

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
ИНСТИТУТ ГИДРОДИНАМИКИ ИМ. М.А. ЛАВРЕНТЬЕВА

На правах рукописи

БАБИЧЕВ Алексей Владимирович

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ДЕФОРМИРОВАНИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК**

01.02.04 — механика деформируемого твердого тела

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
д.ф.-м.н., с.н.с. С. Н. Коробейников

НОВОСИБИРСК

2011

Оглавление

Введение	4
Глава 1 Уравнения молекулярной механики углеродных наноструктур	16
1.1 Физические основы молекулярных взаимодействий наноструктур	16
1.2 Потенциальная энергия графеноподобных наноструктур	23
1.3 Уравнения молекулярной механики графеноподобных наноструктур	27
1.3.1 Векторная форма уравнений движений/равновесия наноструктуры	28
1.3.2 Скалярная форма уравнений движения/равновесия наноструктуры	30
1.3.3 Вариационная формулировка уравнений равновесия наноструктуры	34
1.3.4 Уравнения квазистатического деформирования наноструктуры	36
1.4 Устойчивость равновесия и движения упругой системы материальных точек	40
1.4.1 Определения устойчивости решений	40
1.4.2 Устойчивость решений линейной системы	43
1.4.3 Устойчивость равновесных состояний нелинейной системы	46
1.4.4 Устойчивость квазистатических движений нелинейной системы	48
1.4.5 Устойчивость динамических движений нелинейной системы	49
Выводы по главе 1	52
Глава 2 Процедуры численных решений нелинейных уравнений молекулярной механики и их программная реализация	53
2.1 Интегрирование уравнений движения (равновесия) наноструктуры	53
2.1.1 Схема Ньюмарка решения динамических задач	55
2.1.2 Пошаговое интегрирование линеаризованных уравнений движения (равновесия) наноструктуры	55
2.1.3 Итерационные процедуры уточнения решения уравнений движения наноструктуры	56
2.1.4 Критерии сходимости	57
2.2 Алгоритмы решения задач о выпучивании наноструктур	59

Оглавление	3
2.2.1 Квазистатическое деформирование наноструктур	59
2.2.2 Динамическое деформирование наноструктур	62
2.3 Алгоритмы решения задач о контакте/самоконтакте наноструктур(ы)	65
2.4 Автоматизация процесса компьютерного моделирования деформирования нанотрубок	68
2.4.1 Необходимость автоматизации	68
2.4.2 Адаптация кода PIONER к решению задач о деформировании нанотрубок	70
2.4.3 Визуализация наноструктуры с помощью пакета MSC.Patran	71
2.4.4 Визуализация наноструктуры с помощью пакета VMD	72
2.4.5 Сравнительный анализ возможностей визуализации наноструктур пакетами MSC.Patran 2010 и VMD	73
Выводы по главе 2	73
Глава 3 Компьютерное моделирование деформирования, выпучивания и контакта углеродных нанотрубок	75
3.1 Сравнение численных решений задач о деформировании и выпучивании УНТ с решениями других авторов	77
3.1.1 Квазистатическое деформирование	78
3.1.2 Динамическое деформирование	78
3.2 Деформирование и выпучивание «короткой» УНТ, сжатой по оси	84
3.2.1 Квазистатическое деформирование	85
3.2.2 Динамическое деформирование при приложении силы, возрастающей с постоянной скоростью	85
3.2.3 Динамическое деформирование при внезапном приложении постоянной осевой нагрузки	89
3.3 Деформирование и выпучивание УНТ «средней» длины, сжатой по оси	94
3.3.1 Квазистатическое деформирование	94
3.3.2 Динамическое деформирование	95
3.4 Деформирование и выпучивание «длинной» УНТ, сжатой по оси	100
3.4.1 Квазистатическое деформирование	102
3.4.2 Динамическое деформирование	102
3.5 Деформирование и выпучивание УНТ при кручении	107
3.5.1 Квазистатическое деформирование	110
3.5.2 Динамическое деформирование	112
3.6 Контактное взаимодействие углеродных нанотрубок	117

<i>Оглавление</i>	4
Выводы по главе 3	126
Заключение	129
Литература	129

Введение

С открытием существования фуллеренов [47] (1985 г.), нанотрубок [72] (1991 г.) и графена [60] (2004 г.) в науке и технике образовалось новое направление – нанотехнологии. Наноструктуры играют все бóльшую роль в современных нанотехнологиях [8]. Одним из направлений, развиваемых в нанотехнологиях, является разработка как композитных наноматериалов, так и нанобъектов, включающих наноструктуры как составные части. Под наноструктурами понимаем супермолекулы [26], в которых атомы имеют между собой химические (ковалентные) связи, при этом число атомов в наноструктуре может варьироваться от нескольких единиц до миллионов. Пристальное внимание науки к углероду и его модификациям, позволило сделать огромный шаг на пути исследования и получения новых материалов на его основе. Типичными представителями наноструктур являются графен, фуллерен, однослойная и многослойная нанотрубки и т. д. Дальнейшее применение наноструктур в технике и электронике требует их детального изучения физических, химических и механических свойств. Современные сканирующие туннельные микроскопы (СТМ), атомно-силовые микроскопы (АСМ) позволяют исследовать поверхности на молекулярном и атомном уровне [20]. Сканирующий туннельный микроскоп позволяет не только получать «изображение» наноструктуры но и ее колебательные спектры. Наряду с экспериментальными наблюдениями последнее время с ростом вычислительных возможностей современных суперкомпьютеров стало возможным математическое моделирование наноструктур, их физических, химических и деформационных свойств [14, 46]. Наиболее распространенными наноструктурами, используемыми в нанотехнологиях, являются нанотрубки [19, 48, 68, 92, 124]. С экспериментальными работами по конструированию нанотрубок, путем сворачивания тонких пленок, можно ознакомиться в [56, 90, 109, 123], где представлен метод получения нанотрубок высокой чистоты.

Нанотрубки обладают уникальными физическими и механическими свойствами. Так коэффициент теплопроводности для отдельной нанотрубки хиральности (10,10) при комнатной температуре составляет $k = 6600 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$ [41] (для сравне-

ния, коэффициент теплопроводности меди составляет $k = 401 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$ [21]). Металлической проводимостью обладают те углеродные нанотрубки, для которых разность индексов хиральности $n-m$ кратна трем, остальные углеродные нанотрубки являются полупроводниками [6]. Модуль Юнга идеальной нанотрубки составляет 1000 ГПа, что в пять раз превышает значение теоретического модуля Юнга, рассчитанного для стали, в то время как предел прочности для нанотрубки составляет 63 ГПа, что в 50 раз больше предела прочности стали [49, 68, 93]. Такие высокие значения предела прочности и модуля Юнга вместе с низкой плотностью дают возможность использования нанотрубок и композитов на их основе в передовых отраслях науки и техники. Исследования трибологических свойств многослойной нанотрубки [54] показывают низкие значения сил трения как в динамике, так и в статике, а также практически отсутствие износа на атомарном уровне. Такие уникальные трибологические свойства многослойных нанотрубок дают возможность их дальнейшего использования в качестве наноэлектромеханических систем.

Диссертационная работа посвящена **новой** постановке задач наномеханики, развитию алгоритмов численного решения нелинейных уравнений молекулярной механики (ММ), их реализации, визуализации результатов расчетов и численному решению **новых** задач деформирования, потери устойчивости и контактных взаимодействий углеродных нанотрубок. В работе применен **новый** подход к постановке задач контактного взаимодействия нанотрубок с учетом сил Ван-дер-Ваальса, развиты алгоритмы и процедуры численного решения контактного взаимодействия нанотрубок, показана важность учета сил Ван-дер-Ваальса при контакте наноструктур и их самоконтакте. Типичными задачами ММ являются задачи по потере устойчивости и деформированию наноструктур и их контактному взаимодействию. В работе используется **новый** подход к определению форм выпучивания, критических значений времен, сил и перемещений при численном решении задач деформирования наноструктур как в квазистатической, так и в динамической постановках.

Актуальность математического моделирования деформирования, потери устойчивости и контактного взаимодействия наноструктур обусловлена стремительным развитием нанотехнологий и их научной основы — наномеханики. Корректное математическое моделирование деформирования, потери устойчивости и контактного взаимодействия наноструктур требует решение задач в нелинейной постановке. Нелинейность может быть физической (законы взаимодействия между атомами наноструктуры существенно нелинейны), геометрической (наноструктуры могут претерпевать большие деформации) и контактной. Нелинейность деформирования наноструктур в крайней степени проявляется при их потере устойчивости. Исследования

процессов выпучивания нанотрубок имеют большое значение с точки зрения оценки их эксплуатационных характеристик. В связи с этим математическое моделирование выпучивания однослойных и многослойных нанотрубок быстро развивается (см., например, [5, 27, 28, 29, 30, 31, 39, 40, 57, 63, 73, 82, 86, 85, 91, 101, 102, 107, 113, 118, 119, 120, 121, 127, 135, 136, 138, 139, 140, 141, 142]). Обзор работ по выпучиванию нанотрубок за последние два десятилетия представлен в [111].

Существует два подхода к моделированию процессов деформирования наноструктур: подход, использующий уравнения механики деформируемого твердого тела (МДТТ) и подход, учитывающий атомную/молекулярную природу строения этих объектов.

Первый подход к описанию деформирования наноструктур использует классические уравнения МДТТ. При таком подходе численное моделирование деформирования наноструктур происходит путем дискретизации уравнений МДТТ и последующим их решением численными методами, например методом конечных элементов (МКЭ) [11, 34, 144]. При моделировании деформирования наноструктур МКЭ используются дискретизация уравнений теории пластин и оболочек (ТПО). Важным этапом в таком моделировании является выбор конечного элемента (КЭ). Как правило, используются изопараметрические элементы пластин и оболочек высокого порядка аппроксимации, а также выбор параметров модели наноструктуры (в случае однослойной нанотрубки это толщина ее стенки h , модуль юнга E материала, коэффициент Пуассона ν). При таком подходе возможно использование многих коммерческих и свободно распространяемых пакетов программ для геометрического моделирования и численного решения задач МДТТ, например таких как Abaqus [53], MSC.Marc [95], MSC.Patran [105]. Математическое моделирование деформирования наноструктур с использованием уравнений ТПО проводится, например, в работах [24, 45, 69, 98, 117, 126, 128, 130]. Для определения упругих констант, входящих в уравнения ТПО, используют правило Коши – Борна или его модификации [29, 59, 94].

Второй подход, учитывающий атомную/молекулярную природу строения наноструктур реализуется в трех методах: метод, основанный на квантовомеханических расчетах из первых принципов (*ab initio*), метод молекулярной механики (ММ) и метод молекулярной динамики (МД).

Квантовомеханические расчеты проводятся для сравнительно небольшого числа частиц (атомов), поскольку решить уравнение Шредингера для системы многих частиц трудно (при увеличении числа частиц время расчета растет экспоненциально). Более подробно о квантовомеханических расчетах можно узнать из книги M. Rieth [112].

Методы ММ и МД основаны на классической механике Ньютона движения материальных частиц в силовых полях. Частицы/атомы наноструктуры представляются в них как материальные точки. Взаимодействие между атомами происходит посредством силовых полей, которые определяются потенциалами. Законы квантовой механики учитываются в методах ММ и МД неявным образом, через использование потенциалов взаимодействия, полученных путем расчета из первых принципов. В отличие от квантовомеханических расчетов, расчеты методами ММ и МД позволяют получать результаты математического моделирования деформирования наноструктур содержащих до 10^9 атомов, что соответствует одному кубическому микрометру [14].

В основе метода МД лежит использование явных схем интегрирования уравнений движения Ньютона системы атомов [4, 14, 46, 92, 110]. При использовании явных схем интегрирования уравнений движения Ньютона система уравнений распадается на решение несвязанных уравнений, при этом не требуется формировать матриц касательных жесткостей.

При решении уравнений квазистатического движения наноструктур [80] или динамического деформирования этих структур с использованием неявных схем интегрирования уравнений движения Ньютона требуется формировать матрицы касательных жесткостей. Метод решения уравнений квазистатического/динамического движения наноструктур, требующий формулировки матриц касательных жесткостей системы уравнений, называем методом ММ (обычно методом ММ называют метод решения уравнений квазистатического движения наноструктуры; в настоящей работе к методу ММ относится и метод решения задач движения наноструктур по неявным схемам интегрирования уравнений движения из-за близости программной реализации этого метода к пошаговому интегрированию уравнений квазистатического деформирования наноструктур).

Метод молекулярной механики можно подразделить на два типа: классический метод ММ и метод молекулярной структурной механики (МСМ). В классическом методе ММ нелинейные законы взаимодействия атомов вводятся непосредственно в нелинейные уравнения квазистатического/динамического движения наноструктур [80], а в методе МСМ [51, 74] межатомные силы взаимодействия наноструктур моделируются силами, возникающими при деформациях фиктивных стержней, соединяющих атомы. Метод МСМ позволяет моделировать процесс деформирования наноструктур с помощью коммерческих пакетов вычислительных программ, реализующих метод конечных элементов, подбором типа стержневого элемента, модели материала и констант модели материала. Классический метод ММ для моделирова-

ния контакта наноструктур использовался в [28, 29, 30, 31, 36, 39, 50, 64, 85, 97, 113], а метод МСМ — в [1, 5, 17, 24, 52, 61, 76, 85, 87, 88, 89, 103, 104, 106, 107, 108].

В работе [100] проводится моделирование по растяжению, кручению и изгибу нанотрубки МКЭ с использованием уравнений ТПО. Результаты расчетов хорошо согласуются с результатами расчетов полученных методом ММ. В работе [29] обсуждается сравнение методов МДТТ и ММ. Метод МДТТ, по мнению авторов, является существенно «дешевым» по сравнению с методом ММ, так как не требует отслеживания положения каждого атома. Дискретизация уравнений движения наноструктуры проводилась с помощью МКЭ. Для вычислений по методу ММ применялся потенциал Терзофа-Бреннера в случае ковалентных связей, а в случае взаимодействий Ван-дер-Ваальса использовался потенциал Леннарда-Джонса. Также в [29] было отмечено преимущество использования уравнений МДТТ к деформированию наноструктур перед использованием метода ММ, которое состоит в выборе достаточно большего шага интегрирования уравнений движения наноструктуры без существенной потери точности решения. Однако применение метода МДТТ встречает некоторые трудности, такие, как выбор констант среды, а также определение анизотропии свойств среды, связанной с хиральностью нанотрубки, которые существенно влияют на результаты моделирования [111]. В [15, 16] показано, что размеры и форма нанокристалла вносят дополнительную анизотропию в его механические свойства. Дается оценка масштабных эффектов, возникающих при применении континуальной теории упругости к нанообъектам, а также обсуждается влияние масштабных эффектов при использовании метода молекулярной динамики для моделирования макроскопических объектов. В [18] вычисляются тензоры четвертого ранга, характеризующие упругие свойства кристаллической решетки графита, построенной на основе предлагаемой модели парного моментного взаимодействия между атомами углерода. Сравнение МД и МДТТ методов на примере синтеза InGaAs/GaAs нанотрубки, а также границы применимости МДТТ метода приведены в [42]. Существует также и некоторый барьер в интерпретации результатов моделирования методом МДТТ, так как он нарушает дискретность расположения атомов в модели и визуализация результатов моделирования становится не столь очевидной по сравнению с методом ММ и МД. В методах ММ и МД используется непосредственно дискретная природа наноструктуры, что позволяет визуально наблюдать качественную картину деформирования наноструктуры, а затем проводить детальный анализ процесса ее деформирования. Наглядность визуализации результатов моделирования методом ММ и МД становится особенно ощутимой когда наноструктура является объемной. Использование дискретной природы наноструктуры в ММ и МД методе позволяет уйти от ошибок

дискретизации уравнений движения наноструктуры по пространству в отличие от метода МДТТ.

Целью работы является постановка задач квазистатического/динамического деформирования наноструктур, их контактного взаимодействия, развитие критериев потери устойчивости решений уравнений деформирования наноструктур, основанных на нелинейных уравнениях ММ, развитие процедур численного решения задач динамической потери устойчивости и контактного взаимодействия наноструктур, внедрение развитых критериев и процедур численного решения задач наномеханики в пакет PIONER [65] и решение новых задач деформирования, выпучивания и контактных взаимодействий углеродных нанотрубок.

Основные задачи исследований:

- Разработать критерии потери устойчивости динамического деформирования наноструктур в нелинейной постановке.
- Разработать новый метод решения задач о контактных взаимодействиях графеноподобных наноструктур.
- Внедрить развитые процедуры численного решения задач динамической потери устойчивости и контактных взаимодействий наноструктур в пакет PIONER.
- Автоматизировать процесс визуализации полученных с помощью пакета PIONER результатов математического моделирования деформирования углеродных нанотрубок.
- Получить решения новых задач квазистатического/динамического деформирования, выпучивания и контактного взаимодействия углеродных нанотрубок.

Методы исследования. Для решения задач квазистатического/динамического деформирования углеродных нанотрубок и их контактных взаимодействий используются нелинейные уравнения ММ. Пошаговое интегрирование по времени уравнений движения наноструктур осуществляется с использованием пакета PIONER. Для пред/постпроцессорной обработки результатов численного решения задач квазистатического/динамического деформирования наноструктур созданы пакеты прикладных программ, взаимодействующие с пакетами PIONER [65], MSC.Patran 2010 [105] и VMD [71].

Достоверность полученных в работе результатов определяется решением полных нелинейных уравнений ММ с итерационным уточнением решений до

заданной величины методом Ньютона – Рафсона, использованием разработанных законов специалистами в области физики межмолекулярных взаимодействий, противоречием полученных решений задач с решениями других авторов.

В **первой главе** настоящей работы рассматриваются постановки нелинейных задач деформирования, потери устойчивости наноструктур и их контактного взаимодействия; развивается **новый** метод решения задач деформирования углеродных наноструктур, основанный на применении метода ММ решения уравнений квазистатического/динамического деформирования наноструктур, сочетающего элементы классического метода ММ и метода МСМ. При этом силы ковалентных и нековалентных взаимодействий атомов (при решении контактных задач и задач самоконтакта наноструктуры) определяются непосредственно из потенциалов Морзе и Леннарда-Джонса соответственно (элементы классического метода ММ), а изменение угла между соседними ковалентными связями определяется по деформации фиктивного стержневого элемента, как это принято в методе МСМ.

Метод МД, в силу своей простоты (для интегрирования уравнений движения наноструктур используется явная конечно-разностная схема), наиболее популярен среди исследователей, однако, при интегрировании уравнений движения наноструктур он в некоторых случаях использования требует слишком большого числа шагов по времени для удовлетворения условий устойчивости численного интегрирования, накладываемых на величины шагов во времени, что делает затруднительным моделирование продолжительного по времени процесса деформирования наноструктуры. Метод ММ, хотя и основан на более сложной (по сравнению с первой) схеме дискретизации по времени уравнений движения, можно использовать для интегрирования уравнений квазистатического/динамического движения наноструктур без ограничения по устойчивости решения на величину шага по времени.

В известных исследованиях по выпучиванию наноструктур, выполненных другими авторами с использованием методов МД [57, 73, 91, 102, 118, 135, 136, 138, 139, 140, 141, 142] и ММ [5, 17, 27, 28, 29, 30, 31, 39, 40, 63, 85, 107], критические значения параметров деформирования и формы выпучивания определяются, за редким исключением (в [107] используется линеаризованная теория устойчивости, когда для определения основного статического равновесного состояния используются линейные уравнения наномеханики, а критические нагрузки и формы выпучивания наноструктур определяются в точках бифуркации интегральной кривой основного состояния, получаемых из решения задачи по определению собственных значений/векторов), прямым интегрированием уравнений квазистатического/динамического деформирования этих структур либо с идеальным строением соответствующей атомной ре-

щетки, либо со специально вводимыми возмущениями параметров наноструктуры (геометрии или нагрузок). Необходимо отметить, что при прямом интегрировании уравнений движения наноструктур для надежного определения критических значений параметров деформирования требуется проводить ряд решений одной и той же задачи с различными типами возмущений, что приносит неудобство в интерпретацию результатов решения. Например, в [27] получено, что при кручении нанотрубки без специального введения возмущений критический угол закручивания равен 15° (в этом случае возмущения в процесс деформирования трубки вносятся конечным представлением чисел в компьютере), а при введении возмущений этот угол получается равным 9.5° .

В настоящей работе представляется **новый** подход к определению критических значений параметров деформирования и форм выпучивания наноструктур, основанный на использовании критериев потери устойчивости решений нелинейных ОДУ на конечном интервале времени. Этот подход был развит для решения задач о выпучивании наноструктур в условиях квазистатического деформирования в [10, 78, 79, 81], а в настоящей работе этот подход распространяется и на решения динамических задач. Использование критериев выпучивания позволяет при решении задачи о деформировании только идеальной (без специального внесения возмущений в геометрические параметры или внешние силы) наноструктуры определить как критические значения параметров деформирования, так и формы выпучивания наноструктуры. Применение подобных критериев хорошо себя зарекомендовало при исследовании вопросов устойчивости деформируемых твердых тел [11] и использовалось автором настоящей работы при решении задачи о выпучивании углеродной нанотрубки, сжатой по оси [12, 82] и при решении задачи о кручении нанотрубки [2]. Метод ММ для достаточно широкого класса задач содержит информацию об устойчивости решения в свойствах матрицы касательной жесткости, определяемой при формулировке уравнений движения наноструктур в приращениях [10, 78, 79, 81, 82], т. е. статус фундаментального решения относительно устойчивости определяется непосредственно в процессе интегрирования уравнений квазистатического/динамического движения наноструктуры, без решения дополнительных задач по движению наноструктур с возмущенными параметрами (геометрии, внешних сил и т. д.). Показано, что использование критериев потери устойчивости позволяет определять критические углы закручивания и формы выпучивания углеродной нанотрубки при кручении, а также критические значения силы и перемещений торцов нанотрубки при осевом сжатии. В то же время метод МД позволяет проводить исследования по потере устойчивости динамических движений наноструктур только

решением ряда дополнительных задач с возмущенными параметрами и последующим сравнением этих решений с фундаментальным решением.

Таким образом, у каждого из этих методов (МД и ММ) есть своя область эффективного приложения. В частности, оказалось полезным применение метода ММ к решению задач выпучивания наноструктур при квазистатическом/динамическом деформировании [2, 12, 78, 82].

Как при конструировании наноматериалов и нанообъектов, так и при изучении их эксплуатационных свойств полезно разработать математическую модель взаимодействия наноструктур(ы) при их (само)контакте при действии нековалентных межатомных сил. К нековалентным силам взаимодействия атомов относят силы Ван-дер-Ваальса (ВдВ) и др. [46, 92, 110, 115, 137]. В настоящей работе рассматриваются только силы ВдВ нековалентного взаимодействия атомов наноструктур.

При контакте наноструктур одновременно действуют два типа сил ВдВ взаимодействия атомов: отталкивания, действующих на коротких расстояниях, и притяжения, действующих на дальних расстояниях (некоторые авторы под силами ВдВ понимают только силы притяжения, см., например, [115]). Силы ВдВ принципиально отличают контакт наноструктур от контакта структур обычных размеров, так как они играют роль «естественного клея» и при сближении как различных наноструктур, так и различных частей одной и той же наноструктуры на некоторое расстояние, соответствующее балансу сил притяжения и отталкивания, они при контактной склейке приобретают новые качества. Типичными нанообъектами, в которых углеродные наноструктуры соединены («склеены») являются многослойные нанотрубки [24, 25, 29, 36, 85, 97, 107, 113, 117, 141, 142], конфигурации нанотрубок в виде колец [137], «теннисных ракеток» [116], нанотрубки с участками параллельных стенок [28, 64], соединение нанотрубок в конгломераты (узлы), образование полотна, «сотканного» из нанотрубок [31], соединение нанотрубок с полимерной матрицей, образующее композитный материал, обладающий высокой прочностью [5, 17, 37, 38, 61, 89, 108, 125], нанообъекты, составленные из нанотрубок с фуллеренами, находящимися внутри них [132] и т.д. «Склеивание» стенок нанотрубок при их кручении зафиксировано в экспериментах [62]. Следуя [26, 137], силы ВдВ, действующие между атомами разных супермолекул, назовем супрамолекулярными, а силы ВдВ взаимодействия атомов одной супермолекулы — интрамолекулярными.

Перед интегрированием уравнений квазистатического/динамического движения наноструктур вводится квадратная таблица (матрица) их возможного контакта. Заполненные внедиагональные элементы таблицы включают при интегрировании уравнений движения наноструктур проверку супрамолекулярных взаимодействий

контактных пар наноструктур, а заполненные диагональные элементы таблицы — проверку интрамолекулярных ВдВ взаимодействий (самоконтакт) наноструктур(ы). Аналогичная техника задания контактных таблиц используется в пакете MSC.Marc для решения нелинейных задач контакта сплошных тел с заранее неизвестной границей контакта [95]. Отметим, что в [5, 17] стержни, моделирующие возможные силы ВдВ взаимодействия атомов, задаются до начала интегрирования уравнений движения наноструктур, а в настоящей работе контактные связи атомов и контактные силы, действующие между атомами, определяются по некоторым критериям (см. п. 4) вступления наноструктур в контакт в процессе интегрирования уравнений движения наноструктур.

Развитый алгоритм контактных взаимодействий наноструктур апробируется на решении **новой** задачи о контакте двух нанотрубок, когда в начальный момент процесса интегрирования одна нанотрубка неподвижна, а вторая нанотрубка налетает на первую с заданной начальной скоростью. В зависимости от величины этой скорости получено три качественно разных решения этой задачи. Этот же алгоритм применен для решения **новой** задачи о сжатии двухслойной нанотрубки. Показана важность определения самоконтакта нанотрубки для предотвращения взаимного проникновения стенок трубки при математическом моделировании процесса контакта нанотрубок.

Защищаемые научные результаты:

- Разработка критериев потери устойчивости динамического деформирования наноструктур.
- Разработка метода решения задач о контактных взаимодействиях наноструктур.
- Построение алгоритмов численного решения задач потери устойчивости и контакта наноструктур и их внедрение в пакет PIONER.
- Развитие алгоритмов и пакетов прикладных программ по взаимодействию пакета PIONER с пакетами VMD и MSC.Patran 2010 для визуализации деформированных конфигураций, форм выпучивания и собственных колебаний нанотрубок.
- Решения новых задач квазистатического/динамического деформирования, выпучивания и контактного взаимодействия наноструктур.

Апробация работы и публикации. Материалы, вошедшие в диссертацию, докладывались и обсуждались на:

- Международной конференции «Fracture Mechanics in Design of Fracture Resistent Materials and Structures» (ICF 2007) (Москва, 2007 г.)
- Международной конференции MicroNanoReliability 2007 (Берлин, 2007)
- V-й Всероссийской конференции «Механика микронеоднородных материалов и разрушение» (Екатеринбург, 2008 г.)
- Конференции «Проблемы нелинейной МДТТ» (Пермь, 2008 г.)
- Международной молодежной научной конференции «XXXV гагаринские чтения» (Москва, 2009 г.)
- Международной молодежной научной конференции «XXXVI гагаринские чтения» (Москва, 2010 г.)
- XXXVIII-й Международной конференции «Advanced Problems in Mechanics» (Санкт-Петербург, 2010 г.)
- 18-й Европейской конференции ECF18 «Fracture Materials and Structures from Micro to Macro Scale» (Дрезден, 2010 г.)
- ICAMI2010 International Conference on Applied Mathematics and Informatics (Сан-Андрес, Колумбия, 2010 г.)
- Всероссийской научной конференции «Фундаментальные и прикладные вопросы механики и процессов управления» (Владивосток, 2011 г.)

Публикации. Основные результаты диссертационной работы изложены в [2, 3, 9, 12, 82], в том числе 3 статьи [2, 3, 9] опубликованы в журналах, входящих в перечень изданий, рекомендованных ВАК.

Глава 1

Уравнения молекулярной механики углеродных наноструктур

1.1 Физические основы молекулярных взаимодействий наноструктур

Настоящий раздел основан на материалах, представленных в [22, 33, 67].

Свойства твердых тел – как физические, так и химические, существенно зависят от их электронной и атомной структуры. Если рассматривать общие свойства твердого тела, то следует исходить из химической классификации межатомных связей, согласно которой основными типами связей является ионная, ковалентная, металлическая и вандерваальсова. Образование химической связи можно представить, рассматривая силы взаимодействия между атомами или ионами. Когда атомы вещества удалены друг от друга на большое расстояние, сила, действующая между ними, близка нулю, и поэтому потенциальную энергию их взаимодействия можно считать равной нулю. На больших расстояниях действуют силы притяжения, возникающие вследствие электростатического взаимодействия атомов вещества. При меньших расстояниях начинают преобладать силы отталкивания между одноименными зарядами атомов. Полную потенциальную энергию взаимодействия приближенно можно представить в виде суммы двух членов:

$$V = -\alpha/r^n + \beta/r^m, \quad (1.1)$$

где r – расстояние между атомами; α и β – константы, характеризующие силы притяжения и отталкивания; m и n – постоянные, характерные для данного типа взаимодействия. Расстояние r , соответствующее минимуму потенциальной энергии, соответствует равновесному межатомному расстоянию (рис. 1.1).

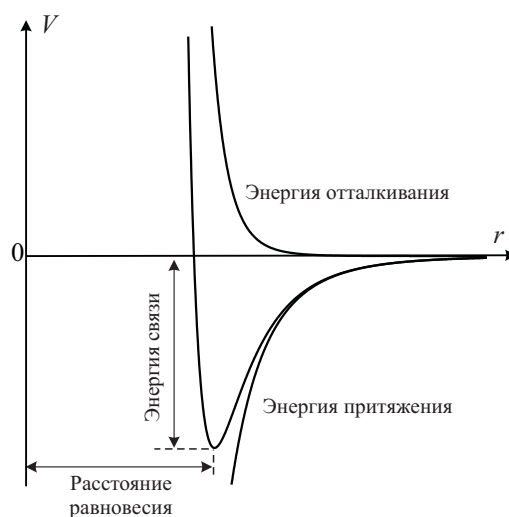


Рис. 1.1. Схематическая кривая зависимости энергии V взаимодействия атомов от расстояния r между ними.

Ионная связь

Если один из двух атомов, находящихся во взаимодействии, в достаточной мере электроположителен, а другой – электроотрицателен, то первый атом может передать валентный электрон второму, тогда, вследствие электростатического (кулоновского) взаимодействия противоположно заряженных ионов, возникает сила притяжения и образуется ионная связь. Так как электростатическое взаимодействие является достаточно сильным, то связь между ионами в ионных кристаллах очень прочная, как правило, такие вещества характеризуются высокой прочностью, твердостью и высокими температурами плавления. Из-за направленной природы сил в твердом теле они хрупки [67].

Ковалентная связь

Образование ковалентной связи между атомами можно представить как обобществление электронов, принадлежащих одному или обоим атомам в результате перекрывания связывающих орбиталей, которое понижает энергию системы. Этот тип связи обычно, встречающийся в органических молекулах, так же соответствует и углерод-углеродной и углерод-водородной связям. Ковалентные связи обладают направленным характером, как это можно наблюдать на примере тетраэдрической конфигурации алмаза и кремния. Например если у электронов двух атомов водорода противоположные спины, то корреляция спинов, ведущая к сближению электронов, преодолевает их взаимное отталкивание и оба электрона могут находиться в пространстве между ядрами, что приведет к появлению межатомной силы притяжения или силы сцепления, которая называется ковалентной связью. Ковалентная связь очень

прочна, об этом говорят высокая твердость и высокие температуры плавления таких веществ, как алмаз.

Слабые электростатические силы, известные как силы Ван-дер-Ваальса (ВдВ), также могут быть силами сцепления, посредством которых осуществляются связи атомов в наноструктуре. Имеется достаточно доказательств того, что между незаряженными атомами и молекулами в твердой, жидкой и газообразной фазах могут действовать силы притяжения, которые не укладываются в понятия валентного представления. В большинстве случаев вандерваальсовы силы аддитивны и не могут «насыщаться», как обычные валентные связи. Следовательно эти силы притяжения между двумя атомами не зависят от присутствия других атомов [33]. Первое обоснование эффекта притяжения атомов к неполярным молекулам и атомов к полярным молекулам было сделано Ф. Лондоном в 1929 году. Согласно представлению Лондона, электроны находятся постоянно в движении относительно ядра, поэтому в любом атоме центры положительного и отрицательного зарядов не совпадают, откуда и возникает диполь. Направление этого диполя быстро меняется в зависимости от осцилляции орбитальных электронов, и в среднем для большого числа атомов, предпочтительного направления разделения зарядов не будет и поэтому результирующий общий диполь будет равен нулю. Однако электрическое поле временного диполя каждого атома может индуцировать диполь в соседнем атоме и эти диполи могут затем взаимодействовать, давая энергию Лондона:

$$V_L = -\frac{3h\nu_0\alpha^2}{4r^6}, \quad (1.2)$$

где ν_0 – частота «осцилляция при абсолютном нуле» (сек^{-1}), $h\nu_0$ – энергия ионизации атома (Дж), α – коэффициент поляризуемости (см^3) [67]. Лондон смог показать, что силы, возникающие таким образом, достаточно велики, чтобы объяснить наблюдаемые вандерваальсовы силы, и что эти силы аддитивны. Когда атомы или молекулы притягиваются вандерваальсовыми силами, они сближаются до тех пор, пока их орбитальные электроны не начнут отталкиваться. Следовательно, в общем выражении для энергии взаимодействия Ван-дер-Ваальса нужно учитывать это отталкивание, которое имеет значение лишь при очень небольших расстояниях. Подходящим является выражение

$$V = -\frac{c}{r^6} + \frac{d}{r^{12}}, \quad (1.3)$$

где c, d – постоянные, характеризующие силы притяжения и отталкивания. В результате уравнивания этих сил притяжения и отталкивания атомы и молекулы, связанные вандерваальсовыми силами, остаются на конечном расстоянии друг от друга, и, следовательно, каждому атому и молекуле можно приписать вандерваальсов ра-

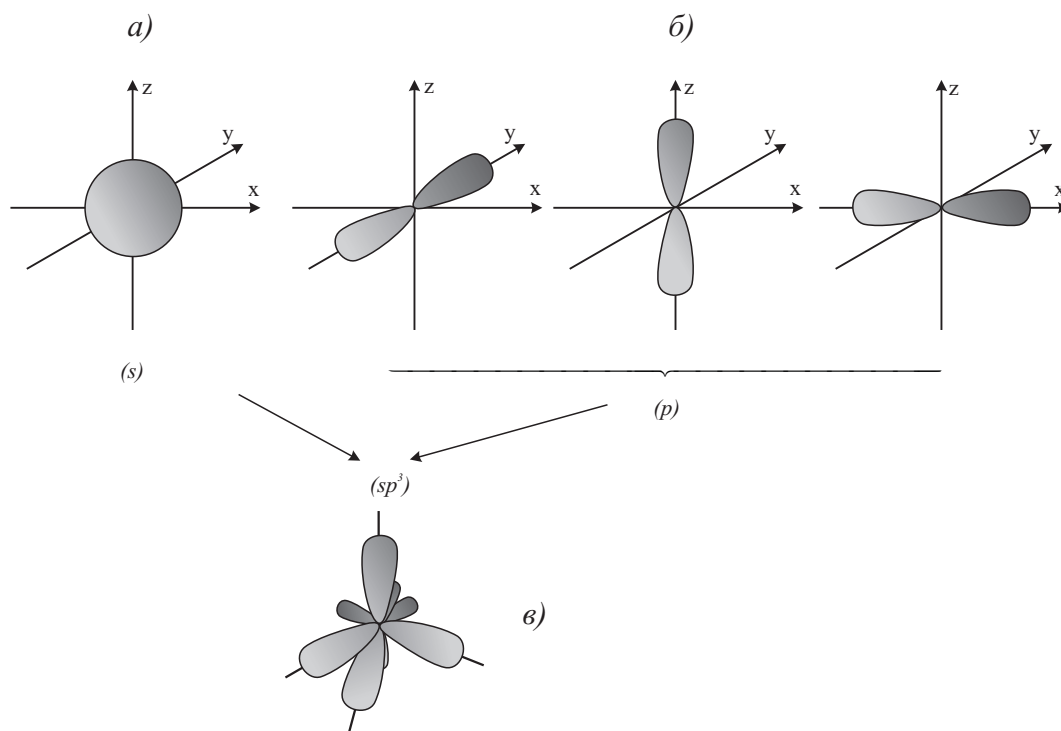


Рис. 1.2. Строение атомных орбиталей атома углерода: а) — s -гибридизация; б) — p -гибридизация; в) — sp^3 -гибридизация.

