, Taylor and Francis Group, 2010. – 566 p.
203. Ramsden J. *Nanotechnology*. – Ventus Publishing ApS, 2010. – 126 p.
204. Tjong S.C. *Carbon Nanotube Reinforced Composites. Metal and Ceramic Matrixes*. – Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH&Co. KGaA, 2009. – 304 p.

Поступила 28.09.2010

Утверждена в печать 07.12.2010