диус. Радиусы действия сил ВдВ всегда значительно больше, чем соответствующие ковалентные радиусы действия сил ковалентных связей. Это означает, что силы ВдВ намного слабее ковалентных связей в молекуле [33].

Согласно принципам квантовой теории, электрон в атоме обладает рядом дискретных энергетических уровней. Решениями уравнения Шредингера являются волновые функции, которые тесно связаны с вероятностью нахождения электрона (или электронной плотностью) в данной точке пространства. Этим функциям, или электронным орбиталям, соответствуют определенные дискретные значения доступных энергий, зависящие от величины квантовых чисел, а все промежуточные значения энергий запрещены. Согласно принципу Паули, два электрона не могут одновременно находиться в одном и том же квантовом состоянии. Каждое состояние, описываемое первыми тремя квантовыми числами, может поэтому быть занято не более чем двумя электронами с антипараллельными спинами.

Облако s -электрона сферически симметрично и распределено в пространстве вокруг ядра шаровыми слоями. Благодаря сферической симметрии s -электроны одинаково легко образуют связи во всех направлениях (рис. 1.2). Облака p -электронов сконцентрированы вдоль трех осей x, y, z декартовой системы координат, совпадаю-

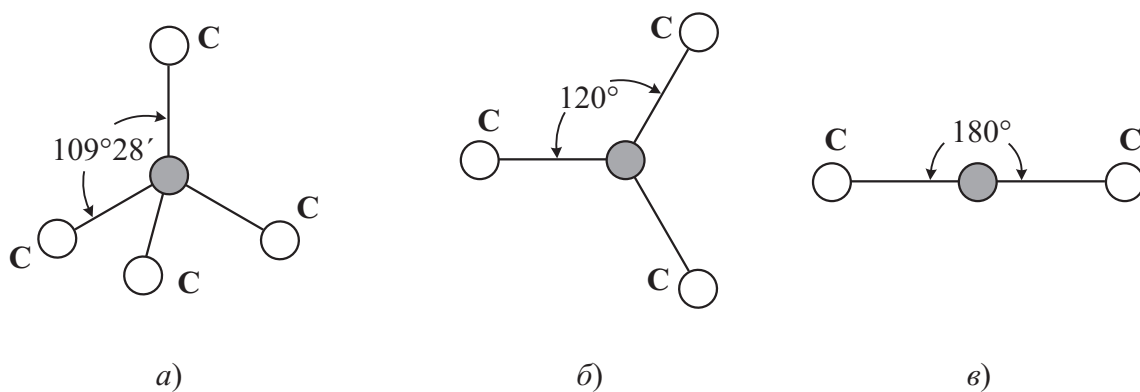


Рис. 1.3. Геометрия гибридных связей углерода: а) – тетраэдрическая, б) – тригональная, в) – дигональная

пциями с главными осями, обусловленными тремя возможными значениями магнитного квантового числа (начало координат — центр атомного ядра) [22, 33, 67]. Форма облака p -электрона напоминает вытянутую «восьмерку» (рис. 1.2,б).

Атом углерода в четырех валентном состоянии имеет один s - и три p -электрона. Однако в некоторых молекулах связи между атомами образуются валентными электронами не «чистых» $s-p-d$ -орбит, а смешанных, так называемых гибридных орбит. При гибридизации атомных орбит имеет место большее перекрывание электронных облаков соединяющихся атомов вдоль линий двухцентровых связей, чем в случае чистых, негибридизованных волновых функций (рис. 1.2,в). Благодаря этому происходит упрочнение связей и понижение энергии всей молекулы. Из условия равноценности гибридных орбит в тетраэдрических молекулах (sp^3 – гибридизация) следует, что s -уровень поровну поделен между всеми гибридными орбитами. Можно показать, что в этом случае углы между направлениями, вдоль которых гибридные функции имеют максимальные значения, имеют значения $109^\circ 28'$ [22], как углы в правильном тетраэдре. Такое расположение атомов характерно для одной из аллотропных модификаций углерода – алмаза, где атом углерода находится в центре тетраэдра, связан четырьмя эквивалентными σ -связями¹ с атомами углерода в вершинах тетраэдра (рис. 1.3,а).

Тригональная геометрия образуется при смешении одной s - и двух p -электронных орбиталей (sp^2 -гибридизация) (рис. 1.3,б). Атом углерода имеет три равноценные σ -связи, расположенные в одной плоскости под углом 120° друг к другу. Не участвующая в гибридизации p -орбиталь, расположенная перпендикулярно

¹Употребление в данном случае греческой буквы σ связано с ее соответствием латинской букве s в обозначении s -электронов.

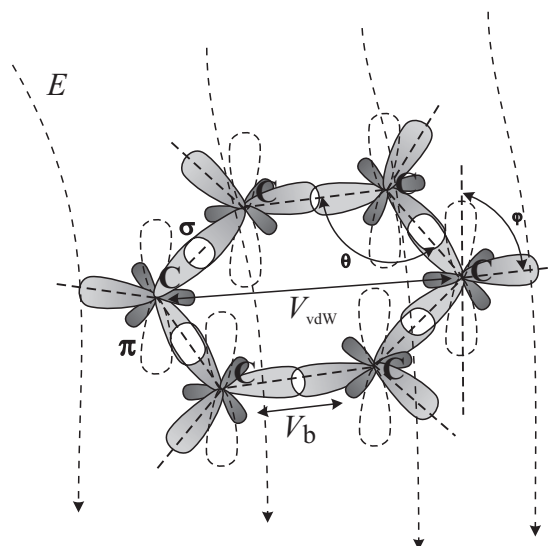


Рис. 1.4. Типичная ячейка графеновой плоскости и электронные орбитали атомов углерода. Показаны σ -связи 6-ти атомов углерода (указаны тоном) и π -связи (указаны штриховой линией) и потенциальные энергии взаимодействия атомов.

плоскости σ -связей, используется для образования π -связи с другими атомами. Такая геометрия углерода характерна для графита. Графит представляет собой расположенные параллельно графеновые плоскости.

Дигональная геометрия образуется при смешении одного s - и одного p -электронов (sp -гибридизация) (рис. 1.3,б). При этом два электронных облака вытянуты вдоль одного направления и имеют вид несимметричных гантелей. Два других p -электрона дают π -связи. Углерод с такой геометрией атома образует особую аллотропную² модификацию – карбин.

Рассмотрим графеновую плоскость. Графеновая плоскость является основой строения таких наноструктур, как, например, одно-, двух- и многослойные нанотрубки. Как уже говорилось ранее, строение графена представляет собой тригональную геометрию, где атом углерода имеет три равноценные σ -связи, расположенные в одной плоскости под углом 120° друг к другу и π -связь, расположенную перпендикулярно к плоскости графена (рис. 1.4).

Геометрическая модель однослойной нанотрубки получается путем сворачивания графеновой плоскости определенным образом. Для наглядности понимания этого процесса проще всего представить графеновую плоскость в виде набора правильных шестиугольников, в вершинах которых находятся атомы углерода. Длина стороны шестиугольника равна расстоянию между атомами углерода и составляет

²Аллотропия – от др.-греч. *αλλος* – «другой», *τροπος* – «поворот, свойство».

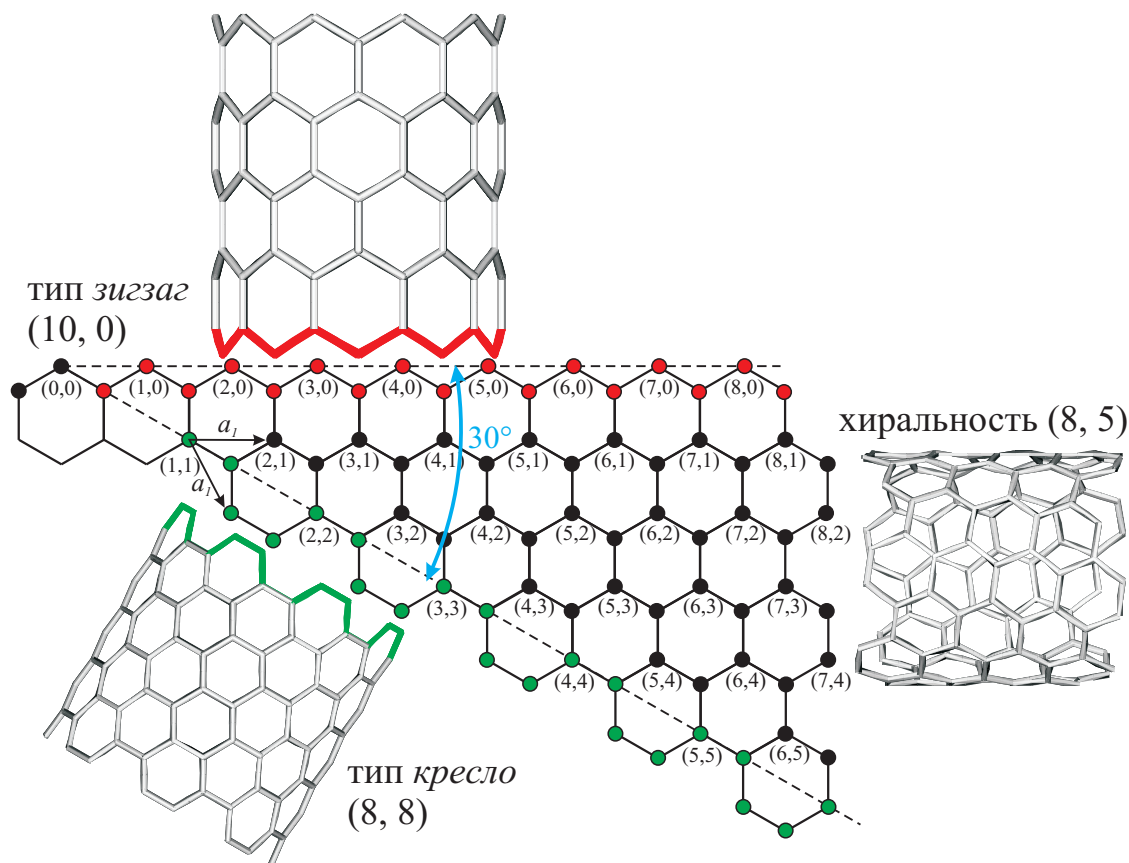


Рис. 1.5. Хиральность нанотрубки в зависимости от угла сворачивания листа графена.

0.142 нм [19, 43, 99]. В зависимости от направления сворачивания графеновой плоскости получаемые нанотрубки имеют различное строение (хиральность). Хиральность нанотрубки обозначается набором символов (m, n) , указывающих координаты шестиугольника, который в результате сворачивания плоскости графена должен совпадать с шестиугольником, находящимся в начале координат (рис. 1.5). Другой способ обозначения хиральности состоит в указании угла α между направлением сворачивания нанотрубки и направлением, в котором соседние шестиугольники имеют общую сторону. Связь между индексами хиральности (m, n) и углом α задается соотношением:

$$\sin \alpha = 3m / (2\sqrt{m^2 + n^2 + mn}) \quad (1.4)$$

Среди различных возможных направлений сворачивания графенового листа выделяются те, для которых совмещение шестиугольника (m, n) с началом координат не требует искажения его структуры. Таким направлениям соответствуют, например, углы $\alpha = 0^\circ$ (в литературе такой тип нанотрубок имеет специальное название *зигзаг*) и $\alpha = 30^\circ$ (*кресло*). На рис. 1.5 представлен лист графена, угол сворачивания

$\alpha = 30^\circ$, нанотрубка типа *zigzag* с индексами хиральности (10, 0), нанотрубка типа *кресло* с индексами хиральности (8, 8), а также нанотрубка хиральности (8, 5).

1.2 Потенциальная энергия графеноподобных наноструктур

Материал настоящего раздела основан на исследованиях, представленных в [2, 5, 17, 61, 82].

При изучении физических, механических и химических свойств наноструктур мы имеем дело со счетным количеством или атомов наноструктуры, или молекул входящих в состав наноструктуры. Для моделирования свойств наноструктуры надо учитывать энергию всех атомов, входящих в нее. Наиболее подходящим путем в этом моделировании является представление полной энергии взаимодействия атомов системы V_T в терминах потенциала межатомного взаимодействия, который, в свою, очередь является функцией координат положения атомов наноструктуры

$$V_T = V_I + \sum_i \sum_{j \neq i} V_b(r_i, r_j) + \sum_i \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq i, i} V_\theta(r_i, r_j, r_k) + \sum_i \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq i, i} V_\varphi(r_i, r_j, r_k) + V_{vdW} + V_{es} + \dots, \quad (1.5)$$

где V_I – начальная энергия системы, V_b – потенциальная энергия изменения расстояния между атомами находящимися в ковалентном взаимодействии, V_θ – потенциальная энергия изменения угла между двумя соседними ковалентными связями, V_φ – потенциальная энергия изменения угла между плоскостью графеновой ячейки и π - орбиталью, V_{vdW} – потенциальная энергия нековалентного взаимодействия, V_{es} – энергия электростатического взаимодействия в электрическом поле E , r_i – расстояние между атомами в i -ой атомной паре (рис. 1.4).

Расчеты с использованием выражений полной энергии наноструктуры через потенциалы межатомного взаимодействия являются на данный момент более предпочтительными по сравнению с квантово-механическими расчетами, позволяющим рассчитывать при помощи современных суперкомпьютеров, лишь деформации наноструктур, состоящих из нескольких сотен атомов. Первый член V_I в выражении (1.5) является начальной энергией наноструктуры, будь то кинетическая энергия упорядоченного движения наноструктуры или энергия хаотического движения атомов наноструктуры – температура наноструктуры. Второй член V_b представляет выражение энергии ковалентного взаимодействия между двумя атомами, т. е. энергию химической связи двух атомов наноструктуры. Выражение V_θ учитывает энергию изменения

угла между связями атомов наноструктуры, так как для некоторых конденсированных сред необходимо учитывать эту энергию при моделировании деформирования наноструктур [110]. В выражении (1.5) каждая из функций V может быть представлена в простой математической форме для дальнейшего ее программирования и последующего математического моделирования поведения наноструктуры. Вид (его математическое выражение) должен отвечать точности получаемых результатов математического моделирования, а также достоверно описывать физическое поведение наноструктур. Исследования последнего ряда лет позволили широко применять феноменологические потенциалы для описания взаимодействия связей как в, так и между различными материалами, будь то металлы, полуметаллы или диэлектрики. Бреннер [44, 114] указал условия, которым должна удовлетворять потенциальная функция для эффективного ее применения в вычислительном моделировании:

(1) Гибкость. Потенциальная функция взаимодействия должна подгоняться настолько это возможно большим количеством параметров. Например, для твердых систем это могут быть параметры кристаллической решетки, энергия когезии, упругие свойства, энергия формирования вакансий и поверхностная энергия.

(2) Точность. Потенциальная функция взаимодействия должна точно воспроизводить взаимодействие при определенном наборе параметров.

(3) Переносимость. Потенциальная функция взаимодействия должна хотя бы качественно воспроизводить взаимодействие на других наборах параметров.

(4) Вычислительная производительность. Аппроксимация потенциальной функции не должна быть сложной и дорогостоящей операцией с точки зрения вычислений.

Детальное изучение всех этих условий привело к аналитическим выражениям для функций потенциальных энергий взаимодействия атомов, которые в настоящее время используются при моделировании физических, химических или механических свойств наноструктур.

Так, например, для описания ковалентных и нековалентных взаимодействий наиболее часто применяется потенциал Морзе и потенциал Леннарда-Джонса.

Потенциал Леннарда-Джонса

Потенциал Леннарда-Джонса в общем случае имеет вид:

$$V_{LJ}(r) = \frac{\lambda_n}{r^n} - \frac{\lambda_m}{r^m}, \quad (1.6)$$

где r – расстояние между атомами, λ_n, λ_m – константы, характеризующие силы отталкивания и притяжения, n, m – постоянные, характерные для данного типа взаимодействия. Чаще всего этот потенциал применяется в форме потенциала Леннарда-

Джонса 6-12 [13, 14, 46, 66, 92, 110, 115, 137], где $n = 12, m = 6$:

$$V_{\text{LJ}}(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1.7)$$

где ε – глубина потенциальной ямы, σ – расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равной нулю. Параметры ε, σ – являются характеристиками молекул соответствующего вещества. Потенциал принимает минимум $V_{\text{min}} = -\varepsilon$ в точке $r = r_e = \sqrt[6]{2}\sigma$. Из (1.6) видно, что его форма совпадает с формой закона взаимодействия (1.3). По этой причине потенциал взаимодействия Леннарда-Джонса часто используют в моделировании вандерваальсовых взаимодействий атомов. Этот потенциал используется в настоящей работе для моделирования сил ВдВ.

Потенциал Морзе

Морзе предложил потенциал без степенной зависимости для вычисления энергии взаимодействия двухатомной молекулы, удовлетворяющий следующим условиям:

- (1) $V_b(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$;
- (2) V_b имеет минимум при $r = r_e$, где r_e – межатомное расстояние;
- (3) $V_b(r) \rightarrow \infty$ при $r \rightarrow 0$.

Потенциал Морзе представляется в виде [92]:

$$V_b(r) \equiv D[e^{-2\alpha(r-r_e)} - 2e^{-\alpha(r-r_e)}], \quad (1.8)$$

где r_e – расстояние между атомами в атомной паре, соответствующее минимальному значению потенциальной энергии центральных сил взаимодействия атомов, D – глубина потенциальной ямы, α – заданный параметр, определяющий форму потенциала.

В настоящей работе для учета энергии взаимодействия атомов, находящихся в ковалентном взаимодействии, используется потенциал Морзе (второе слагаемое в (1.5)). Учет энергии изменения угла между двумя соседними ковалентными связями (третье слагаемое в (1.5)) ведется по упругой деформации фиктивного стержневого элемента [5, 17, 61]. Для стержневого элемента выбирается потенциальная функция энергии деформаций линейного упругого материала, т. е.

$$V_t(r) \equiv \frac{1}{2}r_0k\varepsilon^2(r), \quad \varepsilon \equiv \frac{r - r_0}{r_0}. \quad (1.9)$$

Здесь k – модуль жесткости стержневого элемента ($k \equiv EA$, где E – модуль Юнга материала стержневого элемента, A – площадь поперечного сечения этого элемента). Внутренняя сила f_t , возникающая в стержневом элементе при его деформации, определяется через потенциальную функцию (1.9)

$$f_t = \frac{\partial V_t}{\partial r} = k\varepsilon. \quad (1.10)$$

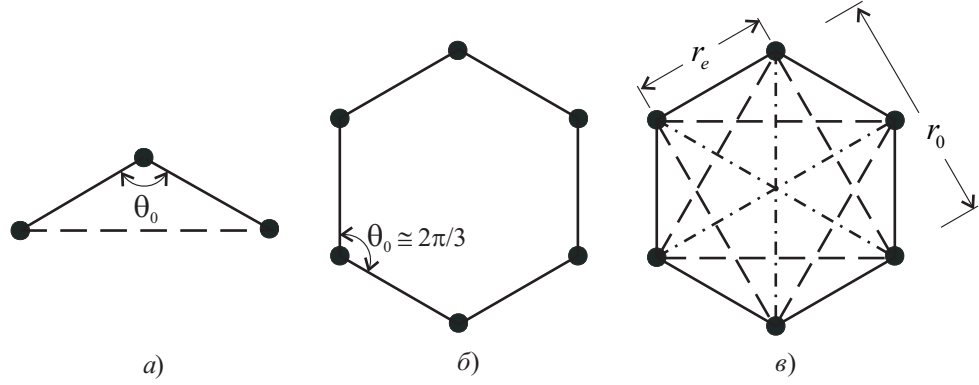


Рис. 1.6. Типы элементов, моделирующих наноструктуру: *а*) элементарный представитель наноструктуры, состоящий из двух атомных пар (сплошные линии) и стержневого элемента (штриховая линия); *б*) типовая ячейка углеродной нанотрубки; *в*) моделирование типовой ячейки атомными парами, стержневыми элементами, атомными парами (штрих-пунктирные линии), учитывающими нековалентное взаимодействие.

В дальнейшем потребуется также величина

$$c_t \equiv \frac{\partial^2 V_t}{\partial r^2} = \frac{\partial f_t}{\partial r} = \frac{k}{r_0}. \quad (1.11)$$

Роль стержневого элемента состоит в учете вклада энергии изменения угла между соседними связями элементарного представителя наноструктуры (рис. 1.6,*а*) в энергию внутренних сил наноструктуры, которую принято определять следующим образом [5, 17, 32, 61]:

$$V_\theta \equiv \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2, \quad (1.12)$$

где $\theta_0 = \theta(0)$ — начальное значение угла θ (при $t = 0$). Можно показать [5, 17, 61], что при малом изменении угла θ ($\theta - \theta_0 \ll 1$ рад) при деформировании элементарного представителя наноструктуры (рис. 1.6,*а*) энергия (1.12) изменения угла между соседними связями приближается энергией деформации стержневого элемента (1.9) с модулем жесткости:

$$k = \frac{12k_\theta}{r_0}.$$

Примечание. Вклад энергии изменения угла между соседними связями в энергию деформирования нанотрубки необходимо учитывать, так как, в противном случае, математическая модель нанотрубки в отсутствии внутренних сил находится в (нереально) неустойчивом состоянии равновесия [32].

Учет энергии нековалентного взаимодействия (контакт и самоконтакт наноструктуры) осуществляется с помощью потенциала Леннарда-Джонса.

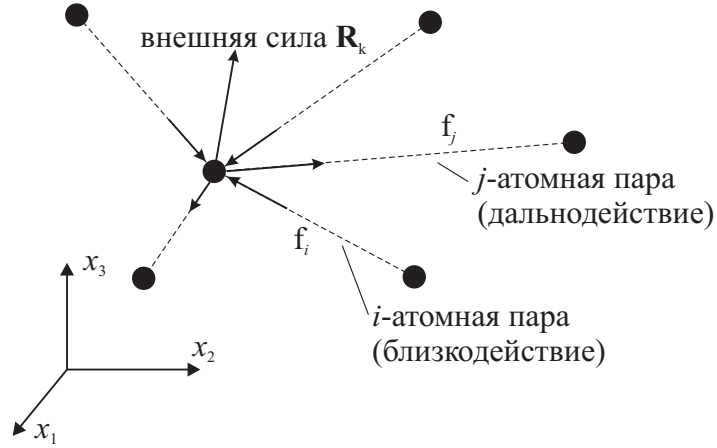


Рис. 1.7. Внутренние f_i и внешние \mathbf{R}_k силы, действующие на k -й атом.

1.3 Уравнения молекулярной механики графеноподобных наноструктур

В этом разделе излагается материал, представленный в [10, 78, 79, 80, 81]

Каждый атом наноструктуры может находиться как во взаимодействии с соседними атомами (взаимодействие ближнего порядка вследствие химических связей), так и с атомами, являющимися соседями соседей (взаимодействие дальнего порядка, как правило не являющимся результатом химической связи между атомами). Если рассмотреть типичный атом наноструктуры, то на него со стороны соседей будут действовать внутренние силы (рис. 1.7) при отклонении атома от равновесного состояния. Вследствие отклонения от равновесного состояния изменится потенциальная энергия наноструктуры (см. раздел 1.2) Предполагаем, что наноструктура состоит из K атомов. На каждый атом наноструктуры действуют центральные силы взаимодействия (силы взаимодействия с ближайшими соседями $r \approx r_e$ — силы ближнего действия и силы взаимодействия с соседями дальнего порядка $r \geq 2r_e$ — силы дальнего действия) (рис. 1.7).

Векторное уравнение баланса сил, действующих на k -й атом ($k = \overline{1, K}$) наноструктуры, можно записать в виде

$$\sum_{m=1}^{M_k} \mathbf{f}_k^m = \mathbf{R}_k - m_k \ddot{\mathbf{u}}_k, \quad (1.13)$$

где M_k — число атомов входящих в наноструктуру, \mathbf{f}_k^m — центральная сила взаимодействия в m -ой атомной паре, \mathbf{R}_k — вектор внешней силы, $m_k \ddot{\mathbf{u}}_k$ — вектор инерционных сил, \mathbf{u}_k — вектор перемещения k -го атома, $\ddot{\mathbf{u}}_k$ — вектор ускорения k -го атома (m_k —

масса атома), здесь и далее точка над величиной обозначает частную производную по параметру деформирования (времени). Предполагается, что с k -м атомом взаимодействуют M_k соседних атомов, причем число M_k достаточно произвольно: чем больше брать в учет влияние соседних атомов, включая и далеких ($r \gtrsim 2r_e$), на поведение k -го атома, тем большим становится число M_k . В большинстве случаев можно ограничиться учетом действия только ближайших соседей. Отметим, что число M_k от атома к атому может изменяться.

1.3.1 Векторная форма уравнений движений/равновесия наноструктуры

Движение каждого атома наноструктуры зависит от движения остальных атомов наноструктуры. В общем случае величины внутренних сил f_k^m центрального взаимодействия в атомной паре наноструктуры являются неизвестными, поэтому уравнение (1.13) не может решаться отдельно для каждого атома. Совокупность всех уравнений вида (1.13) для всех атомов наноструктуры порождает систему $N = 3K$ нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) второго порядка для i -х ($i = 1, 2, 3$) компонент векторов перемещений k -х ($k = \overline{1, K}$) атомов. Введем вектор-столбец компонент вектора перемещений атома наноструктуры

$$\mathbf{U} = [u_1^1, u_2^1, u_3^1, u_1^2, u_2^2, u_3^2, \dots, u_1^K, u_2^K, u_3^K]^T. \quad (1.14)$$

Здесь и далее верхний индекс « T » обозначает операцию транспонирования, а u_i^k — i -ая компонента вектора перемещения k -го атома наноструктуры. Искомую систему уравнений, дополненную начальными условиями, можно записать в виде одного векторного нелинейного уравнения движения наноструктуры

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{R} - \mathbf{M}\ddot{\mathbf{U}}, \quad \mathbf{U}(0) = \mathbf{U}_0, \quad \dot{\mathbf{U}}(0) = \mathbf{V}_0. \quad (1.15)$$

Здесь \mathbf{F} — вектор внутренних сил наноструктуры, \mathbf{R} — вектор внешних сил действующих на наноструктуру, $\ddot{\mathbf{U}}$ — вектор ускорения наноструктуры, $\mathbf{U}_0, \mathbf{V}_0$ — векторы заданных начальных перемещений и скоростей наноструктуры соответственно, $\mathbf{M} \succ 0$ — диагональная положительно определенная матрица масс с массами атомов наноструктуры на диагонали

$$diag(\mathbf{M}) = [m_1, m_1, m_1, m_2, m_2, m_2, \dots, m_K, m_K, m_K].$$

Пренебрегая инерционными членами, получаем из (1.15) нелинейное векторное уравнения равновесия наноструктуры (систему из N скалярных алгебраических

уравнений)

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{R}. \quad (1.16)$$

Следует отметить, что число N скалярных уравнений в системе (1.15) и (1.16) не зависит от M_k ($k = \overline{1, N}$) соседей рассматриваемого k -го атома.

Компоненты вектора u_i^k вектора \mathbf{U} в (1.15) и (1.16) предполагаются независимыми степенями свободы. Эти уравнения могут быть изменены при наложении ограничений на степени свободы некоторых атомов. Обозначая степени свободы u_i^k ($i = 1, 2, 3, k = \overline{1, K}$) через U_n ($n = \overline{1, N}$), можно переписать выражение (1.14) для вектора \mathbf{U} в форме

$$\mathbf{U} = [U_1, U_2, \dots, U_N]^T.$$

Накладываемые ограничения на некоторые из степеней свободы атомов наноструктуры могут быть выражены в форме

$$U_j = U_j^*(t) \quad (1 \leq j \leq N), \quad (1.17)$$

где звездочка обозначает заданную величину. Для иллюстрации такого ограничения приведем пример. Пусть заданные значения соответствуют шести компонентам вектора перемещений так, что исключают движение наноструктуры как жесткого целого (три компоненты вектора перемещения и три компоненты вращения вокруг соответствующих осей декартовой системы координат). Такое ограничение на движение наноструктуры как жесткого целого необходимо делать для решения системы уравнений (1.16). Это же ограничение можно делать и при решении системы уравнений (1.15), но ограничивать динамическое движение наноструктуры как жесткого целого в общем случае не обязательно.

Учет ограничений (1.17) в (1.15) и (1.16) может быть сделан различными способами. В первом методе ограничение (1.17) может быть наложено непосредственно на (1.15) и (1.16) путем удаления j -го уравнения из этой системы и модификации оставшихся уравнений (переноса членов, содержащих U_j в левой части уравнений в правую часть). Следуя [55] этот метод наложения ограничений может быть рассмотрен как понижение порядка системы уравнений (конденсация системы уравнений). Удалив заданные компоненты с номерами j ($1 \leq j \leq N$) из вектора \mathbf{U} и перенумеровав независимые степени свободы, вводим вектор перемещений атомов наноструктуры

$$\hat{\mathbf{U}} = [U_1, U_2, \dots, U_{NEQ}]^T$$

где $NEQ = N - J$ число независимых степеней свободы наноструктуры (J — общее число заданных ограничений вида (1.17)). Метод понижения порядка позволяет точно учесть ограничения (1.17). Но данный метод достаточно трудоемкий для

практического применения и не позволяет определять сил реакций для заданных перемещений.

Ограничения (1.17) могут быть также учтены использованием классических методов наложения ограничений на уравнения, таких как метод множителей Лагранжа или метод штрафных функций [34, 144]. Метод множителей Лагранжа позволяет точно накладывать ограничения и определять силы реакций, но не удобен для практической реализации и, более того, этот метод приводит к увеличению числа неизвестных, так как J неизвестных множителей Лагранжа добавляются к искомым N независимым степеням свободы (в этом методе U_j степени свободы уравнения (1.17) предполагаются независимыми). Общее число степеней свободы и скалярных уравнений в (1.15) и (1.16) становится равным $NEQ = N + J$. Метод штрафных функций более предпочтителен. При использовании этого метода уравнения системы (1.15) и (1.16), соответствующие j -ой степени свободы в (1.17) модифицируется, общее число уравнений остается неизменным (т. е. $NEQ = N$), а силы реакций могут быть определены. Однако сами ограничения в (1.17) удовлетворяются лишь приблизительно.

Во избежание введения дополнительных обозначений модифицированные (в результате учета ограничений одним из представленных методов) системы NEQ уравнений по-прежнему записываем в виде (1.15) и (1.16). Непосредственным сложением векторов сил, действующих на атомы в наноструктуре, выражение вектора внутренних сил \mathbf{F} получить затруднительно. Более просто получить выражение этого вектора, исходя из скалярной формы уравнений движения/равновесия [80], представленной в следующем разделе.

1.3.2 Скалярная форма уравнений движения/равновесия наноструктуры

Умножая скалярно левую и правую части векторного уравнения (1.15) на произвольный вектор $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{NEQ}$, получаем скалярное уравнение

$$\mathbf{W}^T \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{W}^T \mathbf{R} - \mathbf{W}^T \mathbf{M} \ddot{\mathbf{U}} \quad \forall \mathbf{W} \in \mathbb{R}^{NEQ}. \quad (1.18)$$

С другой стороны, подставляя конкретное значение вектора \mathbf{W} , мы можем получить каждое скалярное уравнение системы (1.15) из уравнения (1.18). Отсюда следует, что векторное уравнение (1.15) и скалярное уравнение (1.18) эквивалентны [55].

Если под вектором \mathbf{W} мы подразумеваем вектор возможных (виртуальных) скоростей атомов наноструктуры (эти скорости атомов могут и не удовлетворять уравнениям движения (1.15)), тогда уравнение (1.18) определяет баланс виртуаль-

ных мощностей: виртуальная мощность внутренних сил равна виртуальной мощности внешних сил, включая силы инерции. Если под вектором \mathbf{W} мы понимаем вектор виртуальных перемещений атомов наноструктуры $\delta\mathbf{U}$, тогда уравнение (1.18) может быть записано в виде

$$\delta\mathbf{U}^T \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \delta\mathbf{U}^T \mathbf{R} - \delta\mathbf{U}^T \mathbf{M} \ddot{\mathbf{U}} \quad \forall \delta\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{NEQ}. \quad (1.19)$$

В механике скалярное уравнение (1.18) в форме (1.19) представляется как принцип возможных перемещений. Этот принцип формулируется следующим образом: виртуальная работа внутренних сил (работа внутренних сил на возможных перемещениях) равна виртуальной работе внешних сил (включающих инерционные силы).

Выражение для виртуальной мощности внутренних сил всех пар атомов наноструктуры $w_m (m = \overline{1, M})$ входит аддитивно в виртуальную мощность внутренних сил наноструктуры w , т. е.

$$w = \sum_{m=1}^M w_m, \quad (1.20)$$

где M — общее число атомных пар наноструктуры. Здесь введены обозначения

$$w = \mathbf{W}^T \mathbf{F}(\mathbf{U}), \quad w_m = \mathbf{W}^T \tilde{\mathbf{F}}^m(\mathbf{U}) \quad \forall \mathbf{W} \in \mathbb{R}^{NEQ}, \quad (1.21)$$

где $\tilde{\mathbf{F}}^m(\mathbf{U})$ — вектор внутренних сил атомной пары. Из (1.20) и (1.21) и произвольности вектора \mathbf{W} имеем

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \sum_{m=1}^M \tilde{\mathbf{F}}^m(\mathbf{U}). \quad (1.22)$$

Представление (1.22) позволяет перейти от определения вектора внутренних сил \mathbf{F} наноструктуры к определению вектора внутренних сил $\tilde{\mathbf{F}}^m$ m -ой атомной пары. Для определения этого вектора выгоднее перейти от глобального подхода к локальному [55]. Так как для определения виртуальной мощности вектора внутренних сил атомной пары необходимы два атома, то определение виртуальной мощности вектора внутренних сил e -ой ($1 \leq e \leq M$) атомной пары может быть записано в виде

$$w_e = \mathbf{W}^{eT} \mathbf{F}^e(\mathbf{U}^e). \quad (1.23)$$

где $\mathbf{W}^e \in \mathbb{R}^6$ — произвольный вектор вида

$$\mathbf{W}^e \equiv [W_1, W_2, W_3, W_4, W_5, W_6]^T,$$

где W_1, W_2, W_3 — компоненты вектора виртуальной скорости первого атома, а компоненты W_4, W_5, W_6 — второго атома (рис. 1.8). Необходимо отметить, что номера 1

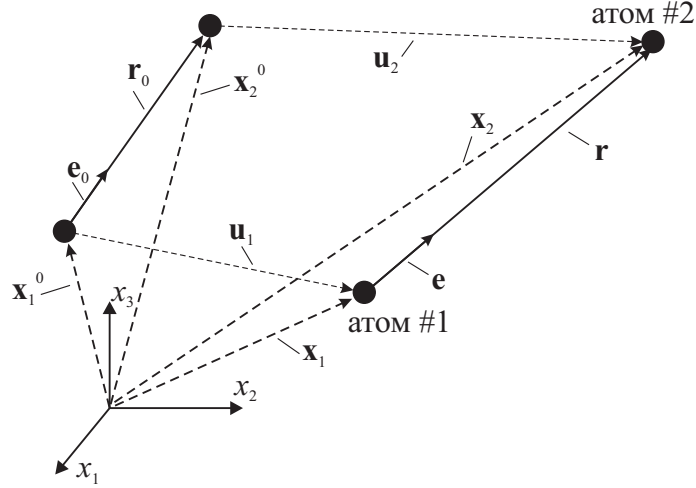


Рис. 1.8. Начальная и деформированная конфигурации k -ой атомной пары.

и 2 атомов в паре выбираются произвольно. Вектор перемещений $\mathbf{U}^e \in R^6$ атомной пары определяется следующим образом:

$$\mathbf{U}^e \equiv [u_1^1, u_2^1, u_3^1, u_1^2, u_2^2, u_3^2]^T = [U_1, U_2, U_3, U_4, U_5, U_6]^T, \quad (1.24)$$

где u_j^i — j -ая ($j = 1, 2, 3$) компонента вектора перемещений \mathbf{u}_i i -го ($i = 1, 2$) атома в рассматриваемой атомной паре. Необходимо отметить, что в (1.24) используется локальная нумерация, которая в общем случае не совпадает с глобальной нумерацией степеней свободы наноструктуры.

Мощность внутренних сил атомной пары определяется следующим образом:

$$w_e = f\dot{r}. \quad (1.25)$$

Выражение для r имеет вид

$$r = \sqrt{\mathbf{r}^T \mathbf{r}} = \sqrt{r_k r_k} \quad (k = 1, 2, 3). \quad (1.26)$$

Здесь и далее по повторяющемуся (немому) индексу проводится суммирование, r_k — k -й компонент вектора

$$\mathbf{r} \equiv \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 \Leftrightarrow \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^2 \\ x_2^2 \\ x_3^2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} x_1^1 \\ x_2^1 \\ x_3^1 \end{bmatrix}, \quad (1.27)$$

где \mathbf{x}_i — радиус вектор i -го ($i = 1, 2$) атома, а x_j^i ($j = 1, 2, 3$) — его компоненты. Из (1.26) получаем

$$\dot{r} = \frac{1}{r} r_k \dot{r}_k = e_k \dot{r}_k = \mathbf{e}^T \dot{\mathbf{r}}, \quad (1.28)$$

где $e_k = r_k/r$ ($k = 1, 2, 3$) — компоненты единичного вектора $\mathbf{e} = [e_1, e_2, e_3]^T$

$$\mathbf{e} \equiv \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad (1.29)$$

направленного вдоль отрезка соединяющего атомы #1 и #2 (рис. 1.8).

Так как

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_i^0 + \mathbf{u}_i, \quad \mathbf{x}_i^0 \equiv \mathbf{x}_i(0),$$

то, используя (1.27), вектор \mathbf{r} может быть записан в форме

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1, \quad \mathbf{r}_0 \equiv \mathbf{r}(0) = \mathbf{x}_2^0 - \mathbf{x}_1^0. \quad (1.30)$$

Здесь \mathbf{x}_i^0 — радиус вектор i -го ($i = 1, 2$) атома в начальный момент времени $t = 0$.

Из (1.30) получаем

$$\dot{\mathbf{r}} = \dot{\mathbf{u}}_2 - \dot{\mathbf{u}}_1. \quad (1.31)$$

Введем матрицу

$$\mathbf{D} \equiv [-\mathbf{I}, \mathbf{I}], \quad \mathbf{I} \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

такую, что справедливо выражение

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{D}\dot{\mathbf{U}}^e. \quad (1.32)$$

Подставляя $\dot{\mathbf{r}}$ из (1.32) в (1.28) получаем

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{B}\dot{\mathbf{U}}^e = \dot{\mathbf{U}}^{eT}\mathbf{B}^T, \quad (1.33)$$

где вектор-строка \mathbf{B} представляется в виде

$$\mathbf{B} \equiv \mathbf{e}^T\mathbf{D} = [-e_1, -e_2, -e_3, e_1, e_2, e_3]. \quad (1.34)$$

Заменяя вектор скорости $\dot{\mathbf{U}}^e$ в (1.32) произвольным вектором виртуальных скоростей атомной пары $\mathbf{W}^e \in R^6$ и подставляя $\dot{\mathbf{r}}$ в (1.25), с учетом (1.23) получаем в силу произвольности \mathbf{W}^e

$$\mathbf{F}^e(\mathbf{U}^e) = f\mathbf{B}^T. \quad (1.35)$$

Отметим, что нелинейная зависимость \mathbf{F}^e от вектора \mathbf{U}^e в (1.35) является неявной.

Используя стандартную технику метода конечных элементов (МКЭ) [11, 34, 55, 144] можно перейти от определения вектора внутренних сил атомной пары \mathbf{F}^e в локальных переменных к определению вектора внутренних сил $\tilde{\mathbf{F}}^e$ в глобальных

переменных. Введем булеву матрицу (элементы которой состоят из нулей и единиц) атомной пары \mathbf{A}^e [11, 55] такую, что

$$\mathbf{U}^e = \mathbf{A}^e \mathbf{U}, \quad \mathbf{W}^e = \mathbf{A}^e \mathbf{W}. \quad (1.36)$$

Из (1.21), (1.23) и (1.36) получаем выражение относительно вектора внутренних сил атомной пары в глобальных переменных через соответствующий вектор в локальных переменных:

$$\tilde{\mathbf{F}}^e = \mathbf{A}^{eT} \mathbf{F}^e. \quad (1.37)$$

Суммируя векторы внутренних сил $\tilde{\mathbf{F}}^e$ всех атомных пар, определяем вектор внутренних сил \mathbf{F} ансамбля атомных пар из (1.22).

Операция суммирования векторов внутренних сил атомных пар \mathbf{F}^e с использованием булевых матриц \mathbf{A}^e приводит к определению вектора внутренних сил \mathbf{F} . Эту операцию в литературе по МКЭ принято называть операцией ассемблирования. Часто для этой операции используется символ « \mathbf{A} » [55], так что равенство (1.22) может быть записано в виде

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \sum_{m=1}^M \mathbf{A}^m \mathbf{F}^m(\mathbf{U}^m) \Leftrightarrow \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \sum_{m=1}^M \mathbf{A}^{mT} \mathbf{F}^m(\mathbf{A}^m \mathbf{U}). \quad (1.38)$$

Векторное уравнение равновесия (1.16) эквивалентно скалярному уравнению

$$\mathbf{W}^T \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{W}^T \mathbf{R} \quad \forall \mathbf{W} \in \mathbb{R}^{NEQ}, \quad (1.39)$$

которое получено из (1.18) отбрасыванием второго члена в правой части.

1.3.3 Вариационная формулировка уравнений равновесия наноструктуры

Скалярное уравнение равновесия (1.39) и, следовательно, векторное уравнение (1.16) могут быть получены с использованием принципа стационарности полной потенциальной энергии (вариационной формулировки уравнений равновесия) наноструктуры, который будет сформулирован в настоящем разделе.

Рассмотрим полную потенциальную энергию наноструктуры

$$\mathbf{E}(\mathbf{U}) = V(\mathbf{U}) - \mathbf{U}^T \mathbf{R},$$

которая равна сумме потенциальных энергий внутренних сил $V(\mathbf{U})$ и внешних сил $-\mathbf{U}^T \mathbf{R}$. Потенциальная энергия наноструктуры $V(\mathbf{U})$ равна сумме потенциальных энергий центральных сил взаимодействия атомов во всех атомных парах

$$V(\mathbf{U}) = \sum_{m=1}^M \tilde{V}^m(\mathbf{U}), \quad (1.40)$$

где

$$\tilde{V}^m(\mathbf{U}) \equiv V^m[r(\mathbf{U}^m)] = V^m(\mathbf{U}^m) = V^m(\mathbf{A}^m \mathbf{U}) \quad (1.41)$$

— потенциальная энергия m -ой атомной пары. Здесь $\tilde{V}^e (1 \leq e \leq M)$ — потенциальная энергия атомной пары, выраженная через компоненты глобального вектора перемещений \mathbf{U} наноструктуры, а $V^e(\mathbf{U}^e)$ — потенциальная энергия этой пары, выраженная через вектор перемещений элемента \mathbf{U}^e атомной пары с использованием зависимости $r(\mathbf{U}^e)$, которая получена с использованием (1.26) и (1.30). Найдем дифференциал полной потенциальной энергии наноструктуры

$$dE(\mathbf{U}, d\mathbf{U}) = d\mathbf{U}^T \frac{\partial V}{\partial \mathbf{U}} - d\mathbf{U}^T \mathbf{R}, \quad (1.42)$$

или, в компонентной форме

$$dE(U_i, dU_j) = \frac{\partial V}{\partial U_k} dU_k - R_k dU_k \quad (i, j, k = \overline{1, NEQ}).$$

Дифференциал потенциальной энергии внутренних сил наноструктуры $\partial V / \partial \mathbf{U}$ определяется с помощью (1.40) и (1.41):

$$dV(\mathbf{U}, d\mathbf{U}) = d\mathbf{U}^T \frac{\partial V}{\partial \mathbf{U}} = \sum_{m=1}^M d\tilde{V}^m(\mathbf{U}) = \sum_{m=1}^M dV^m(\mathbf{U}^m).$$

Определим дифференциал потенциальной энергии внутренней силы e -й ($1 \leq e \leq M$) атомной пары наноструктуры. Из (1.41) получаем

$$dV^e(\mathbf{U}^e, d\mathbf{U}^e) = \frac{\partial V^e(r)}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial U_i} dU_i \quad (i = \overline{1, 6}), \quad (1.43)$$

где U_i — компоненты вектора перемещений атомной пары в (1.24). Сила взаимодействия между атомами в атомной паре может быть записана в виде

$$f = \frac{\partial V^e(r)}{\partial r}. \quad (1.44)$$

Из (1.26) и (1.29) получаем

$$\frac{\partial r}{\partial U_i} = \frac{1}{r} r_k \frac{\partial r_k}{\partial U_i} = e_k \frac{\partial r_k}{\partial U_i} \quad (k = 1, 2, 3, i = \overline{1, 6}). \quad (1.45)$$

Перепишем первое векторное равенство (1.30) в компонентной виде

$$r_k = r_k^0 + u_k^2 - u_k^1 \quad (k = 1, 2, 3). \quad (1.46)$$

Пользуясь (1.24), (1.46), получим из (1.45)

$$\frac{\partial r}{\partial U_1} = -e_1, \quad \frac{\partial r}{\partial U_2} = -e_2, \quad \frac{\partial r}{\partial U_3} = -e_3, \quad \frac{\partial r}{\partial U_4} = e_1, \quad \frac{\partial r}{\partial U_5} = e_2, \quad \frac{\partial r}{\partial U_6} = e_3. \quad (1.47)$$

Подставляя выражения (1.44), (1.47) в (1.43) и пользуясь (1.34), (1.35), получаем

$$dV^e = f\mathbf{B}d\mathbf{U}^e = \mathbf{F}^{eT} d\mathbf{U}^e = d\mathbf{U}^{eT} \mathbf{F}^e.$$

Из первого равенства (1.36) имеем

$$d\mathbf{U}^e = \mathbf{A}^e d\mathbf{U}. \quad (1.48)$$

Из (1.37), (1.41) и (1.48) получаем

$$dV^e(\mathbf{U}^e, d\mathbf{U}^e) = dV^e(\mathbf{A}^e \mathbf{U}, \mathbf{A}^e d\mathbf{U}) = d\tilde{V}^e(\mathbf{U}, d\mathbf{U}) = d\mathbf{U}^T \tilde{\mathbf{F}}^e. \quad (1.49)$$

Из (1.38), (1.40) и (1.49) получаем

$$dV(\mathbf{U}, d\mathbf{U}) = d\mathbf{U}^T \mathbf{F}(\mathbf{U}). \quad (1.50)$$

Так как (см. (1.42))

$$dV(\mathbf{U}, d\mathbf{U}) = d\mathbf{U}^T \frac{\partial V}{\partial \mathbf{U}}, \quad (1.51)$$

то из (1.50), (1.51) и произвольности вектора $d\mathbf{U}$ получаем:

$$\frac{\partial V}{\partial \mathbf{U}} = \mathbf{F}(\mathbf{U}) \Leftrightarrow \frac{\partial V}{\partial U_i} = F_i \quad (i = \overline{1, NEQ}). \quad (1.52)$$

Используя (1.52) запишем выражение (1.42) для дифференциала полной потенциальной энергии наноструктуры

$$dE(\mathbf{U}, d\mathbf{U}) = d\mathbf{U}^T [\mathbf{F}(\mathbf{U}) - \mathbf{R}] \quad \mathbf{U}, d\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{NEQ}. \quad (1.53)$$

В [80] сформулировано необходимое и достаточное условие стационарности полной потенциальной энергии наноструктуры. Для того чтобы наноструктура находилась в равновесном состоянии, необходимо и достаточно, чтобы ее полная потенциальная энергия принимала стационарное значение. Условие стационарности имеет вид

$$d\mathbf{U}^T [\mathbf{F}(\mathbf{U}) - \mathbf{R}] = 0 \quad \forall d\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{NEQ}. \quad (1.54)$$

Уравнение (1.54) эквивалентно скалярной форме уравнения равновесия (1.39). Это следует из отождествления векторов $d\mathbf{U}$ и \mathbf{W} .

1.3.4 Уравнения квазистатического деформирования наноструктуры

Векторное уравнение (1.16) или, эквивалентное ему, уравнение в скалярной форме (1.39) описывает равновесие наноструктуры, на которую действуют внешние

силы и/или приложены заданные перемещения к некоторым атомам наноструктуры. Так как в общем случае единственность решений этих уравнений не обеспечивается, задачу об определении равновесия наноструктуры удобно переформулировать как задачу о квазистатическом деформировании наноструктуры, последовательно определяя все равновесные конфигурации, от начальной до конечной.

Введем монотонно возрастающий параметр деформирования наноструктуры t . В качестве этого параметра можно использовать заданную силу, заданное перемещение, длину дуги в (\mathbf{U}, λ) -пространстве (\mathbf{U} – вектор перемещений атомов в наноструктуре, λ – скалярный параметр, характеризующий внешнюю силу) и т. д. Далее, для краткости, параметр t называем временем. Дифференцируя левую и правую части (1.16) по t , получаем уравнения равновесия, записанные в скоростях

$$\dot{\mathbf{F}}(\mathbf{U}) = \dot{\mathbf{R}}. \quad (1.55)$$

Так как

$$\dot{\mathbf{F}}(\mathbf{U}) = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} \dot{\mathbf{U}} \Leftrightarrow \dot{F}_i = \frac{\partial F_i}{\partial U_i} \dot{U}_i \quad (i, j = \overline{1, NEQ}), \quad (1.56)$$

то при введении матрицы Гессе (Hesse)

$$\mathbf{K} \equiv \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} = \frac{\partial^2 V}{\partial \mathbf{U} \partial \mathbf{U}} \Leftrightarrow K_{ij} \equiv \frac{\partial F_i}{\partial U_j} = \frac{\partial^2 V}{\partial U_i \partial U_j} \quad (i, j = \overline{1, NEQ}), \quad (1.57)$$

добавляя начальные условия к системе (1.55), получаем

$$\mathbf{K}(\mathbf{U}) \dot{\mathbf{U}} = \dot{\mathbf{R}}, \quad \mathbf{U}(0) = \mathbf{U}_0. \quad (1.58)$$

Здесь \mathbf{U}_0 – вектор заданных начальных перемещений. Следуя установившейся терминологии в применении МКЭ к решению задач МДТТ, матрицу \mathbf{K} назовем матрицей касательной жесткости. Из (1.57) следует симметрия этой матрицы: $\mathbf{K}^T = \mathbf{K}$. Для определения равновесных конфигураций наноструктуры необходимо решить задачу Коши (1.58) для системы квазилинейных обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ).

Элементы матрицы \mathbf{K} более удобно определять, исходя из скалярного эквивалента векторного уравнения (1.58):

$$\mathbf{W}^T \mathbf{K}(\mathbf{U}) \dot{\mathbf{U}} = \mathbf{W}^T \dot{\mathbf{R}}, \quad \forall \mathbf{W} \in R^{NEQ}. \quad (1.59)$$

Из (1.40) и (1.57) получаем

$$\mathbf{K} = \sum_{m=1}^M \tilde{\mathbf{K}}^m, \quad \tilde{\mathbf{K}}^m \equiv \frac{\partial \tilde{\mathbf{F}}^m}{\partial \mathbf{U}} = \frac{\partial^2 \tilde{V}^m}{\partial \mathbf{U} \partial \mathbf{U}}, \quad (1.60)$$

где введена матрица касательной жесткости атомной пары $\tilde{\mathbf{K}}^m$ ($1 \leq m \leq M$) при использовании глобального подхода к определению матриц и векторов атомной пары. Обозначим через v левую часть равенства (1.59):

$$v \equiv \mathbf{W}^T \mathbf{K}(\mathbf{U}) \dot{\mathbf{U}}.$$

Из (1.60) получаем

$$v = \sum_{m=1}^M \tilde{v}_m, \quad \tilde{v}_m \equiv \mathbf{W}^T \tilde{\mathbf{K}}^m(\mathbf{U}) \dot{\mathbf{U}}. \quad (1.61)$$

Определим сначала матрицу касательной жесткости атомной пары, пользуясь локальным подходом к образованию матриц и векторов атомной пары. Имеем

$$v_e = \mathbf{W}^{eT} \mathbf{K}^e(\mathbf{U}^e) \dot{\mathbf{U}}^e (= \tilde{v}^e) \quad (1 \leq e \leq M), \quad (1.62)$$

где

$$\mathbf{K}^e \equiv \frac{\partial \mathbf{F}^e}{\partial \mathbf{U}^e} = \frac{\partial^2 V^e(\mathbf{U}^e)}{\partial \mathbf{U}^e \partial \mathbf{U}^e}.$$

Получим элементы матрицы \mathbf{K}^e , исходя из равенства

$$\dot{\mathbf{F}}^e(\mathbf{U}^e) = \frac{\partial \mathbf{F}^e}{\partial \mathbf{U}^e} \dot{\mathbf{U}}^e = \mathbf{K}^e \dot{\mathbf{U}}^e \Leftrightarrow \dot{F}_i^e = \frac{\partial F_i^e}{\partial U_j^e} \dot{U}_j^e = K_{ij}^e \dot{U}_j^e \quad (i, j = \overline{1, 6}). \quad (1.63)$$

Из (1.35) имеем

$$\dot{\mathbf{F}}^e = \dot{f} \mathbf{B}^T + f \dot{\mathbf{B}}^T. \quad (1.64)$$

Нам потребуется вторая производная потенциала $V(r)$:

$$c \equiv \frac{\partial f}{\partial r} = \frac{\partial^2 V(r)}{\partial r^2}. \quad (1.65)$$

Из (1.33) и (1.65) имеем

$$\dot{f} = \frac{\partial f}{\partial r} \dot{r} = c \mathbf{B} \dot{\mathbf{U}}^e. \quad (1.66)$$

Для определения компонент вектор-строки $\dot{\mathbf{B}}$, в соответствии с (1.34) необходимо определить величины \dot{e}_k ($k = 1, 2, 3$). Пользуясь определением единичного вектора \mathbf{e} в (1.29) и равенствами (1.31), (1.33) получаем

$$\dot{e}_k = \left(\frac{r_k}{r} \right) \dot{} = \frac{\dot{r}_k}{r} - \frac{r_k}{r^2} \dot{r} = \frac{1}{r} (\dot{u}_k^2 - \dot{u}_k^1 - e_k \mathbf{B} \dot{\mathbf{U}}^e). \quad (1.67)$$

Используя (1.34) и (1.67), получаем

$$\dot{\mathbf{B}}^T = \frac{1}{r} (\mathbf{P} - \mathbf{B}^T \mathbf{B}) \dot{\mathbf{U}}^e, \quad (1.68)$$

где введена матрица

$$\mathbf{P} \equiv \mathbf{D}^T \mathbf{D} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{I} \end{bmatrix}.$$

Пользуясь (1.66), (1.68), получим из (1.63) и (1.64) выражение для локальной матрицы касательной жесткости элемента атомной пары

$$\mathbf{K}^e = c\mathbf{V}^T\mathbf{V} + \frac{f}{r}(\mathbf{P} - \mathbf{V}^T\mathbf{V}). \quad (1.69)$$

Рассмотрим подробнее выражение (1.69). Это выражение для матрицы касательной жесткости элемента является точным. В [81] показана важность учета всех членов правой части (1.69) в выражении матрицы касательной жесткости элемента атомной пары при численном моделировании деформирования и выпучивания атомных ячеек при квазистатическом деформировании. Каждое из слагаемых правой части (1.69) обусловлено учетом соответствующего слагаемого в правой части (1.64). Если атомная пара совершает трансляционное перемещение с наложенным растяжением/сжатием, но без поворота, т. е. $\dot{e}_k = 0$ ($k = 1, 2, 3$), то второй член правой части (1.64) равен нулю. Отсюда следует простая интерпретация слагаемых в (1.69) локальной матрицы касательной жесткости атомной пары: первое слагаемое обусловлено растяжением/сжатием атомной пары, а второе – ее поворотом.

Приравнивая правые части (1.62) и второго выражения в (1.61) ($e = m$) и учитывая (1.37), получаем

$$\tilde{\mathbf{K}}^e = \mathbf{A}^{eT} \mathbf{K}^e \mathbf{A}^{eT}.$$

Окончательно, матрица касательной жесткости наноструктуры определяется путем операции ассемблирования (суммирования) матриц касательных жесткостей всех атомных пар наноструктуры

$$\mathbf{K} = \sum_{m=1}^M \tilde{\mathbf{K}}^m. \quad (1.70)$$

Формула (1.70) переписывается с использованием операции ассемблирования

$$\mathbf{K}(\mathbf{U}) = \sum_{m=1}^M \mathbf{A}^m \mathbf{K}^m(\mathbf{U}^m) \Leftrightarrow \mathbf{K}(\mathbf{U}) = \sum_{m=1}^M \mathbf{A}^{mT} \mathbf{K}^m(\mathbf{A}^m \mathbf{U}) \mathbf{A}^m.$$

Приведем вариационную формулировку уравнений квазистатического движения наноструктуры, которая может оказаться полезной при исследовании вопросов единственности и устойчивости решения этих уравнений. Введем скаляр

$$I(\dot{\mathbf{U}}) \equiv \frac{1}{2} \dot{\mathbf{F}}^T \dot{\mathbf{U}} - \dot{\mathbf{U}}^T \dot{\mathbf{R}}, \quad \dot{\mathbf{U}} \in \mathbb{R}^{NEQ}. \quad (1.71)$$

Из (1.56) и (1.57) следует

$$\dot{\mathbf{F}} = \mathbf{K}(\mathbf{U})\dot{\mathbf{U}}. \quad (1.72)$$

Пользуясь (1.72) и свойством симметрии матрицы \mathbf{K} , перепишем (1.71) в виде

$$I(\dot{\mathbf{U}}) = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{U}}^T \mathbf{K} \dot{\mathbf{U}} - \dot{\mathbf{U}}^T \mathbf{R}, \quad \dot{\mathbf{U}} \in \mathbb{R}^{NEQ}.$$

В [80] показано, что вектор $\dot{\mathbf{U}}$ является решением уравнения (1.58) квазистатического движения наноструктуры тогда и только тогда, когда скалярная функция $I(\dot{\mathbf{U}})$ принимает стационарное значение. Определим дифференциал

$$dI(\dot{\mathbf{U}}, d\dot{\mathbf{U}}) = d\dot{\mathbf{U}}^T(\mathbf{K}\dot{\mathbf{U}} - \dot{\mathbf{R}}), \quad d\dot{\mathbf{U}} \in \mathbb{R}^{NEQ}. \quad (1.73)$$

Тогда условие стационарности имеет вид

$$dI(\dot{\mathbf{U}}, d\dot{\mathbf{U}}) = 0 \quad \forall d\dot{\mathbf{U}} \in \mathbb{R}^{NEQ}. \quad (1.74)$$

Принимая в (1.59) $\mathbf{W} = d\dot{\mathbf{U}}$, отмечаем, что условие стационарности (1.74) эквивалентно скалярной форме уравнения квазистатического деформирования наноструктуры.

1.4 Устойчивость равновесия и движения упругой системы материальных точек

1.4.1 Определения устойчивости решений

В этом разделе используется материал, изложенный в [58].

Важной качественной характеристикой решений ОДУ является их статус устойчивости относительно внесенных в начальные данные возмущений.

Рассмотрим систему квазилинейных ОДУ, записанную в нормальном виде

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{Y}(\mathbf{y}, t), \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0 \quad (\mathbf{y}, \mathbf{y}_0, \mathbf{Y} \in \mathbb{R}^N) \quad (1.75)$$

Решение $\tilde{\mathbf{y}}$ системы (1.75) при $\mathbf{y}_0 = \tilde{\mathbf{y}}_0$ назовем *фундаментальным*. В частности, под этим решением можно подразумевать решение уравнений равновесия (нелинейного векторного алгебраического уравнения) $\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{c}$ (вектор $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^N$ не зависит от t):

$$\mathbf{Y}(\mathbf{y}) = \tilde{\mathbf{0}}, \quad (\tilde{\mathbf{0}} \in \mathbb{R}^N). \quad (1.76)$$

Исследуем фундаментальное решение $\tilde{\mathbf{y}}(t)$ на устойчивость. Пусть $\bar{\mathbf{y}}$ — решение системы (1.75) с возмущенными начальными данными $\mathbf{y}_0 = \bar{\mathbf{y}}_0$. Введем обозначение *отклоненного движения*

$$\mathbf{x} \equiv \bar{\mathbf{y}} - \tilde{\mathbf{y}}, \quad (\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N). \quad (1.77)$$

Из (1.75) и (1.77) следует, что $\mathbf{x}(t)$ удовлетворяет решению задачи

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{X}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \quad (\mathbf{x}_0, \mathbf{X} \in \mathbb{R}^N), \quad (1.78)$$

где

$$\mathbf{X}(\mathbf{x}, t) \equiv \mathbf{Y}(\mathbf{x} + \tilde{\mathbf{y}}, t) - \mathbf{Y}(\tilde{\mathbf{y}}, t), \quad \mathbf{x}_0 \equiv \bar{\mathbf{y}}_0 - \tilde{\mathbf{y}}_0. \quad (1.79)$$

Целью является исследование поведения возмущенных решений $\tilde{\mathbf{y}}(t)$ по отношению к фундаментальному решению $\tilde{\mathbf{y}}(t)$, или, что то же самое, поведение решений $\mathbf{x}(t)$, удовлетворяющих уравнению (1.78), при различных начальных данных \mathbf{x}_0 , по отношению к тривиальному решению — *точке покоя* $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ (при $t_0 < t < \infty$).

Введем евклидову норму вектора

$$\|\mathbf{y}\| \equiv (\mathbf{y}^T \mathbf{y})^{1/2} = \sqrt{\sum_{i=1}^N y_i^2}. \quad (1.80)$$

Определение 1 (устойчивости по Ляпунову точки покоя). Тривиальное решение системы (1.78) *устойчиво по Ляпунову*, если $\forall (\epsilon > 0, t_0) \exists \delta = \delta(\epsilon, t_0)$ такое, что

$$\|\mathbf{x}_0\| < \delta \quad \Rightarrow \quad \|\mathbf{x}(t)\| < \epsilon \quad \forall t_0 < t < \infty.$$

Определение 2 (асимптотической устойчивости по Ляпунову точки покоя). Тривиальное решение системы (1.78) *асимптотически устойчиво по Ляпунову*, если оно устойчиво по Ляпунову и

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|\mathbf{x}(t)\| = 0.$$

Определение 3 (неустойчивости по Ляпунову точки покоя). Тривиальное решение системы (1.78) *неустойчиво по Ляпунову*, если $\exists (\epsilon > 0, t_0)$ такое, что $\forall \delta > 0$

$$\|\mathbf{x}_0\| < \delta \quad \Rightarrow \quad \|\mathbf{x}(t_1)\| > \epsilon \quad t_0 < t_1 < \infty.$$

Определение 4 (устойчивости точки покоя на конечном интервале времени (t_0, T)). Тривиальное решение системы (1.78) *устойчиво на конечном интервале времени* (t_0, T) , если $\forall (\epsilon > 0, t_0) \exists \delta = \delta(\epsilon, t_0)$ такое, что

$$\|\mathbf{x}_0\| < \delta \quad \Rightarrow \quad \|\mathbf{x}(t)\| < \epsilon \quad \forall t_0 < t < T \quad (T < \infty).$$

Определение 5 (неустойчивости точки покоя на конечном интервале времени

(t_0, T)). Тривиальное решение системы (1.78) *неустойчиво по Ляпунову*, если $\exists (\epsilon > 0, t_0)$ такое, что $\forall \delta > 0$

$$\|\mathbf{x}_0\| < \delta \quad \Rightarrow \quad \|\mathbf{x}(t_1)\| > \epsilon \quad t_0 < t_1 < T.$$

Примечание. В определениях 1-5 положительные величины δ и ϵ предполагаются малыми по сравнению с $\max_{t_0 < t < \infty} \|\tilde{\mathbf{y}}(t)\|$.

Пусть на интервалах времени (t_0, T) с различными значениями T решение устойчиво в смысле определения 4. При заданном значении t_0 определим критическое значение T_{cr} следующим образом: $T_{cr} = \sup T$, т. е. на интервале (t_0, T_{cr}) решение устойчиво, а на любом интервале (t_0, T_1) ($T_1 > T_{cr}$) — неустойчиво. Таким образом, значение T_{cr} отделяет интервал времени, на котором решение устойчиво, от тех значений времени $t > T_{cr}$, где решение неустойчиво.

Для того, чтобы применить общую теорию устойчивости решений ОДУ к решениям системы (1.15), перепишем эту систему в нормальном виде

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{U}} &= \mathbf{V} \\ \dot{\mathbf{V}} &= -\mathbf{M}^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{U}) + \mathbf{M}^{-1}\mathbf{R}(t), \\ \mathbf{U}(0) &= \mathbf{U}_0, \quad \mathbf{V}(0) = \mathbf{V}_0. \end{aligned} \tag{1.81}$$

Примечание. Внешние силы, действующие на систему, предполагаются мертвыми, т. е. вектор \mathbf{R} может зависеть только от времени $\mathbf{R}=\mathbf{R}(t)$, а не от компонент вектора перемещений \mathbf{U} .

Задача (1.81) записывается в виде задачи (1.75) при отождествлении

$$\mathbf{y} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{U} \\ \mathbf{V} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Y}(\mathbf{y}, t) \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{V} \\ -\mathbf{M}^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{U}) + \mathbf{M}^{-1}\mathbf{R}(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y}, \mathbf{Y} \in \mathbb{R}^N, \quad N = 2 \times NEQ. \tag{1.82}$$

Введем обозначения векторов, характеризующих отклоненное движение

$$\mathbf{q} \equiv \bar{\mathbf{U}} - \tilde{\mathbf{U}}, \quad \mathbf{v} \equiv \bar{\mathbf{V}} - \tilde{\mathbf{V}}. \tag{1.83}$$

Тогда система автономных уравнений отклоненного движения имеет вид (1.78), где

$$\mathbf{x} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{v} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X}(\mathbf{x}) \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ -\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{F}(\tilde{\mathbf{U}} + \mathbf{x}) - \mathbf{F}(\tilde{\mathbf{U}})) \end{bmatrix}. \tag{1.84}$$

1.4.2 Устойчивость решений линейной системы

Для линейной системы предполагаем линейное поведение вектора внутренних сил \mathbf{F} от вектора перемещений \mathbf{U} , т. е.

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{K}\mathbf{U} \quad (\mathbf{K} \in \mathbb{R}^{NEQ} \times \mathbb{R}^{NEQ}). \quad (1.85)$$

Здесь \mathbf{K} — симметричная матрица жесткости дискретной упругой системы. Из (1.78), (1.84) и (1.85) получаем для отклоненного движения линейную автономную однородную систему уравнений вида

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{B}\mathbf{x}, \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \quad (\mathbf{B} \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N), \quad (1.86)$$

где

$$\mathbf{B} \equiv \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{0}} & \mathbf{E} \\ -\mathbf{M}^{-1}\mathbf{K} & \hat{\mathbf{0}} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{E} \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{0}} \equiv \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \quad (\mathbf{E}, \hat{\mathbf{0}} \in \mathbb{R}^{NEQ} \times \mathbb{R}^{NEQ}). \quad (1.87)$$

Исследование устойчивости по Ляпунову тривиального решения $\mathbf{x} = 0$ линейной системы (1.86) можно провести по явному виду решений этой системы, используя стандартный аппарат решения системы линейных автономных однородных ОДУ.

Частное решение системы (1.86) ищем в виде

$$\mathbf{x} = e^{\lambda t} \boldsymbol{\alpha}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta} \\ \boldsymbol{\gamma} \end{bmatrix} \quad (\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^N, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{R}^{NEQ}). \quad (1.88)$$

Из равенства $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{q}}$ получаем следующую связь векторов $\boldsymbol{\beta}$ и $\boldsymbol{\gamma}$:

$$\boldsymbol{\gamma} = \lambda \boldsymbol{\beta}. \quad (1.89)$$

Подставляя (1.88)₁ в (1.86)₁, приходим к классической задаче по определению собственных значений λ и соответствующих им собственных векторов $\boldsymbol{\alpha}$

$$(\mathbf{B} - \lambda \check{\mathbf{E}})\boldsymbol{\alpha} = \tilde{\mathbf{0}}, \quad \check{\mathbf{E}} \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \quad (\check{\mathbf{E}} \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N). \quad (1.90)$$

Рассмотрим альтернативный подход к определению решений уравнений отклоненного движения, исходя непосредственно из линейной системы уравнений

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{K}\mathbf{q} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{q}(0) = \mathbf{q}_0, \quad \dot{\mathbf{q}}(0) = \mathbf{v}_0, \quad (\mathbf{0} \in \mathbb{R}^{NEQ}). \quad (1.91)$$

Ищем частное решение системы (1.91)₁ в виде

$$\mathbf{q} = e^{\lambda t} \boldsymbol{\beta}. \quad (1.92)$$

Подставляя (1.92) в (1.91)₁, приходим к квадратичной задаче на собственные значения

$$(\mathbf{M}\lambda^2 + \mathbf{K})\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}. \quad (1.93)$$

Можно показать эквивалентность задач (1.90)₁ и (1.93), т.е. каждому двум парам собственных значений/векторов $(\lambda_{2i-1}, \boldsymbol{\alpha}_{2i-1})$, $(\lambda_{2i}, \boldsymbol{\alpha}_{2i})$ ($i = 1, \dots, NEQ$) соответствует пара собственных значений/векторов $(\lambda_i^2, \boldsymbol{\beta}_i)$ и наоборот (при учете равенства (1.89)).

Вводя обозначения $\mu \equiv -\lambda^2$, переписываем задачу (1.93) в виде обобщенной задачи на собственные значения

$$(\mathbf{K} - \mu\mathbf{M})\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}. \quad (1.94)$$

Так как матрицы \mathbf{K} и \mathbf{M} симметричные, то:

1. собственные значения μ действительны;
2. существует NEQ \mathbf{M} -ортонормированных собственных векторов $\boldsymbol{\beta}_i$ ($i = 1, \dots, NEQ$) (напомним определение \mathbf{M} -ортонормированных собственных векторов $\boldsymbol{\beta}_i$: $\boldsymbol{\beta}_i \mathbf{M} \boldsymbol{\beta}_j = \delta_{ij}$), составляющих базис в пространстве \mathbb{R}^{NEQ} . Отсюда, в частности, следует, что явление флаттера для таких систем невозможно.

Далее классифицируем возможные типы решений (1.92) в соответствии со структурой матрицы \mathbf{K} , пользуясь известными положениями линейной алгебры.

I. Матрица $\mathbf{K} \succ 0$ — стандартная ситуация в линейной теории упругости и при деформировании наноструктур вблизи состояний равновесия с минимальной потенциальной энергией, когда граничные условия для перемещений запрещают движение дискретной структуры как жесткого целого. Располагая собственные значения в возрастающем порядке, получаем

$$0 < \mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_{NEQ}. \quad (1.95)$$

Каждому μ_j ($1 \leq j \leq NEQ$) соответствуют два комплексно сопряженных значения $\lambda_{1,2} = \pm i\omega_j$ ($(\lambda_{2j-1}, \lambda_{2j}) \rightarrow \lambda_{1,2}$), где $\omega_j \equiv \sqrt{\mu_j}$ — j -я частота собственных колебаний системы. Решение \mathbf{q} имеет вид

$$\mathbf{q} = (c_1 \cos \omega_j t + c_2 \sin \omega_j t) \boldsymbol{\beta}. \quad (1.96)$$

Таким образом, тривиальное решение устойчиво по Ляпунову, но не асимптотически.

II. Матрица $\mathbf{K} \succeq 0$ — стандартная ситуация в линейной теории упругости и при деформировании наноструктур вблизи состояний равновесия с минимальной потенциальной энергией, когда граничные условия позволяют совершать перемещения системы как жесткого целого. Имеем

$$0 = \mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_K < \mu_{K+1} \leq \mu_{K+2} \dots \leq \mu_{NEQ}. \quad (1.97)$$

Нулевые собственные значения соответствуют новым типам решений. Рассмотрим некоторое собственное значение $\mu_j = 0$ ($1 \leq j \leq K$). Этому значению соответствуют два совпадающих (кратных) собственных значения $\lambda_{1,2} = 0$. Этим двум кратным собственным значениям соответствует единственный линейно независимый собственный вектор

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\beta}_j \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}. \quad (1.98)$$

Отсюда следует, что частное решение \mathbf{q} имеет вид *дивергенции*, т. е.

$$\mathbf{q}(t) = (c_1 + c_2 t)\boldsymbol{\beta}_j, \quad \mathbf{v}(t) = c_2 \boldsymbol{\beta}_j. \quad (1.99)$$

Тривиальное решение неустойчиво по Ляпунову.

III. Матрица $\mathbf{K} \not\succeq 0$ — соответствует (локальным) участкам деформирования с ниспадающей ветвью. Получаем

$$\mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_K < 0 \leq \mu_{K+1} \leq \mu_{K+2} \dots \leq \mu_{NEQ}. \quad (1.100)$$

Для $\mu_j < 0$ ($1 \leq j \leq K$) получаем

$$\lambda_{1,2} = \pm \sqrt{-\mu_j} \Rightarrow \lambda_1 > 0, \lambda_2 < 0.$$

Тривиальное решение неустойчиво по Ляпунову, так для возмущенного движения существует вклад частного решения вида

$$\mathbf{q}_{2j-1} = e^{\lambda_1 t} \boldsymbol{\beta}_j. \quad (1.101)$$

Таким образом, *тривиальное решение линейной консервативной системы устойчиво по Ляпунову тогда и только тогда, когда матрица жесткости \mathbf{K} положительно определена ($\mathbf{K} \succ 0$).*

Отметим, что при исследовании устойчивости (по Ляпунову) линейной системы мы не различали, является ли исследуемое решение точкой равновесия ($\mathbf{U} = \mathbf{c}$) или движением ($\mathbf{U}(t)$). Но такое различие будем делать при исследовании устойчивости нелинейной системы.

1.4.3 Устойчивость равновесных состояний нелинейной системы

Пусть дискретная система находится в равновесном состоянии, так что выполнено уравнение

$$\mathbf{F}(\tilde{\mathbf{U}}) = \mathbf{R}. \quad (1.102)$$

Пусть эта система выводится из равновесного состояния малым возмущением — приложенной начальной скоростью \mathbf{V}_0 . Рассмотрим возмущенное движение упругой системы в окрестности этого равновесного состояния. Пусть $\bar{\mathbf{U}}(t)$ обозначает вектор перемещений возмущенного движения

$$\mathbf{M}\ddot{\bar{\mathbf{U}}} + \mathbf{F}(\bar{\mathbf{U}}) = \mathbf{R}, \quad \bar{\mathbf{U}}(0) = \tilde{\mathbf{U}}, \quad \dot{\bar{\mathbf{U}}}(0) = \mathbf{V}_0. \quad (1.103)$$

Используя обозначение $(1.83)_1$ для вектора перемещений отклоненного движения дискретной системы, из (1.102) и (1.103) получаем однородное уравнение относительно вектора \mathbf{q}

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{F}(\bar{\mathbf{U}}) - \mathbf{F}(\tilde{\mathbf{U}}) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{q}(0) = \mathbf{0}, \quad \dot{\mathbf{q}}(0) = \mathbf{v}_0. \quad (1.104)$$

Определим полную энергию упругой системы

$$E \equiv T + e, \quad (1.105)$$

где T — кинетическая энергия

$$T(\dot{\mathbf{U}}) \equiv \frac{1}{2} \dot{\mathbf{U}}^T \mathbf{M} \dot{\mathbf{U}}, \quad (1.106)$$

а e — полная потенциальная энергия упругой системы

$$e(\mathbf{U}) \equiv V(\mathbf{U}) - \mathbf{U}^T \mathbf{R}. \quad (1.107)$$

Получаем для равновесной конфигурации

$$E(\tilde{\mathbf{U}}, \dot{\tilde{\mathbf{U}}}) = e(\tilde{\mathbf{U}}) = V(\tilde{\mathbf{U}}) - \tilde{\mathbf{U}}^T \mathbf{R} = \text{const}, \quad (1.108)$$

и для возмущенного движения

$$E(\bar{\mathbf{U}}, \dot{\bar{\mathbf{U}}}) = T(\dot{\bar{\mathbf{U}}}) + e(\bar{\mathbf{U}}) = T(\dot{\bar{\mathbf{U}}}) + V(\bar{\mathbf{U}}) - \bar{\mathbf{U}}^T \mathbf{R}. \quad (1.109)$$

Определим

$$\Delta E \equiv E(\bar{\mathbf{U}}, \dot{\bar{\mathbf{U}}}) - E(\tilde{\mathbf{U}}, \dot{\tilde{\mathbf{U}}}) = \frac{1}{2} \dot{\mathbf{q}}^T \mathbf{M} \dot{\mathbf{q}} + \Delta e. \quad (1.110)$$

Найдем выражение для Δe

$$\begin{aligned} \Delta e \equiv e(\bar{\mathbf{U}}) - e(\tilde{\mathbf{U}}) &= \mathbf{q}^T \left(\frac{\partial e(\tilde{\mathbf{U}})}{\partial \tilde{\mathbf{U}}} \right) + \frac{1}{2} \mathbf{q}^T \left(\frac{\partial^2 e(\tilde{\mathbf{U}})}{\partial \tilde{\mathbf{U}} \partial \tilde{\mathbf{U}}} \right) \mathbf{q} + \dots = \\ &= \mathbf{q}^T (\mathbf{F}(\tilde{\mathbf{U}}) - \mathbf{R}) + \frac{1}{2} \mathbf{q}^T \mathbf{K}(\tilde{\mathbf{U}}) \mathbf{q} + \dots = \frac{1}{2} \mathbf{q}^T \mathbf{K}(\tilde{\mathbf{U}}) \mathbf{q} + \dots, \end{aligned} \quad (1.111)$$

где $\mathbf{K}(\mathbf{U})$ — симметричная матрица касательной жесткости дискретной упругой системы

$$\mathbf{K} \equiv \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} = \frac{\partial^2 V}{\partial \mathbf{U} \partial \mathbf{U}} \quad \Leftrightarrow \quad K_{ij} \equiv \frac{\partial F_i}{\partial U_j} = \frac{\partial^2 V}{\partial U_i \partial U_j} \quad (i, j = 1, \dots, NEQ). \quad (1.112)$$

Пользуясь малостью \mathbf{q} , получаем из (1.110), (1.111)

$$\Delta E = T(\dot{\mathbf{q}}) + \frac{1}{2} \mathbf{q}^T \mathbf{K}(\tilde{\mathbf{U}}) \mathbf{q}. \quad (1.113)$$

Пусть для исследуемой на устойчивость равновесной конфигурации матрица касательной жесткости положительно определена ($\mathbf{K}(\tilde{\mathbf{U}}) \succeq 0$), тогда

- (1) $(\Delta E) \dot{} = 0$ при $0 < t < \infty$;
- (2) $\Delta E > 0 \quad \forall \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}} \in \mathbb{R}^{NEQ} \quad (\mathbf{q} \neq 0 \text{ или } \dot{\mathbf{q}} \neq 0)$;
- (3) $\Delta E = 0$ при $\mathbf{q} = \dot{\mathbf{q}} = 0$.

Выполнение этих условий означает, что ΔE можно отождествить с функцией Ляпунова. Отсюда следует доказательство теоремы с помощью второго (прямого) метода Ляпунова.

Теорема (Достаточное условие устойчивости равновесных состояний дискретной упругой системы). Если $\mathbf{K}(\tilde{\mathbf{U}}) \succ 0$, то решение уравнений равновесия (1.102) устойчиво по Ляпунову.

Предположим, что исследование устойчивости по Ляпунову решения уравнения (1.102) можно проводить по первому приближению. Исследование устойчивости по первому приближению сводится к определению устойчивости тривиального решения

$$\mathbf{q} = \mathbf{0} \quad (1.114)$$

с помощью уравнения

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{K}(\tilde{\mathbf{U}})\mathbf{q} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{q}(0) = \mathbf{0}, \quad \dot{\mathbf{q}}(0) = \mathbf{v}_0, \quad (1.115)$$

полученного линеаризацией уравнения (1.104).

Анализ устойчивости по Ляпунову решения уравнений (1.114) по первому приближению не дает информации об устойчивости исходной нелинейной системы в том

случае, если матрица касательной жесткости $\mathbf{K}(\tilde{\mathbf{U}})$ положительно определена или полуопределена. Если же матрица $\mathbf{K}(\tilde{\mathbf{U}})$ не определена (имеется хотя бы один вектор $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{NEQ}$ такой, что $\mathbf{W}^T \mathbf{K}(\tilde{\mathbf{U}}) \mathbf{W} < 0$), то решение $\tilde{\mathbf{U}}$ уравнений (1.102) неустойчиво по Ляпунову.

Суммируя исследования устойчивости решения $\tilde{\mathbf{U}}$ нелинейного уравнения (1.102) вторым методом Ляпунова и по первому приближению, получаем следующие критерии устойчивости/неустойчивости этого решения

$$\mathbf{K}(\tilde{\mathbf{U}}) \begin{cases} > 0 \\ \geq 0 \\ \neq 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{array}{l} \text{статус} \\ \text{равновесной} \\ \text{конфигурации} \end{array} \begin{cases} \text{устойчив} \\ \text{неопределен} \\ \text{неустойчив} \end{cases} . \quad (1.116)$$

1.4.4 Устойчивость квазистатических движений нелинейной системы

Те точки интегральной кривой, в которых вырождается матрица \mathbf{K} , т.е. выполнено равенство

$$\det \mathbf{K} = 0, \quad (1.117)$$

назовем особыми. Пусть \mathbf{W}_i ($i = \overline{1, I}$, $I \geq 1$) — векторы, составляющие базис нуль-пространства матрицы \mathbf{K} .

Отождествляя последовательно вектор \mathbf{W} в (1.59) с векторами \mathbf{W}_i , получаем условия существования решения уравнения (1.58) в особой точке

$$\dot{\lambda} \mathbf{W}_i^T \mathbf{R}_0 = 0 \quad (i = \overline{1, I}). \quad (1.118)$$

Пусть $I = 1$ (базис нуль-пространства матрицы \mathbf{K} состоит из единственного вектора \mathbf{W}_1). Тогда возможны варианты [122]

$$(1) \dot{\lambda} = 0, \mathbf{W}_1^T \mathbf{R}_0 \neq 0, \quad (2) \dot{\lambda} \neq 0, \mathbf{W}_1^T \mathbf{R}_0 = 0 \quad (1.119)$$

В первом случае особая точка является точкой поворота, а во втором — точкой бифуркации, когда для одной точки интегральной кривой возможно определить два вектора $\dot{\mathbf{U}}$, соответствующих двум продолжениям решения.

Допускаем при $I > 1$ возможность того, что особая точка одновременно может быть как точкой поворота, так и точкой бифуркации [10, 78, 79]. Пусть $I = 2$, тогда в этом случае

$$\dot{\lambda} = 0, \mathbf{W}_1^T \mathbf{R}_0 \neq 0, \mathbf{W}_2^T \mathbf{R}_0 = 0. \quad (1.120)$$

Введем квадратичную форму

$$J(\mathbf{W}) \equiv \frac{1}{2} \mathbf{W}^T \mathbf{K}(\mathbf{U}) \mathbf{W}, \quad \mathbf{W} \in \mathbb{R}^{NEQ}. \quad (1.121)$$

Пусть равновесное состояние атомной решетки удовлетворяет уравнению (1.16). Продолжение решения из этого равновесного состояния удовлетворяет уравнению (1.58). Если для такого равновесного состояния выполняется условие (1.117), то называем его *собственным*. Сформулируем достаточное условие отсутствия собственных состояний.

Теорема (Достаточное условие отсутствия собственных состояний). Если квадратичная форма $J(\mathbf{W})$ положительно определена, т. е.

$$J(\mathbf{W}) \geq 0 \quad \forall \mathbf{W} \in R^{NEQ} \quad \text{и} \quad J(\mathbf{W}) = 0 \Leftrightarrow \mathbf{W} = \mathbf{0}, \quad (1.122)$$

то равновесное состояние не является собственным.

1.4.5 Устойчивость динамических движений нелинейной системы

Устойчивость динамических движений дискретной упругой системы будем исследовать непосредственно для уравнений движения (1.15), без их представления в нормальном виде (см. раздел 1.4.1). Обозначим через $\tilde{\mathbf{U}}$ фундаментальное решение системы (1.15), а через $\bar{\mathbf{U}}$ — решение этой же системы с возмущенными начальными условиями. Уравнения отклоненного движения имеют вид

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{F}(\bar{\mathbf{U}}) - \mathbf{F}(\tilde{\mathbf{U}}) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{q}(0) = \bar{\mathbf{U}}_0 - \tilde{\mathbf{U}}_0 \equiv \mathbf{u}_0, \quad \dot{\mathbf{q}}(0) = \bar{\mathbf{V}}_0 - \tilde{\mathbf{V}}_0 \equiv \mathbf{v}_0, \quad (1.123)$$

где \mathbf{q} обозначает вектор отклоненного движения, определенный в (1.83)₁. Пользуясь малостью вектора \mathbf{q} , получаем из (1.123) линейризованное уравнение движения (уравнение первого приближения)

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{K}\mathbf{q} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{q}(0) = \mathbf{u}_0, \quad \dot{\mathbf{q}}(0) = \mathbf{v}_0. \quad (1.124)$$

Для исследования устойчивости фундаментального решения $\tilde{\mathbf{U}}$ подход Ляпунова малопродуктивен, так как на бесконечном интервале времени решения практически всех нелинейных систем будут неустойчивы. Более продуктивным подходом к исследованию устойчивости этого решения будет выделение интервала времени с устойчивым поведением фундаментального решения. Таким образом, для исследования устойчивости динамических движений нелинейных дискретных упругих систем будем использовать определение устойчивости решения на конечном интервале времени (определение 4 раздела 1.4.1).

Введем скаляр

$$z(t) \equiv \frac{1}{2} \mathbf{q}^T(t) \mathbf{q}(t) = \frac{1}{2} (\|\mathbf{q}\|)^2, \quad (1.125)$$

характеризующий норму отклоненного движения. Приведем интегральное тождество

$$\int_0^{t'} \frac{d}{d\tau} [\dot{\mathbf{q}}^T(\tau)\mathbf{q}(\tau)] d\tau = \int_0^{t'} [\ddot{\mathbf{q}}^T(\tau)\mathbf{q}(\tau) + \dot{\mathbf{q}}^T(\tau)\dot{\mathbf{q}}(\tau)] d\tau. \quad (1.126)$$

Интегрируя левую часть, получаем

$$\dot{\mathbf{q}}^T(t')\mathbf{q}(t') - \dot{\mathbf{q}}^T(0)\mathbf{q}(0) = \int_0^{t'} [\ddot{\mathbf{q}}^T(\tau)\mathbf{q}(\tau) + \dot{\mathbf{q}}^T(\tau)\dot{\mathbf{q}}(\tau)] d\tau. \quad (1.127)$$

Пользуясь равенством $(1/2\mathbf{q}^T\dot{\mathbf{q}})' = \dot{\mathbf{q}}^T\dot{\mathbf{q}}$, перепишем тождество (1.127) в виде

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2}\mathbf{q}^T\dot{\mathbf{q}} \right) \Big|_{t=0}^{t=t'} = \mathbf{v}_0^T\mathbf{u}_0 + \int_0^{t'} [\ddot{\mathbf{q}}^T(\tau)\mathbf{q}(\tau) + \dot{\mathbf{q}}^T(\tau)\dot{\mathbf{q}}(\tau)] d\tau. \quad (1.128)$$

Интегрируя левую и правую части тождества (1.128) по t и пользуясь обозначением (1.125), получаем

$$z(t) = z(0) + \int_0^t \left\{ \mathbf{v}_0^T\mathbf{u}_0 + \int_0^{t'} [\ddot{\mathbf{q}}^T(\tau)\mathbf{q}(\tau) + \dot{\mathbf{q}}^T(\tau)\dot{\mathbf{q}}(\tau)] d\tau \right\} dt'. \quad (1.129)$$

Так как $z(t) \geq 0$, то правая часть тождества (1.129) неотрицательна. Так как член $\dot{\mathbf{q}}^T(\tau)\dot{\mathbf{q}}(\tau)$ в подынтегральном выражении в правой части этого тождества неотрицателен, то за ограниченность правой части отвечает член $\ddot{\mathbf{q}}^T(\tau)\mathbf{q}(\tau)$. В частности, если этот член положителен, то норма отклоненного перемещения постоянно растет и фундаментальное решение будет неустойчивым. Если же этот член отрицателен, то фундаментальное решение может быть как устойчивым, так и неустойчивым. Рассмотрим условия, при которых можно утверждать что-либо определенное о знаке этого члена.

Из уравнения (1.124) получаем

$$\ddot{\mathbf{q}} = -\mathbf{M}^{-1}\mathbf{K}\mathbf{q}, \quad (1.130)$$

откуда и из симметрии матриц \mathbf{M} и \mathbf{K} имеем

$$\ddot{\mathbf{q}}^T\mathbf{q} = -\mathbf{q}^T\mathbf{M}^{-1}\mathbf{K}\mathbf{q}. \quad (1.131)$$

Таким образом, если существует такой вектор \mathbf{q} и такой момент времени T_{cr} , что справедливо неравенство

$$\ddot{\mathbf{q}}^T(t)\mathbf{q}(t) > 0 \quad \text{при} \quad t > T_{cr}, \quad (1.132)$$

то $\|\mathbf{q}\|$ неограниченно растет и фундаментальное решение неустойчиво. Из (1.131), (1.132) получаем условие устойчивости/неустойчивости

$$\mathbf{K}(\tilde{\mathbf{U}}) \begin{cases} > 0 \text{ при } t < T_{cr} - \text{необходимое условие устойчивости} \\ \neq 0 \text{ при } t > T_{cr} - \text{достаточное условие неустойчивости} \end{cases}. \quad (1.133)$$

Вектор отклонения движения $\mathbf{q}(t)$, для которого при $t > T_{cr}$ выполняется неравенство $\ddot{\mathbf{q}}^T(t)\mathbf{q}(t) < 0$ (т.е. выполнено неравенство (1.132)), соответствует начальному послекритическому деформированию (выпучиванию) дискретной упругой системы. Полагая изменение элементов матрицы касательной жесткости непрерывным в зависимости от t , получаем, что в критический момент времени T_{cr} должны выполняться эквивалентные утверждения

$$\mathbf{K} \succeq 0 \Leftrightarrow \exists \boldsymbol{\beta} \neq \mathbf{0} : \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{K} \boldsymbol{\beta} = 0 \Leftrightarrow \mathbf{K} \boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} \quad (\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^{NEQ}). \quad (1.134)$$

Пусть размерность базиса нуль-пространства матрицы \mathbf{K} равна K ($1 \leq K \leq NEQ$), а линейно независимые векторы $\boldsymbol{\beta}_i$ ($i = 1, \dots, K$) составляют базис этого пространства. Деформированные конфигурации, соответствующие векторам (вектору) перемещений $\tilde{\mathbf{U}}(T_{cr}) + \alpha \boldsymbol{\beta}_i$ ($\alpha \in \mathbb{R}$ — произвольная величина), назовем *формами (формой) выпучивания*. Векторы $\boldsymbol{\beta}_i$ можно определить из решения обобщенной задачи на собственные значения — задачи об определении собственных колебаний предварительно нагруженной системы

$$(\mathbf{K}(\tilde{\mathbf{U}}(T_{cr})) - \omega^2 \mathbf{M})\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}. \quad (1.135)$$

Так как матрицы $\mathbf{K} \succeq 0$ и $\mathbf{M} \succ 0$ — симметричные, то

$$0 = \omega_1 = \omega_2 = \dots = \omega_K < \omega_{K+1} \leq \omega_{K+2} \dots \leq \omega_{NEQ} \quad (1.136)$$

и \mathbf{M} -ортонормированные собственные векторы $\boldsymbol{\beta}_i$ [34] ($i = 1, \dots, K$) составляют базис нуль-пространства матрицы \mathbf{K} . Кратность K нулевого собственного значения равна дефекту матрицы \mathbf{K} . Расположим собственные пары $(\mu_i, \boldsymbol{\beta}_i)$ ($i = 1, \dots, NEQ$) в соответствии с нумерацией собственных значений в (1.136):

$$(\mu_1, \boldsymbol{\beta}_1), (\mu_2, \boldsymbol{\beta}_2), \dots, (\mu_K, \boldsymbol{\beta}_K), (\mu_{K+1}, \boldsymbol{\beta}_{K+1}), \dots$$

Если решение $\bar{\mathbf{U}}$ уравнения (1.123) представить в виде разложения по собственным формам [34]

$$\bar{\mathbf{U}} = \sum_{i=1}^{NEQ} \alpha_i \boldsymbol{\beta}_i, \quad (1.137)$$

то пары

$$(\mu_1, \boldsymbol{\beta}_1), (\mu_2, \boldsymbol{\beta}_2), \dots, (\mu_K, \boldsymbol{\beta}_K)$$

в окрестности времени T_{cr} определяют неосциллирующие (дивергентного типа) составляющие решения $\bar{\mathbf{U}}$ в (1.137), а пары

$$(\mu_{K+1}, \boldsymbol{\beta}_{K+1}), (\mu_{K+2}, \boldsymbol{\beta}_{K+2}), \dots, (\mu_{NEQ}, \boldsymbol{\beta}_{NEQ})$$

определяют вклад в это решение осциллирующих составляющих с частотами

$$\omega_i = \sqrt{\mu_i} \quad (i = K + 1, \dots, NEQ).$$

В соответствии с представленным анализом, формы (форму) собственных колебаний наноструктуры $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_K$ с нулевой частотой называем, по аналогии с квазистатическим анализом [10, 78], формами (формой) выпучивания наноструктуры, а ситуацию, при которой матрица \mathbf{K} вырождается и, следовательно, существует решение (1.137) с вкладом в это решение форм (формы) выпучивания β_i ($i = 1, \dots, K$) — квазибифуркацией фундаментального решения [77, 83, 84].

Поведение возмущенного решения определяется решением линеаризованного уравнения (1.124) следующим образом:

$$t \begin{cases} < T_{cr} — \text{малые колебания около фундаментального решения} \\ = T_{cr} — \text{дивергенция} \\ \geq T_{cr} — \text{экспоненциальное отклонение от фундаментального решения} \end{cases} . \quad (1.138)$$

Свойство положительной определенности матрицы касательной жесткости является только необходимым условием устойчивости нелинейной упругой дискретной системы (см. (1.133)), но можно предположить, что для достаточного широкого класса рассматриваемого типа задач оно является и достаточным. Такое предположение можно сделать из определения типа решения линеаризованного уравнения (1.124) при $t < T_{cr}$ (см. (1.138)).

Выводы по главе 1

Основные выводы можно сформулировать следующим образом:

- Для моделирования свойств наноструктур принимается представление полной энергии взаимодействия атомов в терминах потенциалов межатомных взаимодействий. Представлены выражения потенциальных функций как для ковалентного так и нековалентного взаимодействия в наноструктуре.
- Выписаны векторная и скалярная формы уравнений движения/равновесия наноструктуры, представлена их вариационная формулировка.
- Проведено исследование устойчивости равновесных состояний и квазистатических/динамических движений нелинейной упругой системы.
- Сформулированы необходимые и достаточные условия устойчивости нелинейной упругой дискретной системы для достаточно широкого класса задач.

Глава 2

Процедуры численных решений нелинейных уравнений молекулярной механики и их программная реализация

2.1 Интегрирование уравнений движения (равновесия) наноструктуры

В этом разделе использован материал, представленный в [11].

Векторное уравнение движения наноструктур(ы) с заданными начальными условиями имеет вид [80] (см. (1.15))

$$\begin{aligned} \mathbf{M}\ddot{\mathbf{U}} + \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{R}, \quad \mathbf{U}(0) = \mathbf{U}_0, \quad \dot{\mathbf{U}}(0) = \mathbf{V}_0 \\ (\mathbf{F}, \mathbf{U}, \mathbf{R}, \mathbf{U}_0, \mathbf{V}_0 \in \mathbb{R}^{NEQ}, \quad \mathbf{M} \in \mathbb{R}^{NEQ} \times \mathbb{R}^{NEQ}) \end{aligned} \quad (2.1)$$

Здесь \mathbf{R} — вектор внешних сил ансамбля атомов наноструктур(ы) соответственно; $\mathbf{U}_0, \mathbf{V}_0$ — векторы заданных начальных перемещений и скоростей соответственно; $\mathbf{M} \succ 0$ — диагональная матрица масс с массами атомов наноструктуры на диагонали; точка над величиной обозначает частную производную этой величины по времени t ; NEQ — общее число независимых степеней свободы наноструктуры, т. е. число скалярных уравнений движения в (2.1).

Пренебрегая инерционными членами, получаем из (2.1) уравнения равновесия наноструктур(ы)

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{R}. \quad (2.2)$$

Уравнения квазистатического движения наноструктур(ы) получается дифференцированием левой и правой частей (2.2) по некоторому монотонно возрастающему параметру деформирования, который по-прежнему для простоты называем временем t . Используя равенство

$$\dot{\mathbf{F}} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} \dot{\mathbf{U}}, \quad (2.3)$$

получаем из (1.57) и (2.2) задачу Коши

$$\mathbf{K}\dot{\mathbf{U}} = \dot{\mathbf{R}}, \quad \mathbf{U}(0) = \mathbf{U}_0. \quad (2.4)$$

Уравнение движения (2.1) решается пошаговым интегрированием следующим образом. Предполагаем, что динамическое равновесие наноструктуры в момент времени t известно, т. е. векторы перемещений ${}^t\mathbf{U}$ и внутренних сил ${}^t\mathbf{F} \equiv \mathbf{F}({}^t\mathbf{U})$ (следуя [34], здесь и далее левым верхним индексом у некоторой величины обозначаем тот момент времени, в который эта величина рассматривается), а также векторы скоростей ${}^t\dot{\mathbf{U}}$ и ускорений ${}^t\ddot{\mathbf{U}}$ известны. Тогда уравнение (2.1) в момент времени t становится тождеством

$$\mathbf{M} {}^t\ddot{\mathbf{U}} + {}^t\mathbf{F} = {}^t\mathbf{R}, \quad (2.5)$$

а уравнения равновесия, записанные в виде

$${}^t\mathbf{F}({}^t\mathbf{U}) = {}^t\mathbf{R}, \quad (2.6)$$

соответствуют некоторой точке интегральной кривой уравнений квазистатического движения (2.4).

Обозначим через Δt приращение времени t (шаг по времени), а через $\Delta \mathbf{U}$ — приращение вектора перемещений

$$\Delta \mathbf{U} \equiv {}^{t+\Delta t}\mathbf{U} - {}^t\mathbf{U}.$$

Из (1.57), (2.1), (2.2) получаем линеаризованное уравнение движения

$$\mathbf{M} {}^{t+\Delta t}\ddot{\mathbf{U}} + {}^t\mathbf{K}\Delta \mathbf{U} = {}^{t+\Delta t}\mathbf{R} - {}^t\mathbf{F}. \quad (2.7)$$

Для пошагового интегрирования уравнений (2.4) используем метод Эйлера. Аппроксимируя этим методом уравнение (2.4) и используя равенство (2.6), получаем СЛАУ относительно вектора $\Delta \mathbf{U}$ вида

$${}^t\mathbf{K}\Delta \mathbf{U} = {}^{t+\Delta t}\mathbf{R} - {}^t\mathbf{F}, \quad (2.8)$$

Вектор перемещений ансамбля атомов наноструктур(ы) ${}^{t+\Delta t}\mathbf{U} = {}^t\mathbf{U} + \Delta \mathbf{U}$ можно уточнять стандартным методом Ньютона — Рафсона.

2.1.1 Схема Ньюмарка решения динамических задач

Метод Ньюмарка [11, 34, 144] можно рассматривать как обобщение метода линейного ускорения. Он принадлежит к семейству одношаговых методов интегрирование уравнений движения. Введем следующие константы:

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{\alpha\Delta t^2}, & a_1 &= \frac{\delta}{\alpha\Delta t}, & a_2 &= \frac{1}{\alpha\Delta t}, & a_3 &= \frac{1}{2\alpha} - 1, \\ a_4 &= \frac{\delta}{\alpha} - 1, & a_5 &= \frac{\Delta t}{2}\left(\frac{\delta}{\alpha} - 2\right), & a_6 &= a_0, & a_7 &= -a_2, \\ a_8 &= -a_3, & a_9 &= \Delta t(1 - \delta), & a_{10} &= \delta\Delta t. \end{aligned}$$

Здесь параметры α и δ выбираются из условия устойчивости и точности решения. Если $\alpha = 0.25$ и $\delta = 0.5$, то схема Ньюмарка имеет второй порядок точности интегрирования по времени, при этом отсутствует схемная диссипация. При других значениях параметров α и δ схема имеет первый порядок интегрирования по времени и появляется схемная диссипация. Для линейных задач схема Ньюмарка является безусловно устойчивой [11, 34, 144].

Ускорения, скорости и перемещения в момент времени $t + \Delta t$ выражаются через соответствующие величины в момент времени t по формулам [11, 34]

$$\begin{aligned} {}^{t+\Delta t}\ddot{\mathbf{U}} &= a_6 \mathbf{U} + a_7 {}^t\dot{\mathbf{U}} + a_8 {}^t\ddot{\mathbf{U}}, & {}^{t+\Delta t}\mathbf{U} &= {}^t\mathbf{U} + \Delta\mathbf{U}, \\ {}^{t+\Delta t}\dot{\mathbf{U}} &= {}^t\dot{\mathbf{U}} + a_9 {}^t\ddot{\mathbf{U}} + a_{10} {}^{t+\Delta t}\ddot{\mathbf{U}}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

После дискретизации по времени уравнение (2.7) записывается в виде

$${}^t\hat{\mathbf{K}}\Delta\mathbf{U} = {}^{t+\Delta t}\hat{\mathbf{R}}, \quad (2.10)$$

где

$${}^t\hat{\mathbf{K}} \equiv {}^t\mathbf{K} + a_0\mathbf{M}, \quad {}^{t+\Delta t}\hat{\mathbf{R}} \equiv {}^{t+\Delta t}\mathbf{R} + \mathbf{M}(a_2 {}^t\dot{\mathbf{U}} + a_3 {}^t\ddot{\mathbf{U}} - {}^t\mathbf{F}). \quad (2.11)$$

Таким образом после применения схемы Ньюмарка к уравнениям (2.7) получается система алгебраических уравнений (2.10) которая имеет тот же вид, что и уравнения квазистатического деформирования наноструктур (2.8).

Матрица ${}^t\hat{\mathbf{K}}$ называется эффективной матрицей касательной жесткости, а вектор ${}^{t+\Delta t}\hat{\mathbf{R}}$ — эффективным вектором внешних сил [11, 34].

2.1.2 Пошаговое интегрирование линеаризованных уравнений движения (равновесия) наноструктуры

Линейные системы (2.8) и (2.10) решаются методом Гаусса с учетом профильного строения и симметрии матриц в левых частях. Сначала проводится факториза-

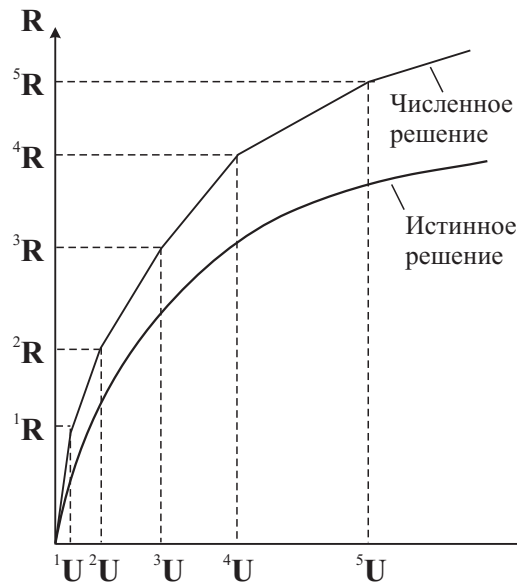


Рис. 2.1. Пошаговое интегрирование уравнений движения (равновесия) без применения итерационной процедуры уточнения решения.

ция матрицы ${}^t\hat{\mathbf{K}}$ или ${}^t\mathbf{K}$ (в случае квазистатического деформирования наноструктуры) [11, 34]:

$${}^t\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{D}}\hat{\mathbf{L}}^T, \quad {}^t\mathbf{K} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^T, \quad (2.12)$$

где \mathbf{L} , $\hat{\mathbf{L}}$ — нижние треугольные матрицы с единицами на главной диагонали, \mathbf{D} , $\hat{\mathbf{D}}$ — диагональные матрицы. После факторизации матриц прямым и обратным ходом метода Гаусса решается система уравнений (2.8) и (2.10). После решения системы (2.10) или (2.8) вектор перемещений ${}^{t+\Delta t}\mathbf{U}$ в момент времени $t + \Delta t$ находится из (2.9), для динамических задач определяются скорости и ускорения по первой и третьей формулам (2.9). Вычисляется новая (эффективная) матрица касательной жесткости и процесс счета повторяется на следующем шаге по времени. Численную процедуру пошагового решения уравнений статики (2.8) или динамики (2.10) для задачи с одной степенью свободы иллюстрирует рис. 2.1. Недостатком такой процедуры интегрирования уравнений является то, что при относительно большом шаге Δt численное решение может уйти достаточно далеко от истинного. Для исправления этой ситуации требуется применять итерационные процедуры уточнения решений.

2.1.3 Итерационные процедуры уточнения решения уравнений движения наноструктуры

Наиболее известным методом итерационного уточнения решения нелинейных задач является стандартный метод Ньютона — Рафсона. На каждой итерации реша-

ется система линейных алгебраических уравнений [11, 34, 55, 144]

$${}^{t+\Delta t}\hat{\mathbf{K}}^{(i-1)}\Delta\mathbf{U}^{(i)} = {}^{t+\Delta t}\hat{\mathbf{R}}^{(i-1)} \quad (i = 1, 2, \dots), \quad (2.13)$$

где правый верхний индекс в скобках обозначает номер итерации,

$$\Delta\mathbf{U}^{(i)} \equiv {}^{t+\Delta t}\mathbf{U}^{(i-1)} - {}^{t+\Delta t}\mathbf{U}^{(i)} \quad (2.14)$$

— вектор разности перемещений на итерациях. В качестве нулевой итерации (начальные условия для итерационного процесса) используется известное решение, полученное для момента времени t :

$${}^{t+\Delta t}\mathbf{U}^{(0)} = {}^t\mathbf{U}, \quad {}^{t+\Delta t}\hat{\mathbf{K}}^{(0)} = {}^t\hat{\mathbf{K}}, \quad {}^{t+\Delta t}\mathbf{F}^{(0)} = {}^t\mathbf{F}.$$

Итерационная процедура заканчивается как только выполняются некоторые критерии сходимости итерационного процесса и вектор $\Delta\mathbf{U}^{(i)}$ становится малой величиной. Скорости и ускорения на итерациях определяются по формулам

$$\begin{aligned} {}^{t+\Delta t}\ddot{\mathbf{U}}^{(i-1)} &= a_0\mathbf{U}^{(i-1)} - a_2{}^t\dot{\mathbf{U}} - a_3{}^t\ddot{\mathbf{U}}, \\ {}^{t+\Delta t}\dot{\mathbf{U}}^{(i-1)} &= a_1\mathbf{U}^{(i-1)} - a_4{}^t\dot{\mathbf{U}} - a_5{}^t\ddot{\mathbf{U}}. \end{aligned}$$

Здесь

$$\mathbf{U}^{(i)} \equiv {}^{t+\Delta t}\mathbf{U}^{(i)} - {}^t\mathbf{U}$$

— вектор приращений перемещений на i -ой итерации. Вектор ${}^{t+\Delta t}\hat{\mathbf{R}}^{(i-1)}$ на итерациях определяется следующим образом:

$${}^{t+\Delta t}\hat{\mathbf{R}}^{(i-1)} = {}^{t+\Delta t}\mathbf{R} - \mathbf{M} {}^{t+\Delta t}\ddot{\mathbf{U}}^{(i-1)} - {}^{t+\Delta t}\mathbf{F}^{(i-1)}$$

Схема процесса уточнения решения методом Ньютона — Рафсона представлена на рис. 2.2.

2.1.4 Критерии сходимости

Сходимость итерационного процесса можно контролировать как одним критерием так и несколькими одновременно. Рассмотрим несколько критериев окончания итерационного процесса [11, 34]:

- 1 *Критерий сходимости по перемещениям.* Считается, что сходимость достигнута, если выполнено неравенство

$$\frac{\|{}^{t+\Delta t}\mathbf{U}^{(i)} - {}^{t+\Delta t}\mathbf{U}^{(i-1)}\|_2}{\max_{0 \leq k \leq i} \|{}^{t+\Delta t}\mathbf{U}^{(k)}\|_2} \leq \epsilon_D, \quad (2.15)$$

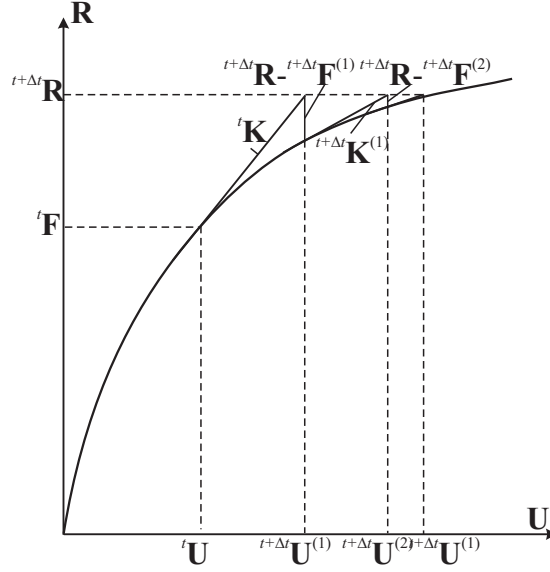


Рис. 2.2. Иллюстрация применения стандартного метода Ньютона — Рафсона в одномерной задаче.

где ϵ_D — заранее заданное небольшое число, $\|\cdot\|_2$ — евклидова норма вектора, принадлежащего пространству \mathbb{R}^n :

$$\|\cdot\|_2 \equiv \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + \dots + a_n^2}$$

Выполнение этого критерия означает, что перемещения на двух последовательных итерациях изменяется мало.

2 *Критерий сходимости по силам.* Предполагается, что сходимость итерационного процесса наступила, если

$$\frac{\|{}^{t+\Delta t}\mathbf{R} - {}^{t+\Delta t}\mathbf{F}^{(i-1)} - \mathbf{M} {}^{t+\Delta t}\ddot{\mathbf{U}}^{(i-1)}\|_2}{\max_{\tau=\Delta t, \dots, t, t+\Delta t} \|\tau\mathbf{R} - \tau\mathbf{F} - \mathbf{M}\tau\ddot{\mathbf{U}}\|_2} \leq \epsilon_F. \quad (2.16)$$

Выполнение этого критерия соответствует тому, что вектор несбалансированных сил становится малым, т. е. внутренние силы почти уравновешивают внешние.

3 *Критерий сходимости по энергии.* В этом случае критерием сходимости является выполнение следующего неравенства:

$$\frac{({}^{t+\Delta t}\mathbf{U}^{(i)} - {}^{t+\Delta t}\mathbf{U}^{(i-1)})^T ({}^{t+\Delta t}\mathbf{R} - {}^{t+\Delta t}\mathbf{F}^{(i-1)} - \mathbf{M} {}^{t+\Delta t}\ddot{\mathbf{U}}^{(i-1)})}{({}^{t+\Delta t}\mathbf{U}^{(1)} - {}^{t+\Delta t}\mathbf{U}^{(0)})^T ({}^{t+\Delta t}\mathbf{R} - {}^t\mathbf{F} - \mathbf{M} {}^t\ddot{\mathbf{U}})} \leq \epsilon_E. \quad (2.17)$$

Выполнение этого критерия означает, что приращение внутренней энергии на итерациях мало по сравнению с начальным приращением энергии (в интервале $t, t + \Delta t$).

Эффективной проверкой сходимости служит удовлетворение решения одновременно всем критериям.

2.2 Алгоритмы решения задач о выпучивании наноструктур

2.2.1 Квазистатическое деформирование наноструктур

Приведем алгоритмы решения задач о выпучивании наноструктур при их квазистатическом деформировании, разработанные в [10, 11, 34].

Рассмотрим квазистатическое деформирование наноструктуры. Пусть в некоторый момент времени τ

$$\det|\tau\mathbf{K}| = 0. \quad (2.18)$$

Следуя [70], назовем такие деформированные состояния наноструктуры *собственными состояниями*. Критические нагрузки (внешние силы), отвечающие собственным состояниям, назовем нагрузками собственного состояния [10]. Нагрузкам собственного состояния соответствует нетривиальное решение \mathbf{W}_{eig} (собственный вектор) однородной задачи

$$\tau\mathbf{K}\mathbf{W} = \mathbf{0}. \quad (2.19)$$

Значение τ параметра t , при котором выполняется равенство (2.18), назовем собственным значением задачи (2.19).

Различаем три типа нагрузок собственного состояния:

- максимальные нагрузки;
- бифуркационные нагрузки;
- максимальные нагрузки с бифуркацией решений.

Максимальной нагрузке соответствует локальный максимум на кривой зависимости нагрузки от характерного перемещения (см. рис. 2.3,*а*). Бифуркационной нагрузке — ветвление решений (см. рис. 2.3,*б*). Кроме того, может встретиться ситуация, когда максимальная нагрузка сопровождается ветвлением решений (см. рис. 2.3,*в*). Реальные наноструктуры в силу некоторых отклонений от идеальных (в заданных физических свойствах или в приложенных нагрузках) обычно следуют не по основному (фундаментальному) пути (см. рис. 2.3), характеризуемого гладкой кривой в пространстве (\mathbf{U}, t) (\mathbf{U} — вектор перемещения наноструктуры, t — параметр деформирования), а по боковой ветви. Поэтому важно определить как бифуркационные

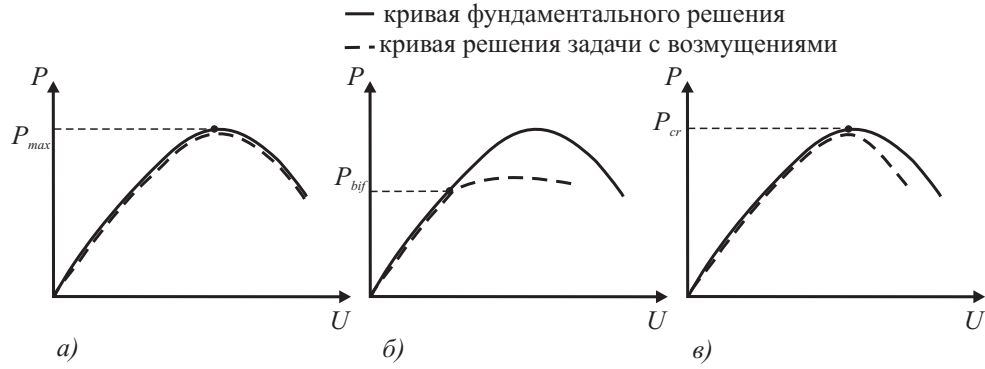


Рис. 2.3. Классификация собственных состояний наноструктуры (P — нагрузка, U — характерное перемещение): а) — максимальная нагрузка P_{max} ; б) бифуркационная нагрузка P_{bif} ; в) — максимальная нагрузка с бифуркацией решений $P_{cr} = P_{max} = P_{bif}$.

нагрузки, так и собственные векторы задачи (2.19). В бифуркационных состояниях собственные векторы характеризуют начальную стадию движения наноструктуры на ветвях решений отличных от фундаментального.

Пусть в пошаговом решении уравнений равновесия собственные состояния наноструктуры достигаются между двумя соседними моментами времени: t_1 и $t_2 = t_1 + \Delta t$, т. е. момент времени τ , для которого справедливо (2.18), заключен в интервале $\tau \in (t_1, t_2)$. Как правило, численные расчеты начинаются от таких равновесных конфигураций наноструктуры, при которых симметричная матрица ${}^t\mathbf{K}$ является положительно определенной. Для положительно определенной матрицы ${}^t\mathbf{K}$ в разложении (2.12) все диагональные элементы матрицы \mathbf{D} положительны [34]. Равенству (2.18) соответствует появление нулевых диагональных элементов матрицы \mathbf{D} . В численных расчетах сигналом попадания параметра деформирования в интервал (t_1, t_2) служит смена знака диагонального элемента (или диагональных элементов) матрицы \mathbf{D} в разложении (2.12) между моментами времени t_1 и t_2 . Смена знака одного диагонального элемента соответствует одному (изолированному) собственному значению τ задачи (2.19) с единственным собственным вектором \mathbf{W}_{eig}^1 . При достаточно малом шаге Δt интегрирования уравнений равновесия атомной решетки появление нескольких отрицательных диагональных элементов в интервале времени (t_1, t_2) говорит либо о плотном спектре собственных значений, либо о наличии кратных собственных значений с несколькими линейно независимыми собственными векторами \mathbf{W}_{eig}^i ($i > 1$), составляющими базис подпространства собственных векторов (размерность подпространства совпадает с кратностью корня τ). Так как непосредственно из (2.19) собственные векторы найти трудно, то нижние собственные значения и собственные векторы ищутся из решения обобщенной задачи по определению соб-

ственных значений μ и соответствующий им собственных векторов \mathbf{W}

$$({}^{t_1}\mathbf{K} - \mu\Delta\mathbf{K})\mathbf{W} = 0, \quad (2.20)$$

где

$$\Delta\mathbf{K} = {}^{t_1}\mathbf{K} - {}^{t_2}\mathbf{K}, \quad (2.21)$$

$$\mu = \frac{\tau - t_1}{\Delta t}. \quad (2.22)$$

Задача (2.19) сводится к задаче (2.20) в предположении о линейном законе изменения матрицы касательной жесткости на интервале (t_1, t_2)

$${}^\tau\mathbf{K} = {}^{t_1}\mathbf{K} - \mu\Delta\mathbf{K}. \quad (2.23)$$

Такое предположение возможно при выборе шага Δt достаточно малым. Задача (2.20) называется линеаризованной задачей по определению собственных состояний наноструктуры. Для решения этой задачи можно использовать известные методы решения обобщенной задачи по определению собственных значений, например, метод вычисления определителя и метод итераций в подпространстве [34].

Таким образом, если при пошаговой процедуре решения уравнений равновесия наноструктуры на интервале времени (t_1, t_2) обнаружена смена знака некоторого диагонального элемента (или элементов) матрицы \mathbf{D} в разложении матрицы касательной жесткости (2.12), то решается задача (2.20) и определяется столько нижних собственных значений и соответствующих им собственных векторов, сколько диагональных элементов изменило знак. По найденному собственному значению μ из (2.22) находится собственное значение τ

$$\tau = t_1 + \mu\Delta t. \quad (2.24)$$

Как метод вычисления определителя, так и метод итераций в подпространстве требуют положительной определенности матриц в системе (2.20). Рассмотрим случай, когда во всей истории деформирования наноструктуры собственное состояние встречается впервые. Тогда матрица ${}^{t_1}\mathbf{K}$ является положительно определенной. В то же время матрица $\Delta\mathbf{K}$ может и не обладать свойством положительно определенности. Для этого в [35] предложена другая формулировка обобщенной задачи на собственные значения. Для представления матрицы касательной жесткости на интервале (t_1, t_2) используется формула линейной экстраполяции

$${}^\tau\mathbf{K} = {}^{t_0}\mathbf{K} + \nu({}^{t_1}\mathbf{K} - {}^{t_0}\mathbf{K}), \quad (2.25)$$

где $t_0 = t_1 - \Delta t$. В [35] показано, что при такой экстраполяции задача (2.19) сводится к следующей обобщенной задаче на собственные значения

$$({}^{t_1}\mathbf{K} - \gamma {}^{t_0}\mathbf{K})\mathbf{W} = 0, \quad (2.26)$$

где

$$\gamma = 1 - \frac{1}{\nu}.$$

После определения нижнего собственного значения γ , по линейной экстраполяции находим собственное значение задачи (2.19)

$$\tau = t_1 + \frac{\gamma}{1 - \gamma} \Delta t. \quad (2.27)$$

В задаче (2.26) в рамках сделанного предположения о том, что собственное состояние встречается впервые на интервале (t_1, t_2) , обе матрицы ${}^{t_0}\mathbf{K}$ и ${}^{t_1}\mathbf{K}$ положительно определены, поэтому здесь можно использовать упомянутые выше методы решения обобщенных задач на собственные значения. Необходимо отметить, что интерполяция (2.23) дает более точное представление матрицы ${}^{\tau}\mathbf{K}$ на интервале (t_1, t_2) , чем экстраполяция (2.25). Поэтому задача (2.26) решается только в том случае, если матрица $\Delta\mathbf{K}$ не является положительно определенной, в противном случае решается задача (2.20).

Собственные векторы задачи (2.19) дают информацию только о начале посткритического поведения наноструктуры. Для того чтобы получить посткритическое решение наноструктуры для боковой ветви, полученной в результате бифуркации решений, можно воспользоваться методикой представленной в [122]. В настоящей работе используется более простой путь получения решения на боковой ветви, представленный в [10]. Как правило, бифуркация решения происходит для симметричных структур. Нарушая симметрию введением некоторых неидеальностей (они могут быть как в определении констант потенциалов взаимодействия атомов в наноструктуре, ее геометрии, так и во внешних силах), при достаточно малой величине возмущений можно получить решение для посткритического деформирования, достаточно близкое к боковой ветви (см. рис. 2.3, б, в)

2.2.2 Динамическое деформирование наноструктур

Перед началом интегрирования уравнения (1.15) решаем вспомогательную задачу по определению частот и форм собственных колебаний наноструктуры

$$({}^0\mathbf{K} - \mu\mathbf{M})\Phi = \mathbf{0}, \quad (2.28)$$

где ${}^0\mathbf{K}$ — матрица касательной жесткости, определенная в момент времени $t = 0$. Упорядочим собственные значения μ_i ($i = 1, \dots, NEQ$) в возрастающем порядке

$$\mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_{NEQ}.$$

Для старта предлагаемого ниже алгоритма решения задачи деформирования и выпучивания наноструктуры необходимо, чтобы в начальный момент времени $t = 0$ наноструктура находилась в устойчивом состоянии равновесия. Устойчивость этого состояния обеспечивается условием ${}^0\mathbf{K} \succ 0$ [79]. Необходимым и достаточным условием положительной определенности матрицы ${}^0\mathbf{K}$ является выполнение неравенства $\mu_1 > 0$. Далее полагаем, что условие $\mu_1 > 0$ выполнено и в результате решения вспомогательной задачи (2.28) определены собственные пары (ω_i, Φ_i) . Пусть

$$(\omega_1, \Phi_1), (\omega_2, \Phi_2), \dots, (\omega_I, \Phi_I)$$

— собственные пары с частотами $\omega_i \equiv \sqrt{\mu_i}$ ($i = 1, \dots, I$) и соответствующими М-ортонормированными формами Φ_i собственных колебаний, где $I \leq NEQ$ — число собственных форм, вклад в решение задачи которых желательно воспроизвести при пошаговом интегрировании уравнения (1.15). Для достаточно хорошего воспроизведения высшей из выбранных I нижних собственных форм (период колебаний этой формы в окрестности начального момента времени $t = 0$ равен T_I) шаг интегрирования по времени Δt оценивается равенством [34]

$$\Delta t \approx \frac{T_I}{10}, \quad T_I = \frac{1}{\tilde{\omega}_I}, \quad \tilde{\omega}_i \equiv \frac{\omega_i}{2\pi} \quad (i = 1, \dots, NEQ). \quad (2.29)$$

Для каждого дискретного значения момента времени t при интегрировании уравнения (1.15) проводятся факторизации симметричных матриц ${}^t\hat{\mathbf{K}}$ и ${}^t\mathbf{K}$ [34]

$${}^t\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{D}}\hat{\mathbf{L}}^T, \quad {}^t\mathbf{K} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^T, \quad (2.30)$$

где $\hat{\mathbf{L}}$ и \mathbf{L} — нижние треугольные матрицы, а $\hat{\mathbf{D}}$ и \mathbf{D} — диагональные матрицы. Первая факторизация в (2.30) требуется для численного интегрирования уравнения (1.15) при решении системы алгебраических уравнений (2.10), а вторая факторизация производится в том случае, если одновременно с задачей деформирования наноструктуры проводится анализ устойчивости полученного решения. Цель второй факторизации в (2.30) состоит в отслеживании изменения знаков диагональных элементов матрицы \mathbf{D} в силу следующих эквивалентных утверждений, справедливых для симметричной матрицы \mathbf{K} :

$$\begin{aligned} \mathbf{K} \succ 0 &\Leftrightarrow d_{ii} > 0 \quad (i = 1, \dots, NEQ); \\ \mathbf{K} \succeq 0 &\Leftrightarrow d_{ii} \geq 0 \quad (i = 1, \dots, NEQ), \quad \exists j \ (1 \leq j \leq NEQ) : d_{jj} = 0; \\ \mathbf{K} \not\succeq 0 &\Leftrightarrow \exists j \ (1 \leq j \leq NEQ) : d_{jj} < 0. \end{aligned} \quad (2.31)$$

В соответствии с утверждениями в (2.31), при пошаговом интегрировании уравнения (1.15) определяем такой сегмент времени $[t_1, t_2 = t_1 + \Delta t]$, на котором один или более элементов d_{jj} ($1 \leq j \leq NEQ$) матрицы \mathbf{D} становятся впервые неположительными ($d_{jj} \leq 0$). Отметим, что в предположении об устойчивости равновесной конфигурации наноструктуры, в начальный момент времени ($t = 0$) должны выполняться неравенства $d_{ii} > 0$ ($i = 1, \dots, NEQ$). В соответствии с критерием выпучивания наноструктуры (см. 1.4.5) полагаем $T_{cr} \in [t_1, t_2]$, т.е. точка квазибифуркации впервые встречается в этом сегменте времени.

Примечание. Из общей теории ОДУ [23] следует, что решение динамической задачи (1.15) единственно. Но при выборе достаточно большого шага по времени Δt ($\Delta t \gg T_1$), т.е. при игнорировании инерционных эффектов деформирования наноструктуры, из (2.11) следует равенство ${}^t\hat{\mathbf{K}} \approx {}^t\mathbf{K}$. Отсюда следует, что, как и при решении квазистатической задачи, в недостаточной степени аппроксимированное приближенное решение уравнения (1.15) также может иметь неединственное решение в точке квазибифуркации, т.е. в этом случае точка квазибифуркации превращается в точку бифуркации.

Для определения форм выпучивания, соответствующих нулевым собственным значениям, решаем обобщенную задачу на собственные значения

$$({}^t\mathbf{K} - \omega^2\mathbf{M})\Phi = \mathbf{0}. \quad (2.32)$$

Если точка квазибифуркации встречается впервые в истории деформирования наноструктуры (т.е. эта точка разделяет устойчивые и неустойчивые режимы деформирования наноструктуры), тогда матрица ${}^t\mathbf{K}$, как правило, положительно определена (${}^t\mathbf{K} \succ 0$) и, следовательно, нижняя частота колебаний $\omega_1 > 0$. Отметим, что, теоретически, ${}^t\mathbf{K}$ может оказаться положительно полуопределенной (${}^t\mathbf{K} \succeq 0$), но в практике численного моделирования авторы настоящей работы с таким (маловероятным) событием не сталкивались.

Часто при исследовании процессов деформирования наноструктуры, обладающей некоторыми симметриями (граничных условий, видов деформирования и т.д.), нас интересует статус устойчивости симметричной формы деформирования по отношению к возмущениям в геометрии, приложениях внешних сил и т.д., приводящим к отклонениям от этой симметричной формы. В этом случае под фундаментальным решением естественно подразумевать решение, обладающее симметриями, а под формой выпучивания — форму равновесной конфигурации с утерянными свойства-

ми симметрии. Если не накладывать специально условия симметрии на характер деформирования наноструктуры, то основной проблемой получения фундаментального решения задачи деформирования симметричной наноструктуры при численном моделировании ее деформирования является конечность представления чисел в компьютере. В настоящей работе используется двойная точность арифметических вычислений при численном решении задач деформирования наноструктуры (учитывается 16 значащих цифр при вычислениях с плавающей запятой). Тем не менее, при моделировании деформирования наноструктуры даже такое решение задачи «без возмущений» приводит к несимметричному выпучиванию наноструктуры: возмущение в деформирование наноструктуры вносят неточные представления в компьютере параметров (геометрии, внешних сил и т.д.) наноструктуры, имеющие порядок 10^{-16} от точных значений. Как правило, такое выпучивание происходит в момент времени, отдаленный по времени от точки квазибифуркации (см. п. 4).

Наряду с возмущениями, вносимыми вычислениями на компьютере в математическую модель деформирования наноструктуры, мы целенаправленно вводим два следующих типа возмущений. Во-первых, мы вводим параметры геометрии наноструктуры с учетом только первых пяти значащих цифр. Такой ввод данных соответствует случайному возмущению вектора начальных перемещений U_0 порядка 10^{-5} от характерных геометрических параметров наноструктуры. Расчеты с такими возмущениями имитируют численное моделирование деформирования наноструктуры вычислениями с простой точностью арифметических операций на используемых авторах компьютерах (при вычислениях с плавающей запятой числа с простой точностью представляются шестью значащими цифрами). Во-вторых, дополнительно к исходным силам, действующим на наноструктуру, мы вводим силы малой величины, нарушающие симметрию деформирования наноструктуры. Приложение этих сил к атомам наноструктуры и направление их действия надо согласовывать с формой(ми) выпучивания Φ_i ($i = 1, \dots, K$), полученной(ыми) в фундаментальном решении задачи.

2.3 Алгоритмы решения задач о контакте/самоконтакте наноструктур(ы)

Элементы атомной пары (#15), соответствующие ковалентным взаимодействиям атомов наноструктур, введены в библиотеку элементов пакета PIONER [10, 65], элементы стержни (#1), энергия деформаций которых аппроксимирует энер-

гию изменения угла между соседними ковалентными связями, являются стандартными элементами этого пакета. Отдельные наноструктуры (в настоящей работе отождествляем их с супермолекулами) набираются из элементов атомных пар и стержневых элементов. Предполагается, что ковалентные связи отдельной наноструктуры не изменяются в процессе ее деформирования. Элементы атомных пар (#31), соответствующие нековалентным ВдВ связям атомов наноструктуры, являются «виртуальными». Эти элементы создаются при условии того, что расстояние между потенциально контактирующими атомами не превышает значения r_{cof} (значение r_{cof} задается исследователем).

Представим алгоритм учета контактных взаимодействий наноструктур. Начальным шагом построения математической модели контакта наноструктур является введение атомов всего ансамбля наноструктур с координатами их положений в декартовой системе координат. Далее формируются наноструктуры, состоящие из элементов типов #1 и #15. Следующим шагом является создание верхней треугольной части (включающей диагональные элементы) квадратной таблицы (симметричной матрицы) возможного контакта наноструктур(ы), которая строится по аналогии с таблицами возможных контактов деформируемых твердых тел, принятых в пакете MSC.Marc [95]. Заполненные элементы таблицы на главной диагонали включают в работу пакета PIONER программные модули учета возможного ВдВ взаимодействия атомов наноструктуры, номер которой совпадает с номером столбца/строки таблицы (включается опция самоконтакта рассматриваемой наноструктуры); если соответствующий элемент таблицы не отмечен (любым знаком), то учет самоконтакта наноструктуры не производится. Заполненные внедиагональные элементы таблицы включают в работу этого пакета программные модули учета возможного ВдВ взаимодействия атомов наноструктур с номерами, равными номерам столбцов и строк таблицы (включается опция создания контактной пары наноструктур).

При включении опции учета контакта наноструктур(ы) на каждом шаге по времени и на каждой итерации метода Ньютона — Рафсона определяется расстояние между атомами наноструктур(ы) (если для них включена опция самоконтакта) или между атомами контактных(ной) пар(ы) наноструктур и, при выполнении учета действия сил ВдВ (расстояние между атомами не превышает значения r_{cof}) создается контактная пара атомов, производящая вклад в вектор внутренних сил \mathbf{F} и матрицу касательной жесткости \mathbf{K} (рис. 2.4). При дальнейшем выходе из контакта ($r > r_{\text{cof}}$) контактная пара атомов ликвидируется.

При анализе самоконтакта наноструктуры производится дополнительная (к описанной выше) проверка учета действия сил ВдВ, так как создание контактной

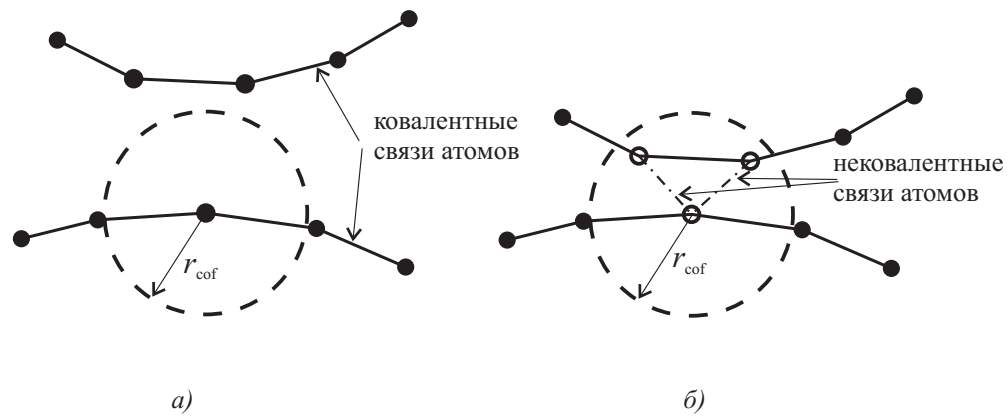


Рис. 2.4. Иллюстрация создания контактных пар атомов, учитывающих действие сил ВдВ (вдоль штрих-пунктирных линий) для наноструктур(ы) в различные моменты времени ее движения: *а)* до вхождения в контакт; *б)* в контакте.

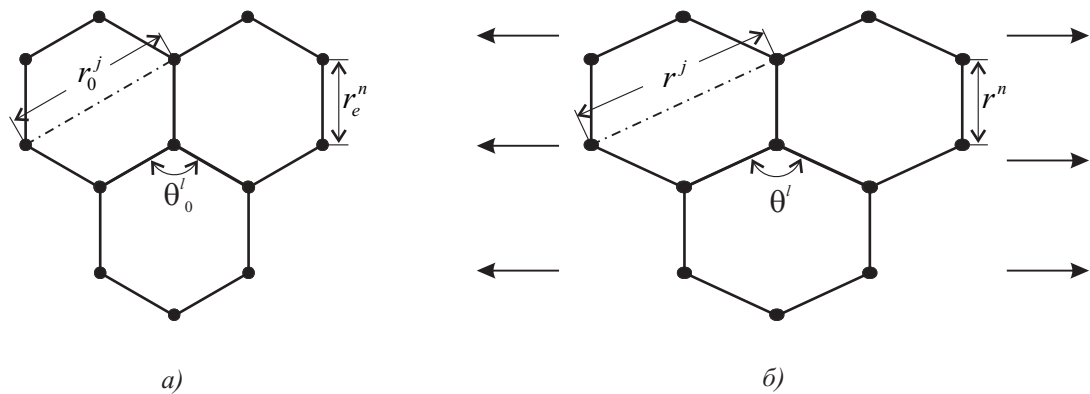


Рис. 2.5. Геометрия графеноподобной наноструктуры с ковалентными (сплошные линии) и нековалентными связями (штрихпунктирные линии) атомов: *а)* в недеформированном (начальном) состоянии; *б)* в деформированном состоянии.

пары только по критерию расстояния между атомами привело бы к учету большого количества ВдВ взаимодействий вследствие учета связей между атомами типа приведенных на рис. 2.5, попадающих в сферу действия более сильных ковалентных связей. В [5, 17, 61] показано, что вклад в энергию деформирования стенок графеноподобных наноструктур таких сил ВдВ незначителен (порядка 0.2%) по сравнению с вкладом в эту энергию сил ковалентных взаимодействий атомов. Таким образом, в целях экономии вычислительных ресурсов (памяти и времени) действиями этих сил можно пренебречь. Существуют различные подходы к неучету сил ВдВ рассматриваемого типа. В работах [25, 91, 96, 139] наряду с r_{cof} вводится радиус $r_{\text{min}} < r_{\text{cof}}$ (принимается значение r_{min} в диапазоне 0.2-0.23 нм). Тогда силы ВдВ учи-

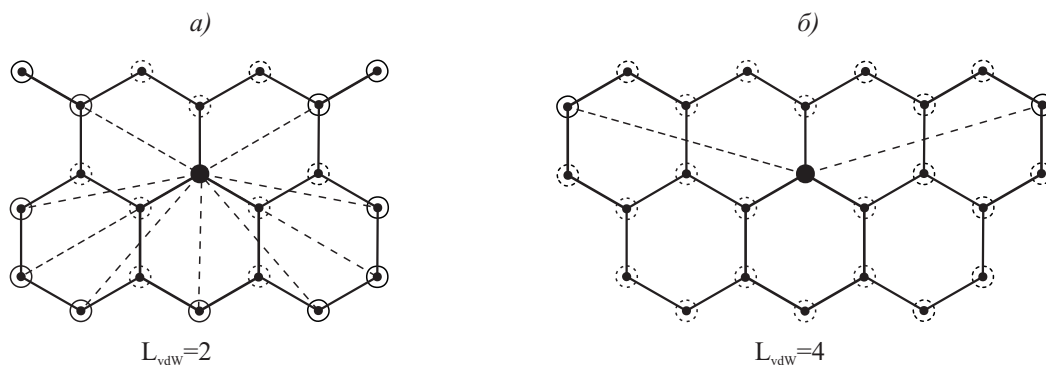


Рис. 2.6. Примеры неучета сил ВдВ для атомов, имеющих уровни ковалентных связей: а) $L_{vdW} = 2$, б) $L_{vdW} = 4$ (для атомов внутри кружков, отмеченных штриховой линией, силы ВдВ не учитываются, а для атомов внутри кружков, отмеченных сплошной линией, могут учитываться).

тываются при следующем расстоянии между атомами: $r_{\min} \leq r \leq r_{\text{cof}}$. Однако при таком подходе существует возможность при расстояниях между атомами, меньших чем r_{cof} , «не заметить» существенных сил отталкивания при решениях задач с достаточно большими шагами Δt интегрирования уравнений движения наноструктур методом ММ (явные схемы интегрирования, используемые в методе МД, являются условно устойчивыми и не допускают большие шаги по времени). В настоящей работе в алгоритме реализации самоконтакта наноструктуры имеется опция неучета сил ВдВ для атомов, находящихся на L_{vdW} уровнях ковалентных связей с рассматриваемым атомом (см. примеры ковалентных связей уровней $L_{vdW} = 2$ и $L_{vdW} = 4$ на рис. 2.6). Таким образом, при самоконтакте наноструктуры учет сил ВдВ для рассматриваемого атома с другими атомами производится в том случае, если, во-первых, расстояние между атомами не превышает значения r_{cof} , и, во-вторых, эти атомы не должны попадать в L_{vdW} уровней ковалентных связей с рассматриваемым атомом.

2.4 Автоматизация процесса компьютерного моделирования деформирования нанотрубок

2.4.1 Необходимость автоматизации

Современные суперкомпьютеры позволяют проводить моделирование наноструктур с количеством атомов/молекул $10^6 - 10^7$ [14]. Такое количество атомов/молекул в расчетной модели требует автоматизации построения наноструктур, а

также визуализации результатов компьютерного моделирования. При визуализации процесса деформирования наноструктуры, содержащей большое количество атомов, необходимо иметь детальную картину пространственного расположения атомов и их связей. Для наглядности восприятия принято изображать атомы в виде сфер (атомы разных элементов принято отображать разными цветами), а химические связи между атомами в виде линий или цилиндров. В настоящем разделе продемонстрированы возможности автоматического построения наноструктур, обработки результатов компьютерного моделирования деформирования и выпучивания наноструктур и проведен сравнительный анализ этих возможностей двух программных продуктов: MSC.Patran 2010 и VMD. Первый пакет является коммерческим продуктом компании MSC.Software [105], который осуществляет построение конечно-элементной (КЭ) модели и обработку результатов компьютерного моделирования методом конечных элементов. Пакет VMD [71], свободно распространяемый группой разработчиков университета Иллинойс, США (Theoretical and Computational Biophysics Group, <http://www.ks.uiuc.edu/>), используется для визуализации больших биомолекулярных систем и результатов компьютерного моделирования такого рода систем методом молекулярной динамики.

Растущие возможности CAE (Computer Aided Engineering) продуктов, а также их широкое применение в процессах автоматизированного проектирования позволяют исследователям использовать все более универсальные инструменты проектирования для автоматизации процесса рутинной работы. Одним из решений такого рода является снабжение CAE пакета программ своим собственным языком программирования. Как правило, этот язык программирования является скриптовым — язык программирования, разработанный для записи «сценариев», последовательностей операций, которые пользователь может выполнять на компьютере. Таким языком в пакете MSC.Patran 2010 является язык PCL (Patran Command Language) [105]. В пакете VMD это язык TCL (Tool Command Language) [71]. При помощи встроенного языка пользователь имеет возможность программно настраивать среду моделирования, автоматизировать многие рутинные процедуры построения расчетной модели и визуализации результатов моделирования. Кроме того, разработчики многих CAE пакетов, таких как MSC.Patran 2010, MSC.Marc [95] и др. предоставляют возможность использования пользовательских процедур, написанных на языках Fortran и C. С помощью пользовательских процедур возможно внедрять свою модель материала, свой конечный элемент, расчетную схему, алгоритм и так далее.

Как правило, многие CAE пакеты содержат в себе предпроцессор (программа осуществляющая построение расчетной модели, подготовку данных для дальнейших

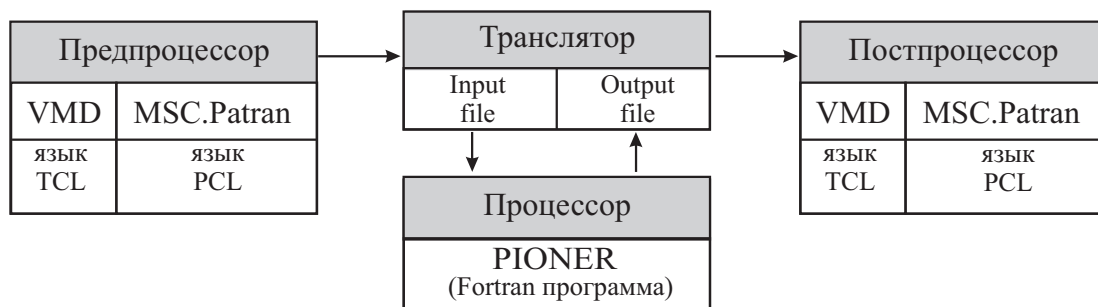


Рис. 2.7. Схема взаимосвязи пакетов PIONER, MSC.Patran 2010 и VMD.

вычислений), процессор (программа осуществляющая вычисления) и постпроцессор (программа осуществляющая визуализацию вычислений). В данном случае пакеты MSC.Patran 2010 и VMD являются пред-/постпроцессорами, а пакет PIONER процессором.

2.4.2 Адаптация кода PIONER к решению задач о деформировании нанотрубок

Схема взаимодействий пакетов PIONER, MSC.Patran 2010 и VMD представлена на рис. 2.7. Опишем в общих чертах эти взаимодействия. Для математического моделирования деформирования наноструктуры готовится ее геометрическая модель, записываются граничные условия, механические и физические свойства, определяются параметры сходимости и методы численного расчета (как в пакете MSC.Patran 2010, так и в пакете VMD). Так как рассмотренная далее в данной работе наноструктура имеет периодичность строения, то процесс построения геометрической модели, приложения граничных условий и т. д. может быть автоматизирован и реализован на языках PCL и TCL. Затем при помощи транслятора, написанного на языках PCL, TCL или Fortran, данные могут быть экспортированы в формате данных (Input file) пакета PIONER. В этом пакете непосредственно осуществляется математическое моделирование деформирования наноструктуры, а затем данные расчета (Output file), при помощи того же транслятора, импортируются в пакеты MSC.Patran 2010 и VMD для дальнейшей их визуализации и обработки.

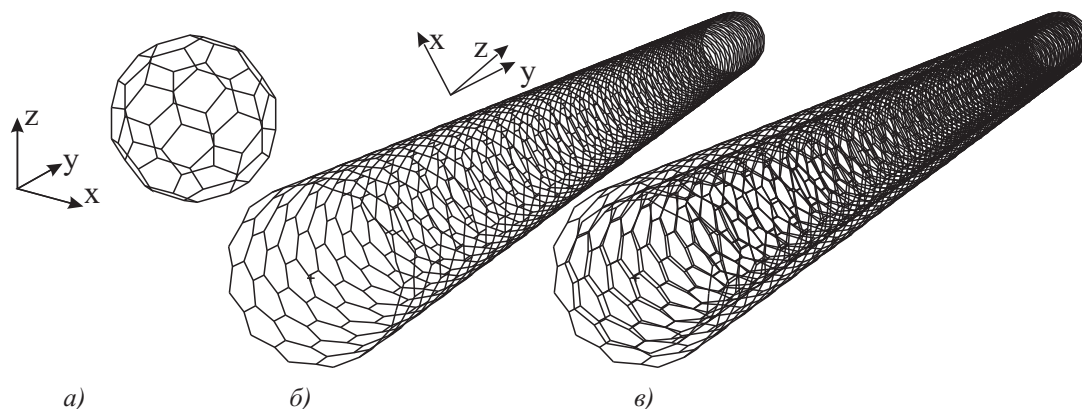


Рис. 2.8. Типичные представители наноструктур (полученные в пакете MSC.Patran 2010, при помощи языка PCL): фуллерен *а*); однослойная нанотрубка *б*); двухслойная нанотрубка *в*).

2.4.3 Визуализация наноструктуры с помощью пакета MSC.Patran

Связь пользователя с пакетом MSC.Patran 2010 осуществляется через командную строку программы и позволяет создавать и редактировать конечно-элементную модель. Набор процедур доступа к базе данных модели позволяет автоматизировать как построение самой модели, так и обработку и визуализацию результатов компьютерного моделирования. Типичные представители наноструктур: фуллерен, однослойная нанотрубка, двухслойная нанотрубка типа зигзаг (см. рис. 2.8) построены в среде MSC.Patran 2010 с помощью языка PCL. Как видно из рис. 2.8, построение наноструктур с таким дискретным расположением атомов при помощи стандартных инструментов моделирования (через графический интерфейс) в пакете MSC.Patran 2010 затруднительно, так как для построения КЭ модели необходимо вводить узлы и элементы вручную (опция автоматической разбивки геометрического объекта на одномерные конечные элементы в пакете MSC.Patran 2010 отсутствует). По этому, когда, создаваемая наноструктура содержит в себе большое количество атомов и атомы расположены в ней периодически, использование языка PCL становится оправданным. Эволюция наноструктуры во времени в пакете PIONER моделируется пошаговым интегрированием уравнений квазистатического/динамического деформирования. На каждом шаге по времени формируется файл с результатами (таких шагов по времени при решении задачи о деформировании и выпучивании нанотрубки может быть сделано десятки тысяч) и далее автоматически загружается в среду MSC.Patran 2010 с помощью программы транслятора, написанного на языке PCL.

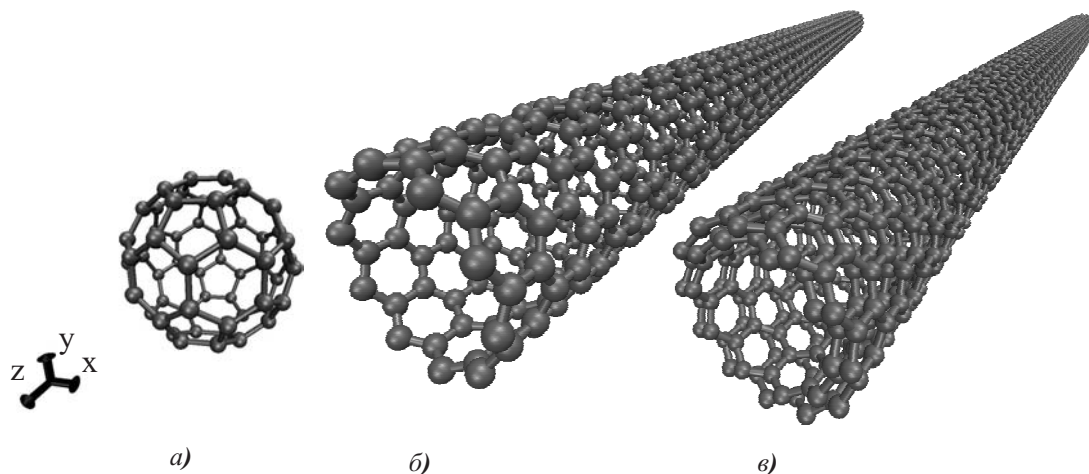


Рис. 2.9. Типичные представители наноструктур (полученные в пакете VMD в перспективе): фуллерен *а*); однослойная нанотрубка *б*); двухслойная нанотрубка *в*).

2.4.4 Визуализация наноструктуры с помощью пакета VMD

Рассмотрим использование и применение пакета VMD для визуализации наноструктур. Данный пакет предназначен, в первую очередь, для визуализации больших биомолекулярных систем, и результатов моделирования таких систем с помощью метода молекулярной динамики (МД). В настоящее время моделирование больших и сложных молекулярных и биомолекулярных систем методом МД обрело широкое распространение среди исследователей всего мира. Метод МД широко применяется для моделирования как механических свойств систем молекул, так и других физических процессов. В связи с общими интересами в исследовании таких систем в научном сообществе сформировалось некоторое количество форматов данных, содержащих информацию о биомолекулах. Одним из распространенных и универсальных форматов данных является формат PDB (Protein Data Bank), который содержит в себе информацию о положении атомов в молекуле, химических элементах и т. д. Пакет VMD также предоставляет пользователю возможность автоматизации построения и обработки результатов моделирования больших биомолекулярных систем при помощи языка TCL. Как видно из рис. 2.9, атомы в наноструктуре представлены в виде сфер, а межатомные связи в виде цилиндров, что дает объемность изображению.

2.4.5 Сравнительный анализ возможностей визуализации наноструктур пакетами MSC.Patran 2010 и VMD

Как видно из рис. 2.8 в пакете MSC.Patran 2010 связи между атомами представлены в виде линий, а сами атомы вообще не отображены на рисунке. Это вносит некоторое неудобство для исследователя в процесс визуального анализа деформированной конфигурации нанотрубки. Так как межатомные связи представлены линиями, то при освещении сцены на них не видны тени, что не дает объемности изображения (исследователю становится неясно, находится ли атом или межатомная связь на переднем или на заднем плане изображения). Необходимо отметить, что использование пакета MSC.Patran 2010 и языка PCL возможно не только в задачах деформирования наноструктур, но и в целом в задачах моделирования сложных физических явлений и визуализации их результатов. В этом случае язык PCL является мощным и гибким инструментом моделирования в руках исследователя. Пакет VMD обладает некоторыми преимуществами перед пакетом MSC.Patran 2010 в отношении графического представления наноструктур. В VMD возможно отображать атомы молекул в виде сфер, а межатомные связи в виде цилиндров. В результате такого представления молекулы можно наглядно рассмотреть на плоском изображении, порядок атомов и их связей (находятся ли они на переднем плане или на заднем плане изображения). Такой эффект достигается объемностью представления атомов и их связей и последующим освещением сцены (см. рис. 2.9). При моделировании процесса деформирования и выпучивания наноструктуры необходимо определять собственные формы колебаний и формы выпучивания наноструктуры. Однако пакет VMD не позволяет анимировать формы собственных колебаний наноструктуры, что в свою очередь пакет MSC.Patran 2010 делает при помощи графического интерфейса программы.

Выводы по главе 2

В данной главе представлены процедуры численных решений нелинейных уравнений молекулярной механики и их программная реализация. Основные выводы можно сформулировать следующим образом:

1. Для интегрирования уравнений динамического движения наноструктуры используется схема Ньюмарка, а для интегрирования уравнений квазистатического движения используется метод Эйлера. Для уточнения решения уравнений статики и динамики используется итерационное уточнение решения методом

Ньютона – Рафсона.

2. Представлены алгоритмы решения задач о квазистатическом деформировании и выпучивании наноструктур. Разработаны новые алгоритмы динамического деформирования и выпучивания наноструктур, в основу которых положен анализ положительной определенности симметричной матрицы касательной жесткости.
3. Разработаны процедуры автоматизации построения моделей наноструктур и визуализации результатов моделирования их деформирования, реализованные в среде пакетов MSC.Patran и VMD и проведен сравнительный анализ их возможностей
4. Проведена адаптация программного комплекса PIONER к решению задач динамического выпучивания и контактных взаимодействий наноструктур.

Глава 3

Компьютерное моделирование деформирования, выпучивания и контакта углеродных нанотрубок

Результаты численных решений задач, представленные в настоящей главе, получены с помощью пакета PIONER [65]. Визуализации моделей и деформированных конфигураций получены в среде пакета MSC.Patran 2010 [105] с использованием специально разработанных программ для взаимодействия пакетов PIONER и MSC.Patran 2010 [3].

Константы потенциальных функций для УНТ в (1.7), (1.8) имеют следующие значения [32]

$$\begin{aligned}r_e &= 0.142 \text{ нм}, \quad \alpha = 26.25 \text{ нм}^{-1}, \quad D = 0.603105 \text{ нН} \cdot \text{нм}, \\ \sigma &= 0.3412 \text{ нм}, \quad \varepsilon = 0.0003840 \text{ нН} \cdot \text{нм}, \quad \bar{r}_e (= \sqrt[6]{2}\sigma) = 0.3830 \text{ нм}, \\ k_\theta &= 0.9 \text{ нН} \cdot \text{нм}/\text{рад}^2, \quad m_a = 0.019927 \text{ нН} \cdot \text{пс}^2 \cdot \text{нм}^{-1},\end{aligned}$$

где m_a — масса атома углерода. Графики зависимостей величин, характеризующих ковалентное взаимодействие атомов УНТ в некоторой атомной паре (см. (1.8)), приведены на рис. 3.1, а нековалентного взаимодействия (обусловленного силами ВдВ, см. (1.7)) — на рис. 3.2.

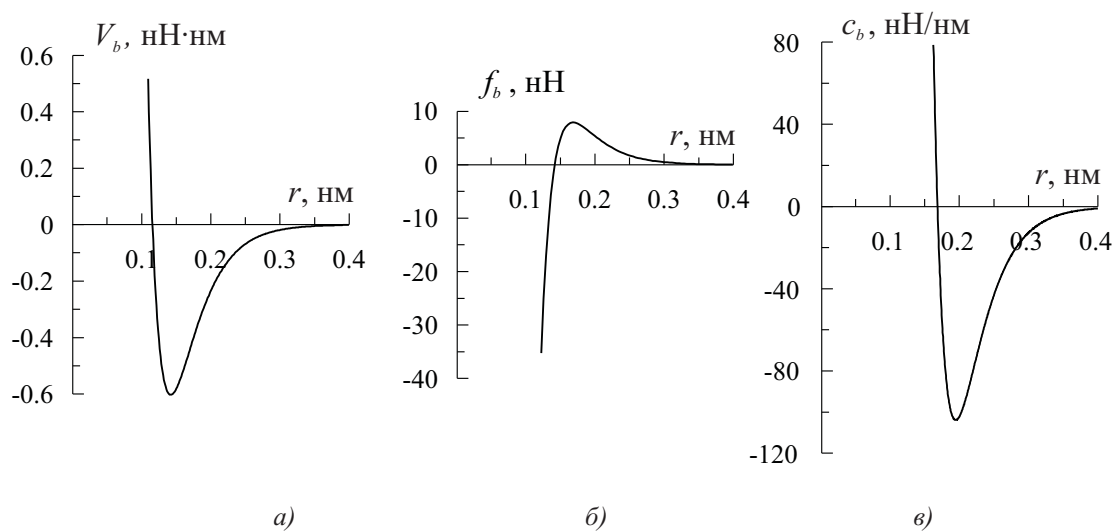


Рис. 3.1. Значение потенциала V_b ковалентных взаимодействий атомов, силы f_b и величины c_b от расстояния r между атомами: а) V_b от r ; б) f_b от r ; в) c_b от r .

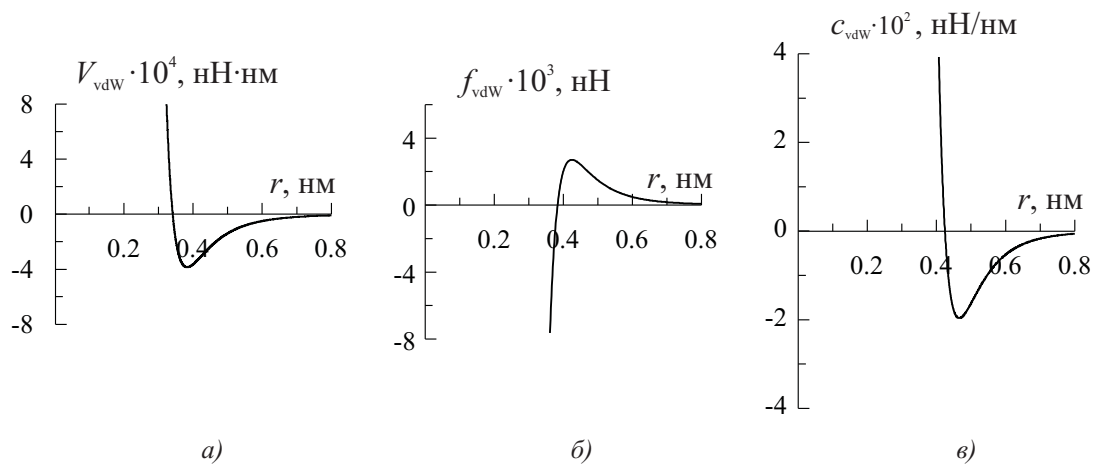


Рис. 3.2. Значение потенциала V_{vdW} нековалентных взаимодействий атомов, силы f_{vdW} и величины c_{vdW} от расстояния r между атомами: а) V_{vdW} от r ; б) f_{vdW} от r ; в) c_{vdW} от r .

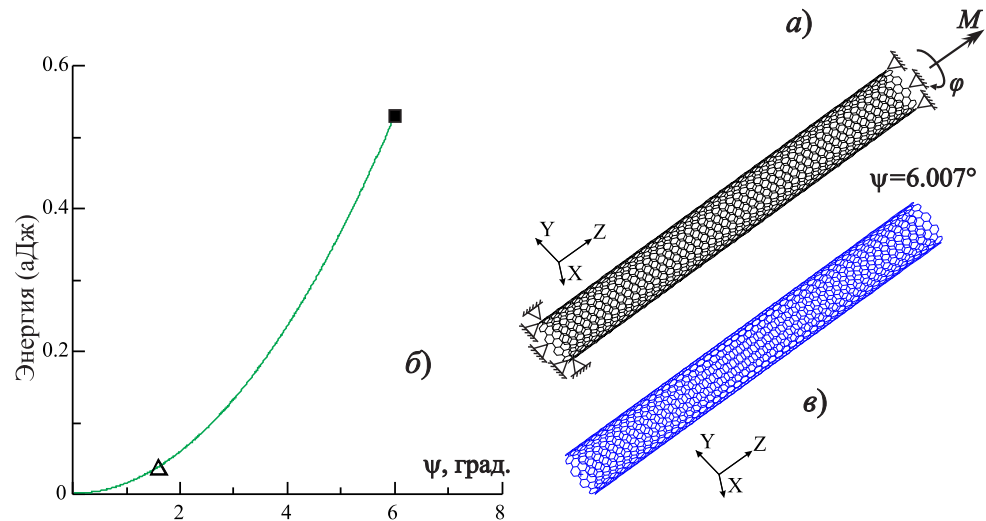


Рис. 3.3. Квазистатическое деформирование нанотрубки при кручении: а) общий вид; б) интегральная кривая; « Δ » — точка бифуркации, в) деформированная конфигурация нанотрубки в точке равновесия « \blacksquare », соответствующей решению задачи без возмущений при значении угла закручивания $\psi = 6.007^\circ$.

3.1 Сравнение численных решений задач о деформировании и выпучивании УНТ с решениями других авторов

Для оценки достоверности численных решений задач, приведенных в настоящей работе, были проведены сравнения решений задач по деформированию и потере устойчивости УНТ, приведенных в [27], с решениями этих же задач полученных с помощью пакета прикладных программ PIONER.

В [27] получено решение по квазистатическому деформированию и выпучиванию однослойной УНТ типа «кресло» при ее кручении методами ММ и МДТТ. Рассмотрена УНТ с индексами хиральности (10, 10), радиуса $R = 0.6780$ нм, длины $L = 12.30$ нм, состоящей из 2020 атомов. В [27], как и в настоящей работе, энергия ковалентного взаимодействия атомов аппроксимировалась потенциалом Морзе, в этой модели также учитывалась энергия нековалентного (вандерваальсового) взаимодействия. На рисунке 3.3 приведена УНТ с наложенными ограничениями на перемещения атомов и приложенным крутящим моментом. Также на этом рисунке приведена кривая зависимости энергии¹ от угла закручивания УНТ при квазистатическом деформировании. Здесь же приведена деформированная конфигурация в одной из

¹Здесь и далее энергия измеряется в аДж (атто Джоуль), $1 \text{ аДж} = 10^{-18} \text{ Дж} = 1 \text{ нН}\cdot\text{нм}$).

точек интегральных кривых. Атомам, находящимся на нижнем торце трубки, перемещения по всем степеням свободы запрещены ($U = V = W = 0$), на верхнем торце перемещения атомов в осевом направлении ($W = 0$) запрещены, на этом торце также задается значение угла закручивания φ в положительном направлении. Отметим, что в работе [27] задается угол закручивания обоих торцов с заданным значением угла ψ в отрицательном направлении. В целях сравнения, на графиках, представленных на рисунках 3.3 - 3.7, приведены зависимости потенциальной энергии УНТ от угла $\psi = \varphi/2$.

3.1.1 Квазистатическое деформирование

Численные эксперименты показали, что критический угол ψ_{cr} , соответствующий первой точке бифуркации на интегральной кривой (рис. 3.3,б), достаточно точно представляется при интегрировании уравнений квазистатического деформирования с шагом угла закручивания $\Delta\varphi = 0,01125^\circ$. В этом случае матрица \mathbf{K} впервые теряет положительную определенность на фундаментальном решении, соответствующим деформированию нанотрубки без складкообразования (рис. 3.3,в) в интервале изменения угла закручивания $\psi_{cr} \in (1.5975^\circ, 1.60875^\circ)$. Полагаем критическим значением угла закручивания ψ значение, равное $\psi_{cr} = 1.5975^\circ$, соответствующие нижнему значению в интервале его изменения. Форма выпучивания нанотрубки, полученная в точке бифуркации на фундаментальном решении (т.е. решении, которому соответствует закручивание нанотрубки без складкообразования), представлена на рис. 3.4.

3.1.2 Динамическое деформирование

В соответствии с подходом по определению закритических деформированных конфигураций, приведенным в главе 2, надо в процесс деформирования наноструктуры внести малое возмущение, по возможности согласованное с формой выпучивания, полученной в точке бифуркации/квазибифуркации решения. Далее, под решением задачи без возмущений понимаем решение, полученное при определении начальных положений атомов наноструктуры без введения специальных возмущений². Под решением задачи с «возмущениями типов 1, 2, 3, 4» понимаем решения задач, полученные при задании дополнительных сжимающих сил, которые приложены к парам атомов по всей длине и по разные от оси стороны нанотрубки, действующих

²В построенной в настоящей работе модели УНТ удалось определить положения атомов только с точностью до первых четырех значащих цифр.

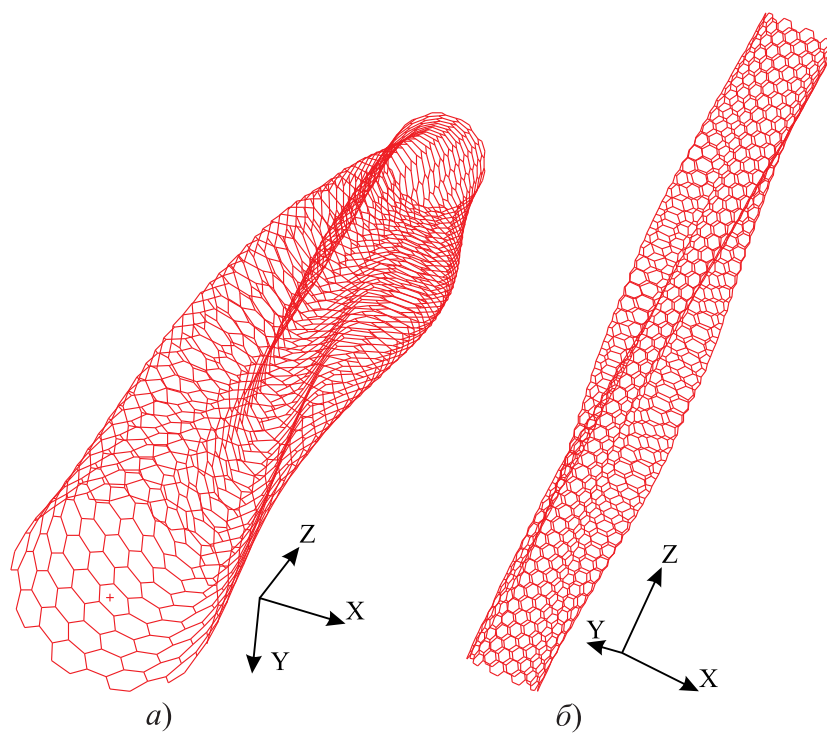


Рис. 3.4. Форма выпучивания нанотрубки при кручении, соответствующие точке бифуркации, отмеченной знаком « Δ » на рис. 3.3,б: а) – вид в перспективе, б) – вид сбоку.

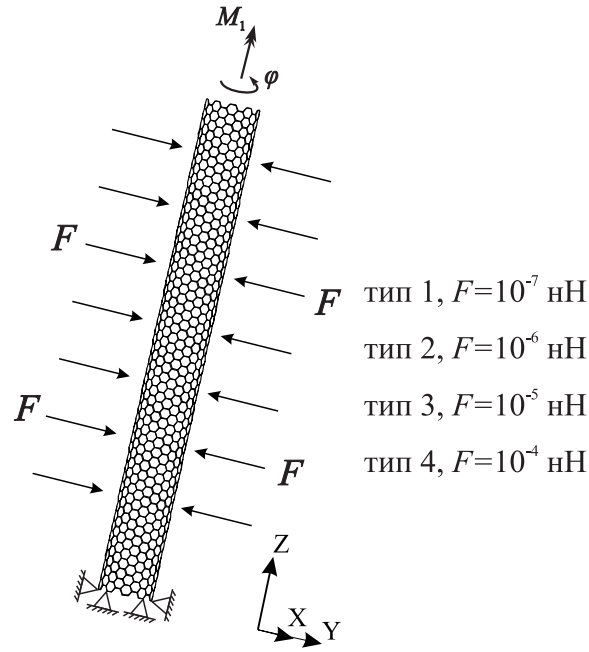


Рис. 3.5. Типы возмущений, вносимые в решения задачи о кручении УНТ.

вдоль оси x в противоположных направлениях и имеющих абсолютную величину $F = 10^{-7}$ нН; 10^{-6} нН; 10^{-5} нН, 10^{-4} нН, соответственно, для каждого из атомов (рис. 3.5). Суммарное значение возмущающих сжимающих сил P , приложенных к каждой из противоположных стенок, равно $P = 2 \cdot 102F = 204F$.

Для того, чтобы получить закритические формы деформирования, моделируем квазистатическое деформирование динамическим деформированием с достаточно растянутым по времени (см. раздел 3.5) приложением угла закручивания φ . Численными экспериментами установлено, что достаточно растянутый по времени режим деформирования реализуется при закручивании нанотрубки со скоростью $\dot{\varphi} = 0.18$ град/пс, при этом атомы на верхнем торце нанотрубки совершают полный оборот (т.е. $\varphi = 360^\circ$) за интервал времени $T = 2000$ пс.

Для определения точки квазибифуркации и соответствующей формы выпучивания уравнения движений интегрировались с шагом $\Delta t = 0.625$ пс. В соответствующем расчете силы Ван-дер-Ваальса не учитываются. Имеем точку квазибифуркации, соответствующую $\psi_{cr} = 1.51875^\circ$, и форму выпучивания, представленную на рис. 3.6.

При определении закритического деформирования УНТ решения задач проводились с учетом сил Ван-дер-Ваальса. Численными экспериментами был подобран шаг по времени $\Delta t = 0.00625$ пс ($\Delta\varphi = 0.0225^\circ$), обеспечивающий сходимость решения вплоть до достижения углом закручивания значения 360° . Результаты расчетов

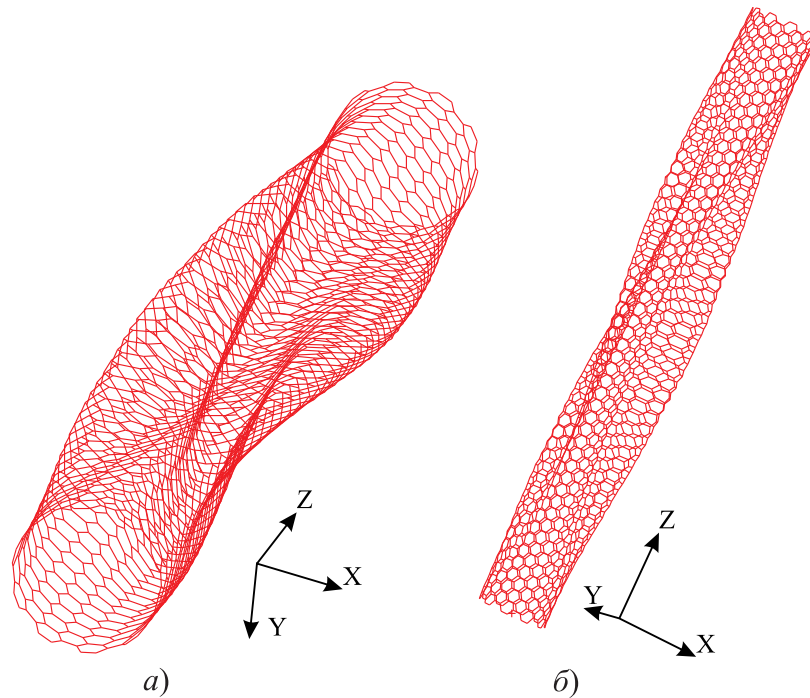


Рис. 3.6. Форма выпучивания нанотрубки при кручении, соответствующие точке квазибифуркации, отмеченной знаком «□» на рис. 3.3,б): а) – вид в перспективе, б) – вид сбоку.

динамического деформирования нанотрубки при кручении как для решения задачи без возмущений, так и для решений задач с возмущениями типов 1, 2, 3, 4, приведены на рис. 3.7. Знаком \blacklozenge на рис. 3.7,б) отмечена точка максимума, сразу за которой идет резкое падение потенциальной энергии деформирования, значение критического угла закручивания в этой точке $\psi_{cr} = 11.362^\circ$. Значение угла ψ , полученное в решении задачи с возмущением типа 1, составляет $\psi_{cr} = 8.889^\circ$. В [27] получено значение критического угла закручивания $\psi = 9.5^\circ$ в решении с возмущениями (тип возмущения в [27] не указан), а в решении без возмущений значение критического угла закручивания составило 15° . Сравнивая графики зависимости потенциальной энергии УНТ от угла закручивания, полученные в [27] и в настоящей работе отмечаем, что критические значения потенциальной энергии в решении с возмущением, полученные в [27] (рис. 3.7,а)), и в решении без возмущения, полученные в настоящей работе (рис. 3.7,б)) близки друг к другу (рис. 3.7,в)). Наклоны кривых на начальной стадии деформирования, вплоть до критических значений, достаточно близки друг к другу. Различие в наклонах кривых можно объяснить возможным различием выбранных констант в законах межатомных взаимодействий³. После резкого падения

³В [27] не приведены константы межатомных взаимодействий.

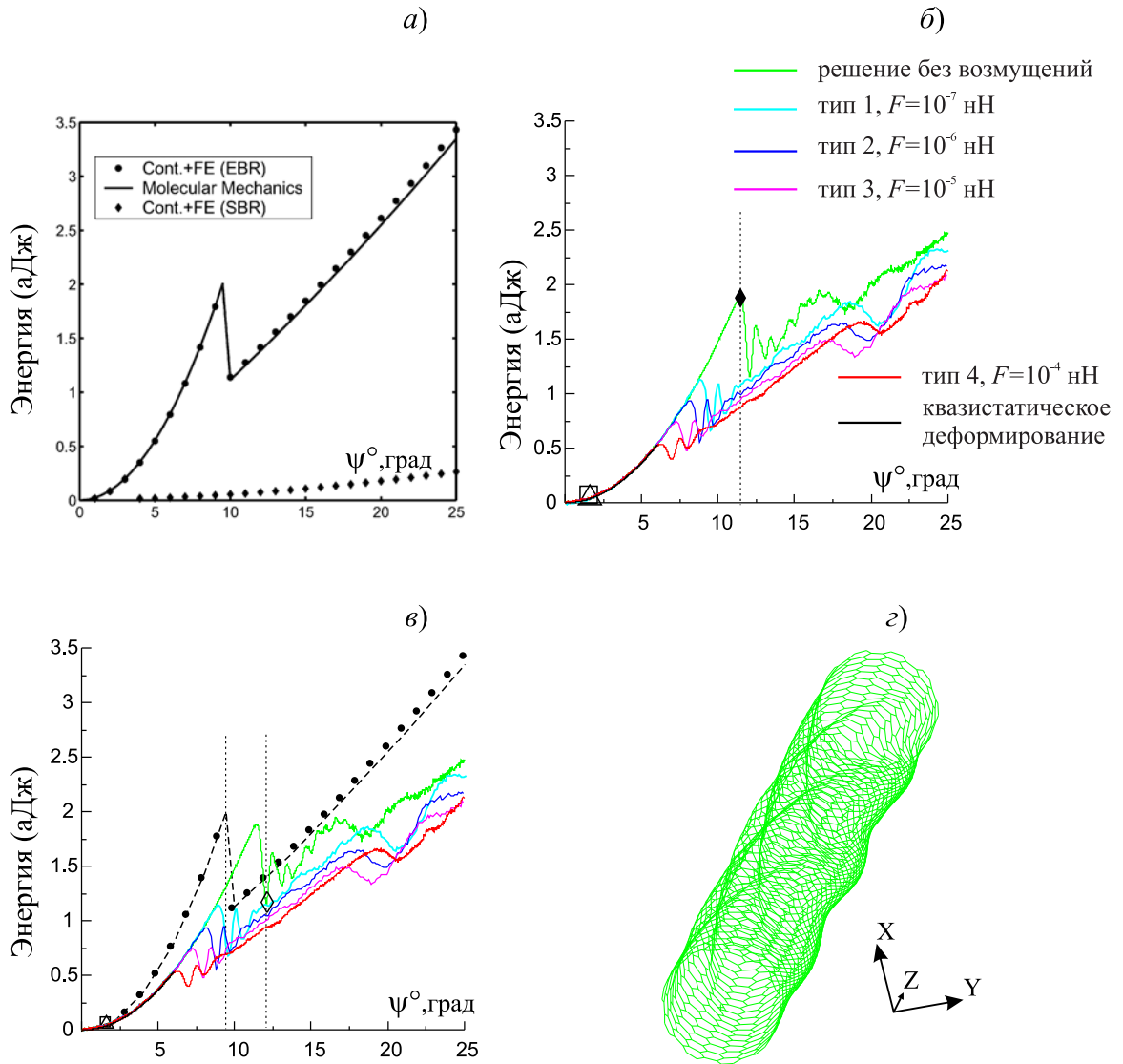


Рис. 3.7. Решения задач о закритическом деформировании, полученные в настоящей работе и в [27]: а) – зависимость потенциальной энергии деформирования от угла закручивания, взятая из статьи [27]; б) – зависимости потенциальной энергии деформирования от угла закручивания, полученные в решениях задач без возмущений и с различными типами возмущений в настоящей работе; в) – графики зависимостей потенциальной энергии от угла закручивания, полученные в настоящей работе и в [27]; г) – деформированная конфигурация нанотрубки отмеченная знаком « \diamond » на кривой решения без возмущений (отмечена зеленым цветом), соответствующая углу закручивания $\psi = 12.150^\circ$.

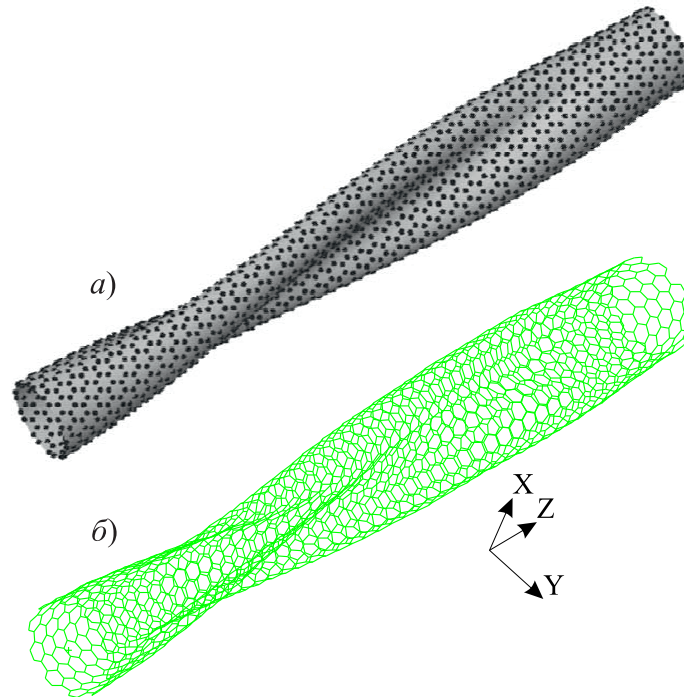


Рис. 3.8. Сравнение полученных в [27] и настоящей работе деформированных закритических конфигураций для угла закручивания $\psi = 25^\circ$: *a)* – конфигурация, полученная в [27]; *б)* – конфигурация, полученная в настоящей работе.

потенциальной энергии деформирования УНТ как в [27], так и в настоящем исследовании (см. рис. 3.7, *б*)), можно отметить близкий характер роста потенциальной энергии деформирования УНТ в зависимости от увеличения угла закручивания. На рис. 3.7, *з*) приведена деформированная конфигурация УНТ, полученная в решении без возмущений в точке, отмеченной на рис. 3.7, *з*) знаком « \diamond ».

На рис. 3.8 приведены закритические деформированные конфигурации УНТ, взятые из [27] и полученные в настоящей работе⁴. Отмечаем их качественное соответствие.

Таким образом, специальным подбором возмущений, вносимых в решение, удалось добиться как качественного, так и количественного соответствия решений, приведенных в [27] и полученных в настоящей работе. Следует отметить полезность применения критериев устойчивости процессов деформирования наноструктур. Проведенное в настоящей работе исследование показывает, что устойчивость квазистатического/динамического деформирования обеспечивается в интервале изменения угла закручивания $\psi \in [0, 1.5975^\circ]$. В тоже время из исследований, проведенных в [27] и

⁴В целях сравнения специально для этого расчета закручивание торца трубки осуществлялось в отрицательном направлении

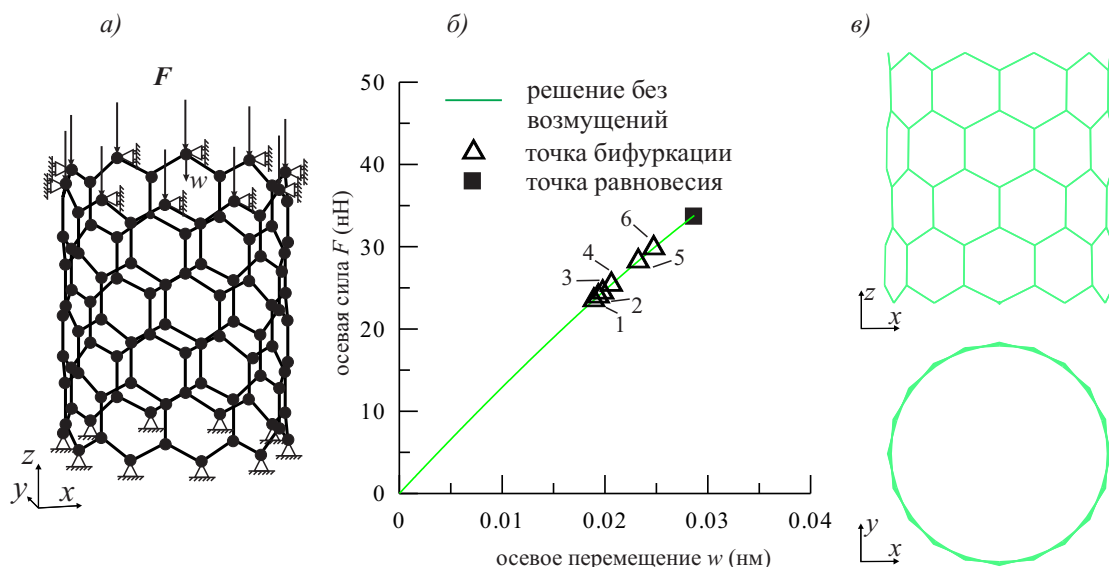


Рис. 3.9. Квазистатическое деформирование «короткой» УНТ, сжатой по оси: а) УНТ с граничными условиями и действующими силами; б) интегральная кривая; в) «осесимметричная» деформированная конфигурация, соответствующая точке «■» интегральной кривой при значении сжимающей нагрузки $F = 33.797$ нН.

настоящей работе, следует, что получить значение критического угла закручивания прямым решением задач о деформировании нанотрубки методами ММ и МД затруднительно, так как в этой задаче критический угол существенно зависит от величины введенного в решение возмущения.

3.2 Деформирование и выпучивание «короткой» УНТ, сжатой по оси

Рассмотрим УНТ типа «зигзаг» с индексами хиральности $(10, 0)$ [19] радиуса $R = 0.3931$ нм, длиной $L = 0.923$ нм, состоящую из 100 атомов. Нанотрубка нагружается силами F , приложенными к атомам на ее верхнем торце. Задаются следующие значения компонент векторов перемещений атомов, исключая движение нанотрубки как жесткого целого (рис. 3.9, а): нанотрубка зафиксирована по нижнему торцу (т. е. полагается выполнение равенств $u = v = w = 0$), а на верхнем торце (там где заданы осевые силы) ограничиваются движения в плоскости, нормальной к оси нанотрубки (т. е. полагается выполнение равенств $u = v = 0$). Решения задач, как квазистатического, так и динамического деформирования УНТ, получены пошаговым интегрированием уравнений квазистатического и динамического деформирования,

приведенных в главе 2, с итерационным уточнением решения на каждом шаге интегрирования с помощью стандартной процедуры Ньютона-Рафсона с допустимыми погрешностями $\varepsilon_D = \varepsilon_F = 10^{-4}$, $\varepsilon_E = 10^{-8}$.

3.2.1 Квазистатическое деформирование

Пошаговая процедура интегрирования уравнений равновесия используется в сочетании с методом Крисфилда [10, 11]. Интегральная кривая, полученная пошаговым интегрированием, представлена на рис. 3.9,б. Эта кривая представляет фундаментальное решение уравнений квазистатического деформирования УНТ, т. е. равновесные конфигурации фундаментального решения соответствуют «осесимметричному» деформированию УНТ. Возмущения в решение, вносимые погрешностью неточного задания начального положения атомов в УНТ (возмущение типа 1), имитирующие использование одинарной точности арифметических вычислений (правильно задаются 5 десятичных знаков вместо 16 десятичных знаков при использовании арифметики с двойной точностью), не приводят в настоящих расчетах к потере осесимметричного характера деформирования (т. е. задание начального положения атомов в УНТ с использованием арифметики одинарной точности и двойной точности при решении задачи о квазистатическом деформировании УНТ соответствуют близким интегральным кривым, сливающимся в одну интегральную кривую фундаментального решения, представленную на рис. 3.9,б. На рис. 3.9,в приведена деформированная конфигурация УНТ, соответствующая фундаментальному решению. На фундаментальном решении получен ряд точек бифуркации с соответствующими формами выпучивания, приведенными на рис. 3.10. Отметим, что представлены только формы выпучивания, имеющие качественное различие между собой (т. е. не представлены кратные собственные формы, отличающиеся поворотом). Первая точка бифуркации получена на интервале изменения силы F : (23.478; 23.959) нН. Полагаем критическим значением сжимающих сил F значение, равное $F_{cr} = 23.478$ нН.

3.2.2 Динамическое деформирование при приложении силы, возрастающей с постоянной скоростью

В соответствии с алгоритмами решения задач по динамическому деформированию и выпучиванию наноструктур, представленными в главе 2, сначала решаем вспомогательную задачу по определению частот и форм собственных колебаний (2.28) УНТ. Несколько нижних пар частот и форм собственных колебаний представлены на рис. 3.11. Из (2.29) получим верхнюю оценку шага интегрирования Δt при

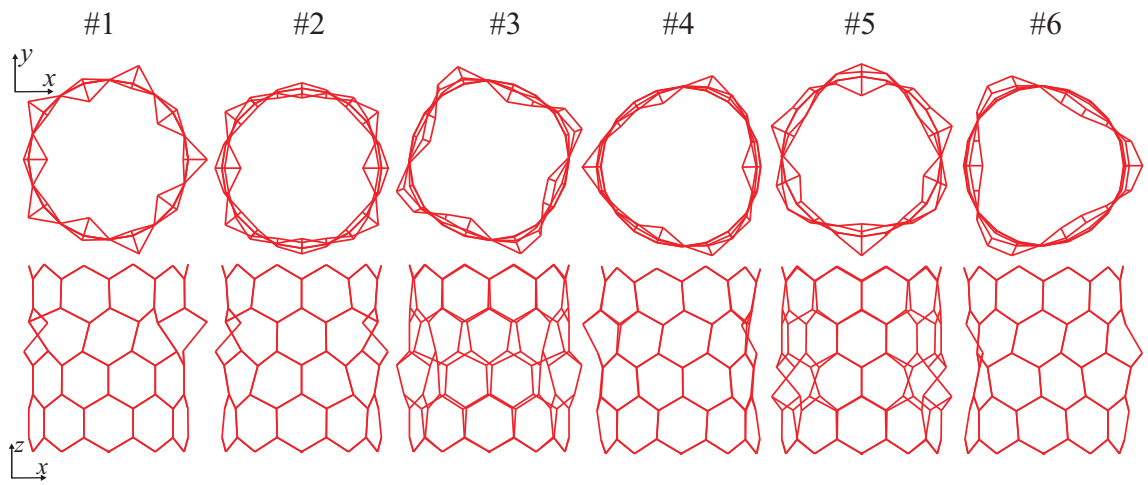


Рис. 3.10. Формы выпучивания «короткой» УНТ, соответствующие точкам бифуркации интегральной кривой, представленным на рис. 3.9,б.

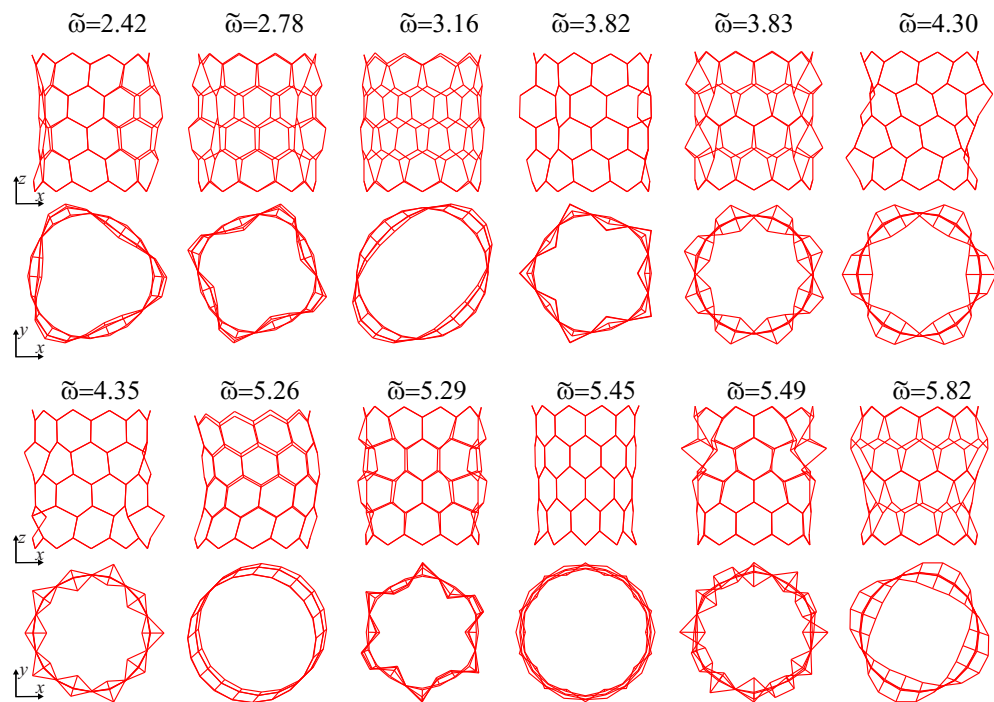


Рис. 3.11. Нижние частоты $\tilde{\omega}$ (ТГц) и соответствующие им формы собственных колебаний УНТ.

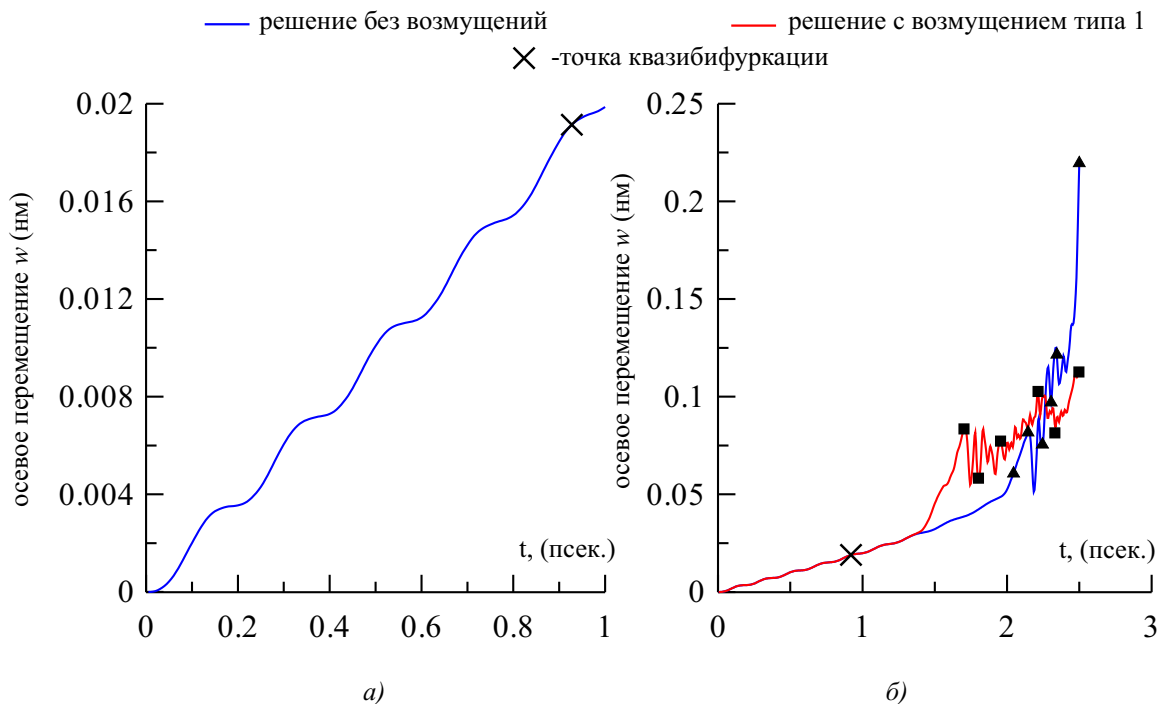


Рис. 3.12. Динамическое деформирование «короткой» УНТ, сжатой силой, возрастающей с постоянной скоростью $\dot{F} = 25$ нН/пс: а) участок устойчивого движения; б) поведение решения за точкой квазибифуркации в зависимости от величины введенного в решение возмущения.

учете 12-ти нижних форм собственных колебаний ($I = 12$):

$$\tilde{\omega}_I = 5.823 \text{ ТГц}, \quad T_I = \frac{1}{\tilde{\omega}_I} = 0.172 \text{ пс}, \quad \Delta t_{max} = \frac{T_I}{10} \approx 0.0172 \text{ пс}.$$

Этот шаг интегрирования позволяет достаточно точно воспроизвести вклад 12-ти форм собственных колебаний, представленных на 3.11, в численное решение задачи деформирования УНТ, по крайней мере, в начальный момент выхода УНТ из состояния равновесия. Решения задач, представленные ниже, получены путем пошагового интегрирования уравнений движения с шагами Δt , значения которых не превышают оцененного выше значения $\Delta t = 0.0172$ пс.

Вторая серия расчетов проведена в предположении о сжатии УНТ силами P , возрастающими с постоянной скоростью $\dot{F} = 25$ нН/пс. На рис. 3.12 представлены два решения с шагом интегрирования $\Delta t = 0.0005$ пс, которые обозначены как «решение без возмущений» и «решение с возмущением тип 1». Под первым мы понимаем решение, полученное при задании начального положения атомов в УНТ с использованием двойной точности арифметических вычислений, а под вторым — арифметики с простой точностью (см. раздел 2.2). Точка квазибифуркации фун-

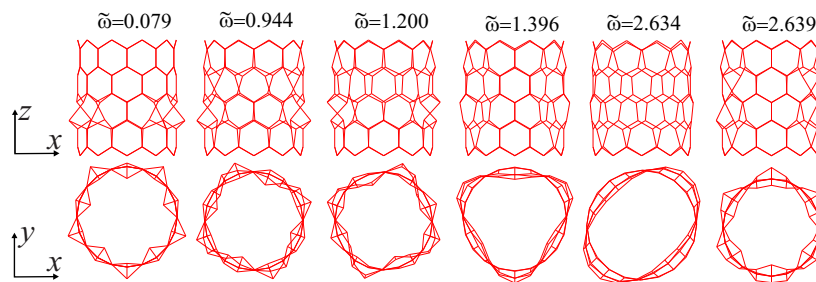


Рис. 3.13. Нижние частоты $\tilde{\omega}$ (ТГц) и соответствующие им формы собственных колебаний «короткой» УНТ, соответствующие точке квазибифуркации отмеченной « \times » на рис. 3.12,б.

даментального решения, отмеченная знаком « \times » на рис. 3.12,б, соответствует потере положительной определенности матрицы касательной жесткости на сегменте времени $[t_1 = 0.9225 \text{ пс}, t_2 = 0.9230 \text{ пс}]$, на котором сила F изменяется в сегменте $[F_1 = 23.815 \text{ нН}, F_2 = 23.911 \text{ нН}]$, причем на этом интервале изменил знак только один диагональный элемент матрицы, т. е. в точке квазибифуркации имеется одна (некратная) форма выпучивания. Для ее определения решается задача (2.32), но на рис. 3.13 представлена не только нижняя форма, соответствующая первой частоте, но и высшие формы, представляющие интерес, во-первых, с точки зрения анализа изменения спектра частот по сравнению с представленным спектром на рис. 3.11, и, во-вторых, высшие формы могут стать формами выпучивания при дальнейшем продолжении фундаментального «осесимметричного» решения (т. е. для следующих возможных точек квазибифуркации). Сравнивая частоты и соответствующие им формы свободных колебаний УНТ при $t=0$ (см. рис. 3.11) и формы собственных колебаний предварительно нагруженной УНТ при $t=0.9225 \text{ пс}$ (см. рис. 3.13), отмечаем их существенную трансформацию в точке квазибифуркации по отношению к точке равновесия $t=0$, со следующим отношением нижних частот $\tilde{\omega}_1^b / \tilde{\omega}_1^0 = 0.079 / 2.42 = 0.0326$ ($\tilde{\omega}_1^0$ и $\tilde{\omega}_1^b$ — нижние частоты при $t=0$ и $t=0.9225 \text{ пс}$, соответственно). Также отмечаем тождественность форм выпучивания при статическом и динамическом анализе, соответствующие первым трем формам на рис. 3.10, 3.13. Как и предсказывает теория, кривая решения на участке от $t=0$ до $t=0.9225 \text{ пс}$ (т. е. до точки квазибифуркации) соответствует устойчивому движению и интегральные кривые обоих решений на этом интервале времени сливаются в кривую, представленную на рис. 3.12. Колебательный режим движения (с частотой, соответствующей частоте $\tilde{\omega} = 5.45 \text{ ТГц}$ собственных колебаний 10-й формы на рис. 3.11) отчетливо обнаруживается на 3.12,а. Этот колебательный режим сменяется неосциллирующим движением

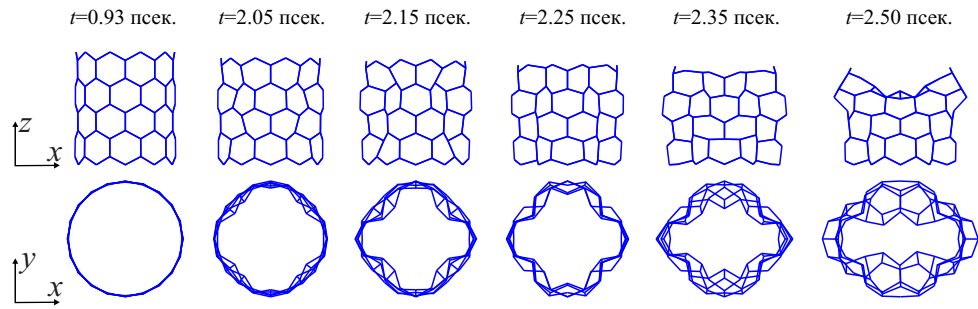


Рис. 3.14. Деформированные конфигурации «короткой» УНТ, полученные в решении без «возмущений» (формы соответствуют точкам «▲» на интегральной кривой рис. 3.12,б).

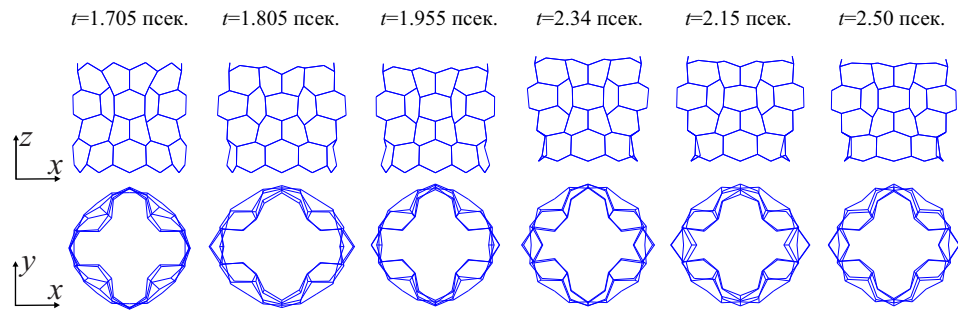


Рис. 3.15. Деформированные конфигурации «короткой» УНТ, полученные в решении с «возмущениями» (формы соответствуют точкам «■» на интегральной кривой рис. 3.12, б).

(дивергентного типа) почти сразу за точкой квазибифуркации для «возмущенного решения типа 1» и, спустя некоторое время, также для «невозмущенного» решения (см. рис. 3.12,б). Деформированные конфигурации УНТ для «невозмущенного» и «возмущенного движения типа 1» представлены на рис. 3.14, 3.15, соответственно, для моментов времени, обозначенных «■» и «▲» на рис. 3.12,б.

3.2.3 Динамическое деформирование при внезапном приложении постоянной осевой нагрузки

Рассмотрим «короткую» нанотрубку, внезапно сжатую постоянной осевой силой F . Отметим, что при квазистатическом нагружении нанотрубка выпучивается при значении $F_{cr}^s = 23.478$ нН. Рассмотрим различные значения внезапно приложенной постоянной силы F , как меньшие, так и большие значения F_{cr}^s с целью определения того, возможно ли выпучивание нанотрубки при выбранных значениях осевой

силы F . Рассматриваем три значения F : 5 нН ($<F_{cr}^s$), 10 нН ($<F_{cr}^s$), 25 нН ($>F_{cr}^s$). Для определения закритических деформированных конфигураций в процесс деформирования нанотрубки вносим малое возмущение, согласованное с формой выпучивания, полученной в точке квазибифуркации решения задачи о деформировании нанотрубки внезапно приложенной постоянной силой $F = 25$ нН. При этом, ко второму сверху слою атомов прикладывались силы, действующие в плоскости, ортогональной оси нанотрубки. Роль этих сил состоит в выводе нанотрубки из режима «осесимметричного» деформирования. Под решением задачи с «возмущением типа 1» понимаем решение, полученное при определении начальных положений атомов нанотрубки с точностью до пяти первых значащих цифр, а под решениями задач с «возмущениями типов 2», «3», «4» понимаем решения задач с величинами возмущающих сил $0.001P$, $0.01P$, $0.1P$, соответственно. Расчеты для всех трех случаев задания силы F , приведенные на рис. 3.16-3.21, проводились на сегменте времени $[0; 2.5]$ пс. Горизонтальная штриховая линия на рис. 3.16, 3.19 соответствует значению w , полученному в решении статической задачи о сжатии нанотрубки вдоль оси.

Случай 1: $F = 5$ нН. Пошаговое интегрирование уравнения движения проводилось с шагом по времени $\Delta t = 0.001$ пс. В этом решении точек квазибифуркации не обнаружено. Получены решения задач как без возмущений, так и с возмущениями всех четырех типов. Кривые зависимости « $w \sim t$ » для всех расчетов сливаются в одну кривую на рис. 3.16,*a* в соответствии с устойчивостью фундаментального решения (т. е. решения задачи без возмущений), следующей из выполнения критерия устойчивости ($\mathbf{K} \succ 0$ при $t \in [0; 2.5]$ пс). Кривая решения соответствует устойчивым колебаниям нанотрубки около состояния статического равновесия при $F = 5$ нН.

Случай 2: $F = 10$ нН. Также как и для первого случая, в расчете использовался шаг по времени $\Delta t = 0.001$ пс. Точка квазибифуркации решения задачи без возмущений (рис. 3.16,*б*) со сменой положительных значений на отрицательные двух элементов диагональной матрицы \mathbf{D} обнаружена на сегменте времени $[0.111; 0.112]$ пс. Собственные частоты и формы колебаний предварительно нагруженной нанотрубки, полученные при решении обобщенной задачи на собственные значения, представлены на рис. 3.17 (кратные формы, отличающиеся поворотом трубки как жесткого целого, не приведены). Для достаточно большого интервала времени (1 пс) кривые решений задач без возмущений и с возмущениями типов 1, 2, 3 сливаются на рис. 3.16,*б* в одну кривую, соответствующую фундаментальному (с «осесимметричным» деформированием) решению в виде колебания нанотрубки около состояния статического равновесия. Только решение с возмущением типа 4 почти сразу за точкой квазибифуркации сменило колебательный режим деформирования на дивергентный тип

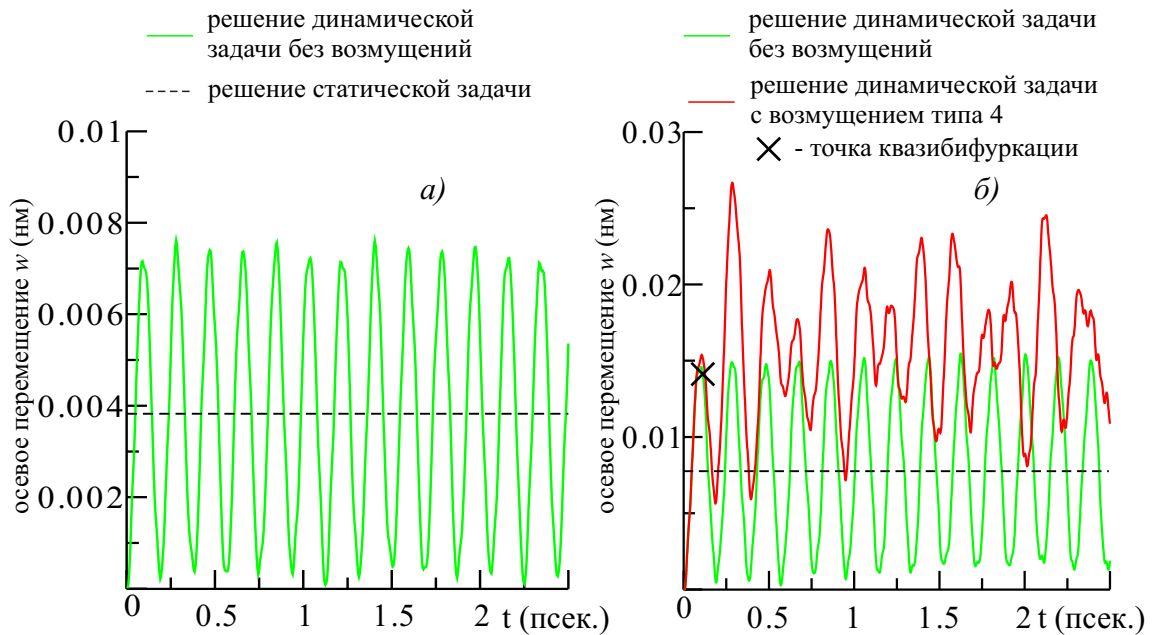


Рис. 3.16. Кривые зависимости « $w \sim t$ » в задаче о деформировании «короткой» УНТ под действием внезапно приложенных сил F : а) 5 нН; б) 10 нН.

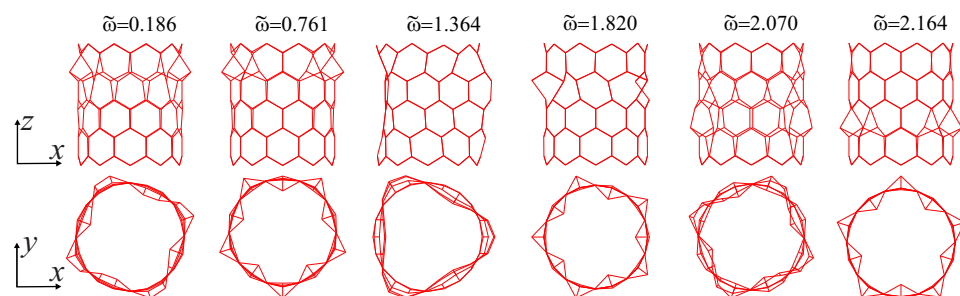


Рис. 3.17. Частоты $\tilde{\omega}$ (ТГц) и соответствующие формы выпучивания «короткой» УНТ в точке квазибифуркации, отмеченной знаком « \times » на рис. 3.16,б.

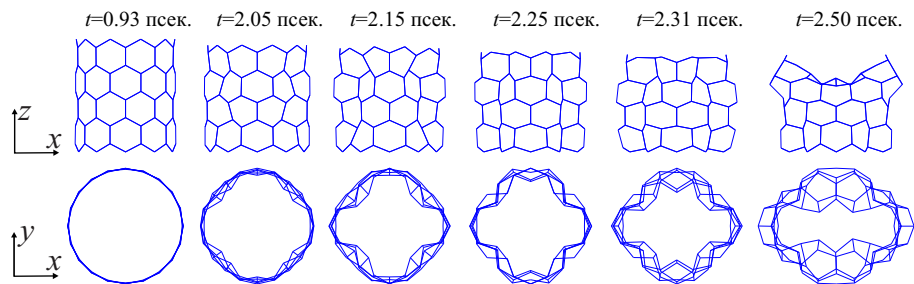


Рис. 3.18. Деформированные конфигурации в задаче об осевом сжатии «короткой» УНТ внезапно приложенной постоянной силой $F = 10$ нН (конфигурации соответствуют решению задачи с возмущением типа 4).

движения с последующими наложенными колебаниями (рис. 3.16,б). Деформированные конфигурации, соответствующие решениям задач статического и динамического деформирования (в последнем случае рассматриваются различные моменты времени при решении задачи с возмущением типа 4), приведены на рис. 3.18. Из рис. 3.18 видно, что при статическом деформировании поперечное сечение УНТ остается круглым, а при динамическом деформировании в закритическом режиме оно теряет это свойство.

Случай 3: $F = 25$ нН. В отличие от первых двух случаев, в настоящем расчете сила F , действующая на верхний слой атомов, превышает критическую силу F_{cr}^s выпучивания нанотрубки при квазистатическом деформировании. Пошаговое интегрирование уравнения движения проводилось с шагом по времени $\Delta t = 0.001$ пс (таким же, как и для первых двух случаев нагружения). На рис. 3.19 приведены результаты расчетов задачи без возмущения параметров и с возмущениями параметров типов 1 – 4. На рис. 3.19,а приведены кривые зависимости « $w \sim t$ » на интервале времени 2.5 пс, а на рис. 3.19,б эти кривые показаны на выделенном интервале времени деформирования, равным 1.0 пс. Точка квазифуркации получена на сегменте времени $[0.012; 0.013]$ пс. На этом сегменте времени сменил знак один диагональный элемент матрицы \mathbf{D} . Для уточнения сегмента времени, в котором заключена точка квазифуркации, задача без возмущений параметров решалась до конечного значения по времени 0.05 пс с шагом $\Delta t = 0.00005$ пс. В этом расчете точка квазифуркации на фундаментальном решении получена на сегменте времени $[0.0105; 0.01055]$ пс. На этом сегменте времени меняет знак только один элемент матрицы \mathbf{D} . Частоты и формы колебаний предварительно нагруженной нанотрубки (нижняя форма соответствует форме выпучивания УНТ), полученные при решении обобщенной задачи на собственные значения в расчете с шагом по времени $\Delta t = 0.00005$ пс, представле-

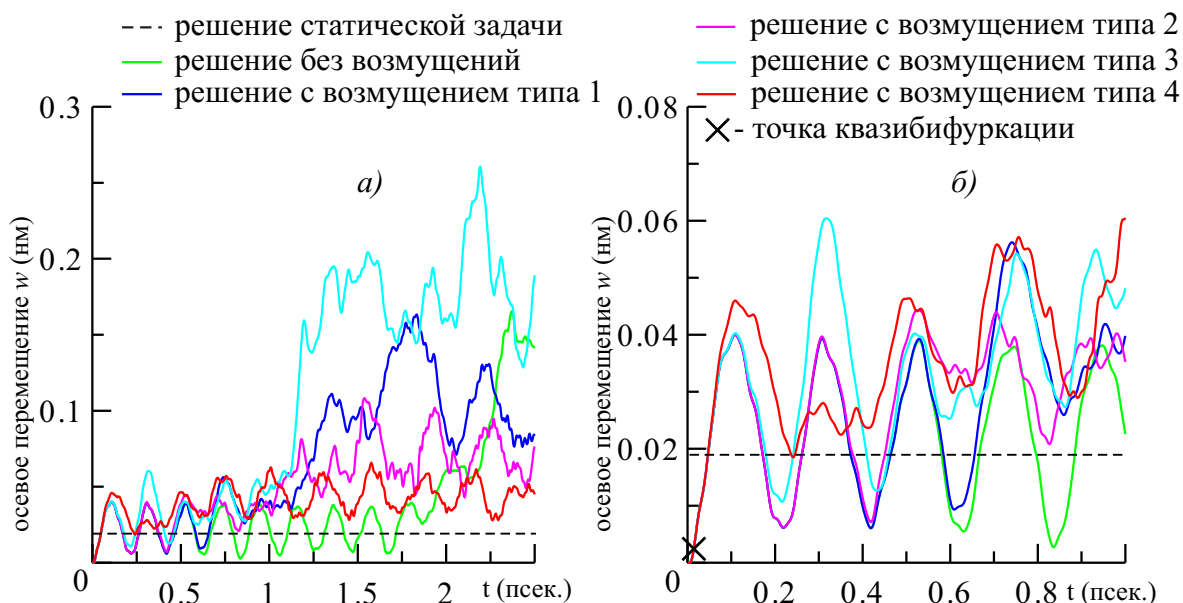


Рис. 3.19. Кривые зависимости « $w \sim t$ » в задаче о деформировании «короткой» УНТ под действием внезапно приложенной силы $F = 25$ нН на интервалах времени: а) $[0; 2.5]$ пс; б) $[0; 1.0]$ пс.

ны на рис. 3.20 (отметим, что при решении задачи с шагом по времени $\Delta t = 0.001$ пс также получены близкие значения частот и собственных форм). Форма выпучивания нанотрубки в точке квазибифуркации соответствует форме собственных колебаний предварительно нагруженной УНТ с нижней частотой $\tilde{\omega} = 0.396$ (ТГц) (рис. 3.20). Из анализа графиков, представленных на рис. 3.19, следует, что на сегменте времени $[0; 2.5]$ пс все полученные численные решения не совпадают с фундаментальным («осесимметричным») решением с выполнением следующей закономерности: чем меньше величина возмущения параметров задачи, тем дольше по времени решение задачи следует близко к фундаментальному решению. Отметим, что на

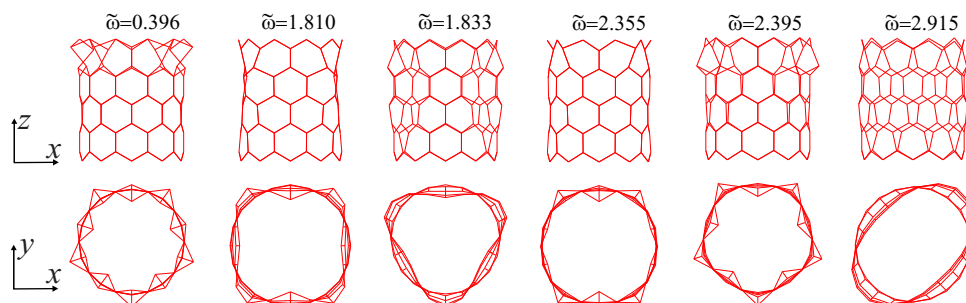


Рис. 3.20. Частоты $\tilde{\omega}$ (ТГц) и соответствующие формы выпучивания «короткой» УНТ в точке квазибифуркации, отмеченной знаком « \times » на рис. 3.19,б.

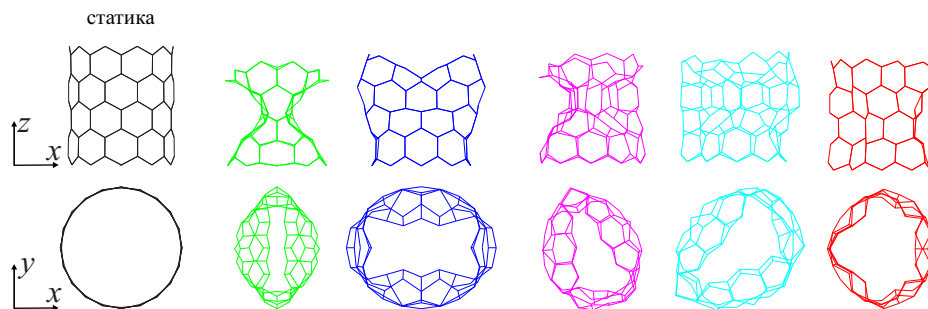


Рис. 3.21. Деформированные конфигурации в момент времени $t = 2.5$ пс, полученные в решениях задачи об осевом сжатии «короткой» УНТ внезапно приложенной постоянной силой $F = 25$ нН без возмущений и с возмущениями типов 1 – 4 (рис. 3.19, *a*).

сегменте времени $[0; 1.0]$ пс на рис. 3.19, *b* кривую решения задачи без возмущений параметров можно отождествить с кривой фундаментального решения. Деформированные конфигурации, отмеченные цветом, соответствующие кривым, отмеченным тем же цветом для каждого типа возмущений показаны в момент времени $t = 2.5$ пс (рис. 3.19) на рис. 3.21.

3.3 Деформирование и выпучивание УНТ «средней» длины, сжатой по оси

Рассмотрим УНТ типа «зигзаг» с индексами хиральности $(10, 0)$ радиуса $R = 0.3931$ нм длиной $L = 4.118$ нм, состоящую из 400 атомов (рис. 3.22). Граничные условия, схема нагружения и параметры пошагового интегрирования уравнений квазистатического/динамического деформирования те же, что и для «короткой» УНТ (раздел 3.1).

3.3.1 Квазистатическое деформирование

Интегральная кривая точек равновесия представлена на 3.22, *b*. Эта кривая представляет фундаментальное решение уравнений квазистатического деформирования УНТ, т. е. равновесные конфигурации фундаментального решения соответствуют «осесимметричному» деформированию УНТ. Возмущения в решение (см. раздел 3.1), вносимые погрешностью неточного задания начального положения атомов в УНТ с использованием одинарной точности арифметических вычислений не приводят в настоящих расчетах к потере «осесимметричного» характера деформирования (задание начального положения атомов в УНТ с использованием арифметики оди-

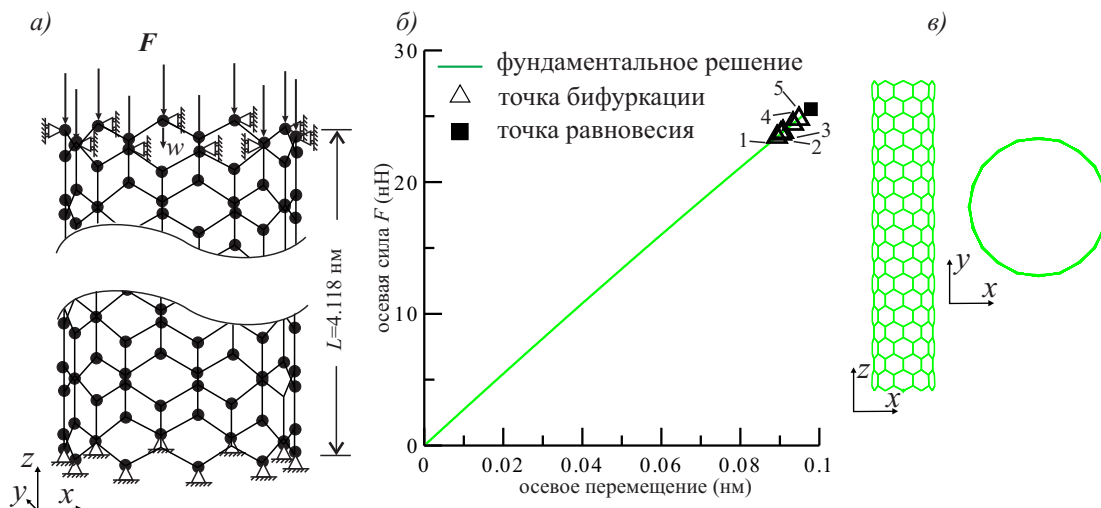


Рис. 3.22. Квазистатическое деформирование УНТ «средней» длины: а) нанотрубка; б) интегральная кривая; в) осесимметричная деформированная конфигурация, соответствующая точке «■» интегральной кривой и значению сжимающей нагрузки $F = 25.540$ нН.

нарной точности и двойной точности при решении задачи о квазистатическом деформировании УНТ соответствуют близким интегральным кривым, сливающимся в одну интегральную кривую фундаментального решения, представленную на рис. 3.22,б). На рис. 3.22,в приведена деформированная конфигурация УНТ, соответствующая фундаментальному решению. На фундаментальном решении получен ряд точек бифуркации с соответствующими формами выпучивания, приведенными на рис. 3.23. Отметим, что представлены только формы выпучивания, имеющие качественное различие между собой (т.е. не представлены кратные собственные формы, отличающиеся поворотом). Первая точка бифуркации получена на интервале изменения силы $F: (23.5531; 23.6779)$ нН. Поэтому полагаем критическим значением сжимающих сил F значение, равное $F_{cr} = 23.5531$ нН.

3.3.2 Динамическое деформирование

Сначала решаем вспомогательную задачу по определению частот и форм собственных колебаний (2.28) УНТ. Несколько нижних пар частот и форм собственных колебаний представлены на рис. 3.24. Из (2.29) получим верхнюю оценку шага интегрирования Δt ($I=12$):

$$\tilde{\omega}_I = 2.316 \text{ ТГц}, \quad T_I = \frac{1}{\tilde{\omega}_I} = 0.4318 \text{ пс}, \quad \Delta t_{max} = \frac{T_I}{10} \approx 0.0431 \text{ пс}.$$

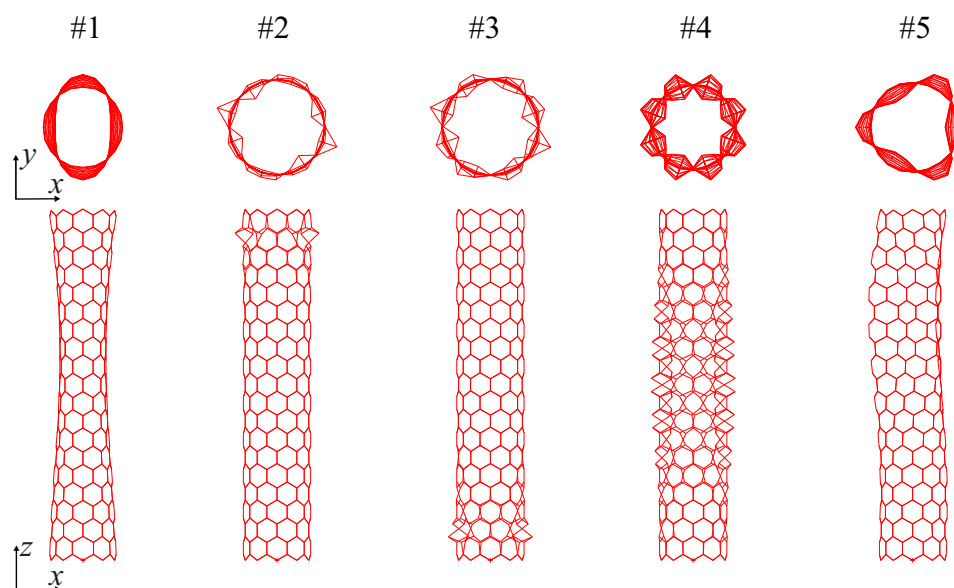


Рис. 3.23. Формы выпучивания УНТ «средней» длины, соответствующие точкам бифуркации интегральной кривой, представленным на рис. 3.22,б.

Этот шаг интегрирования позволяет достаточно точно воспроизвести вклад 12-ти форм собственных колебаний, представленных на рис. 3.24, в численное решение задачи деформирования УНТ, по крайней мере, в начальный момент выхода УНТ из состояния равновесия. Решения задач, представленные ниже, получены путем пошагового интегрирования уравнений движения с шагами Δt , значения которых не превышают оцененного выше значения $\Delta t = 0.0431$ пс.

Вторая серия расчетов проведена в предположении о сжатии УНТ силой F , возрастающей с постоянной скоростью $\dot{F} = 25$ нН/пс. На рис. 3.25 представлены два решения с шагом интегрирования $\Delta t = 0.005$ пс, которые обозначены как «решение без возмущений» и «решение с возмущением типа 1». Точка квазибифуркации фундаментального решения, отмеченная знаком « \times » на рис. 3.25,б, соответствует потере положительной определенности матрицы касательной жесткости на сегменте времени $t: [0.950; 0.955]$ пс, на котором сила F изменяется в сегменте $(20.995; 21.235)$ нН, причем на этом интервале изменил знак только один диагональный элемент матрицы \mathbf{D} т. е. в точке квазибифуркации имеется одна (некратная) форма выпучивания. Для ее определения решается задача (2.32), но на рис. 3.26 представлена не только нижняя форма, соответствующая первой частоте, но и высшие формы, представляющие интерес, во-первых, с точки зрения анализа изменения спектра частот, по сравнению с представленным спектром на рис. 3.24, и, во-вторых, высшие формы могут стать формами выпучивания при дальнейшем продолжении фундаментального (осе-

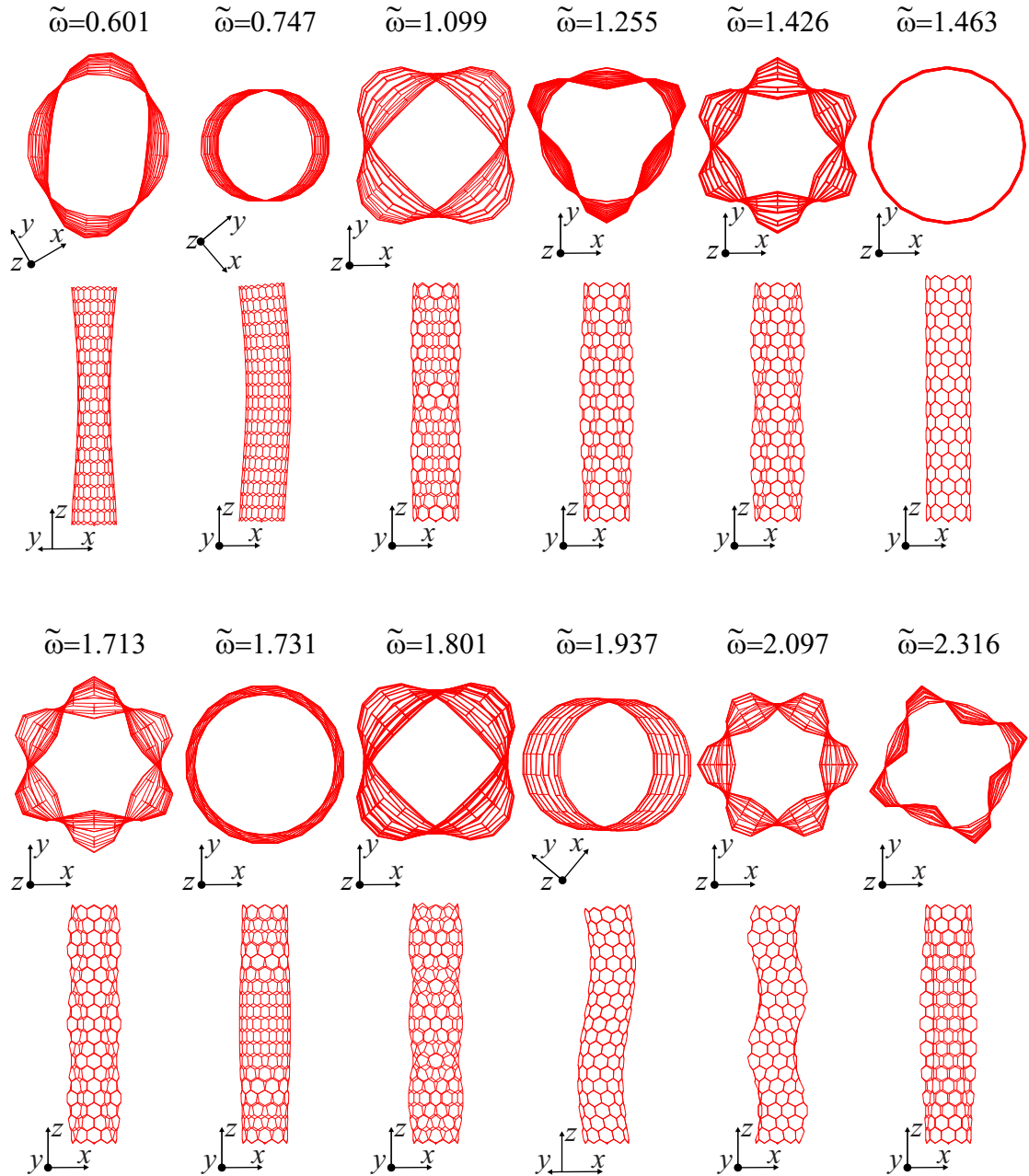


Рис. 3.24. Нижние частоты $\tilde{\omega}$ (ТГц) и соответствующие им формы свободных колебаний УНТ «средней» длины.

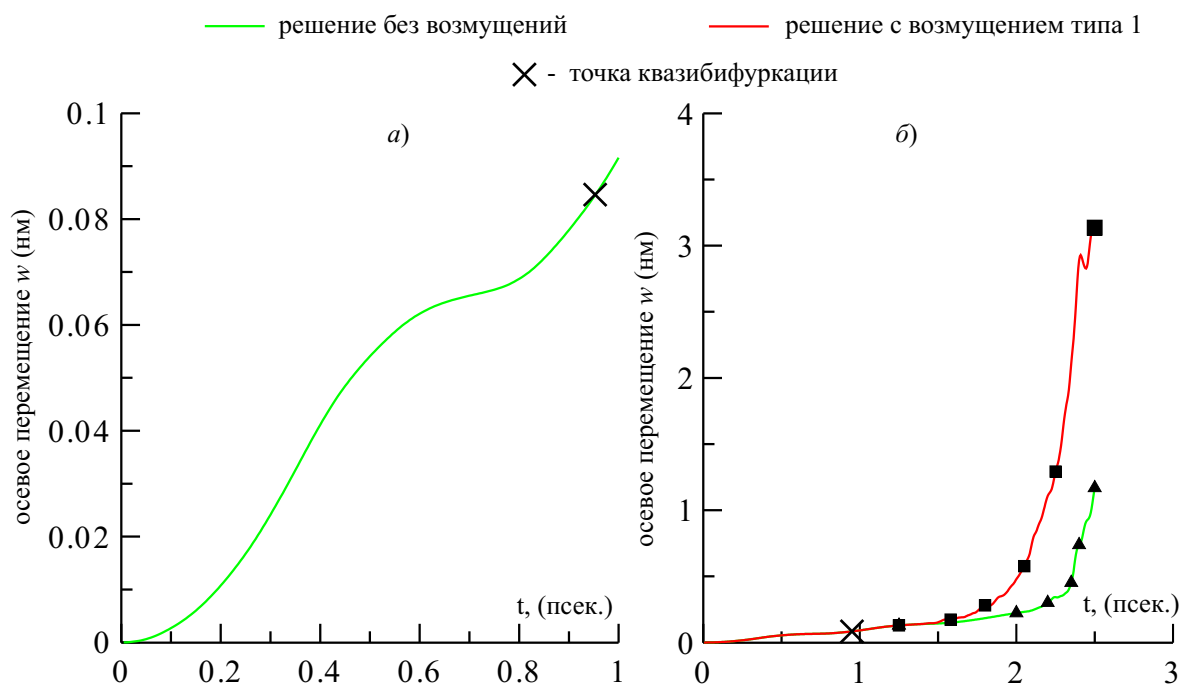


Рис. 3.25. Динамическое деформирование УНТ «средней» длины, сжатой силой, возрастающей с постоянной скоростью $\dot{F} = 25$ нН/пс: *a*) участок устойчивого решения; *б*) поведение решения за точкой квазибифуркации в зависимости от величины введенного в решение возмущения.

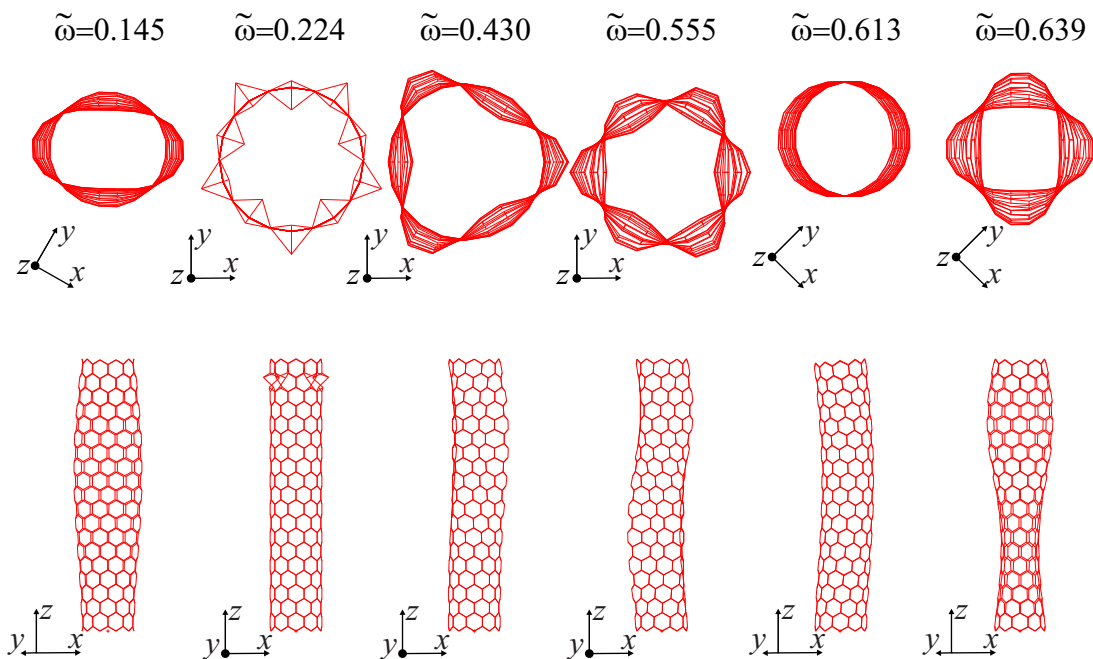


Рис. 3.26. Нижние частоты $\tilde{\omega}$ (ТГц) и соответствующие им формы собственных колебаний УНТ «средней» длины, в точке квазибифуркации, отмеченной знаком « \times » на рис. 3.25,б.

симметричного) решения (т. е. для следующих возможных точек квазибифуркации). Сравнивая частоты и соответствующие им формы свободных колебаний УНТ при $t = 0$ пс (рис. 3.24) с частотами и формами собственных колебаний предварительно нагруженной УНТ при $t = 0.9225$ пс (рис. 3.26), отмечаем их существенную трансформацию в точке квазибифуркации по отношению к точке равновесия $t = 0$ пс, со следующим отношением нижних частот $\tilde{\omega}_1^b / \tilde{\omega}_1^0 = 0.079 / 2.42 = 0.0326$ ($\tilde{\omega}_1^0$ и $\tilde{\omega}_1^b$ — нижние частоты при $t = 0$ и $t = 0.9225$ пс, соответственно). Также отмечаем тождественность первой нижней формы выпучивания при статическом и динамическом анализах (см. рис. 3.23 и рис. 3.26). Как и предсказывает теория, решение на интервале времени от $t = 0$ до $t = 0.9225$ пс (т. е. до точки квазибифуркации) устойчиво и кривые обоих решений сливаются в кривую, представленную на 3.25,а. Колебательный режим движения (с периодом $T = 0.684$ пс, соответствующим частоте $\tilde{\omega} = 1.463$ ТГц собственных колебаний) отчетливо обнаруживается на 3.25,а. Этот колебательный режим сменяется неосциллирующим движением (дивергентного типа) почти сразу за точкой квазибифуркации для решения с возмущением и, спустя некоторое время, также для решения без возмущений (рис. 3.25,б). Деформированные конфигурации УНТ для решения задачи без возмущений и решения с возмущением типа 1 представлены на рис. 3.27, 3.28, соответственно, для точек на интегральных кривых, обозначенных

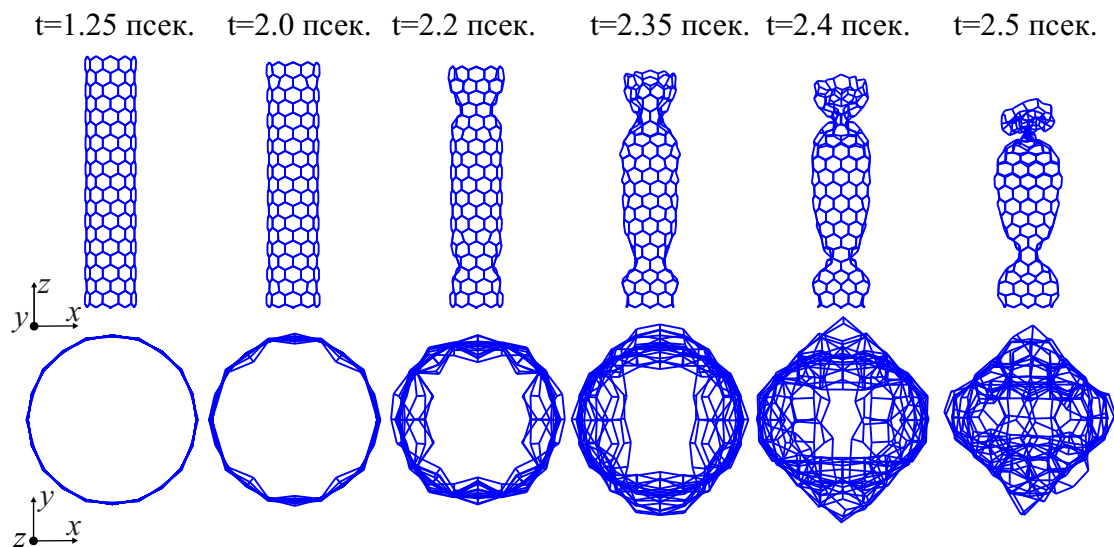


Рис. 3.27. Деформированные конфигурации УНТ «средней» длины, полученные в решении без возмущений (формы соответствуют точкам, отмеченным знаком «▲», на интегральной кривой рис. 3.25,б).

знаками «■» и «▲» на рис. 3.25,б.

3.4 Деформирование и выпучивание «длинной» УНТ, сжатой по оси

Рассмотрим УНТ типа «зигзаг» с индексами хиральности $(10,0)$ радиуса $R = 0.3931$ нм, длиной $L = 16.90$ нм, состоящую из 1600 атомов. Граничные условия, схема нагружения и параметры пошагового интегрирования уравнений квазистатического/динамического деформирования те же, что и для «короткой» и «средней» УНТ (см. раздел 3.2). Далее под решением без «возмущений» и решением с «возмущением типа 1» понимаем решения, полученные при определении начальных положений атомов УНТ с точностью до 16 и 5 значащих цифр, соответственно; под решением «PFT1» понимаем решение, полученное при задании возмущающих сил величины $0.1\delta F$, приложенных к 20-ти атомам (двум кольцам по 10 атомов) в середине УНТ так, что равнодействующая этих сил равна $2\delta F$ (см. рис. 3.29,б); под решением «PFT2» понимаем решение, полученное при задании возмущающих сил величины $0.1\delta F$, приложенных на одинаковом расстоянии от центра УНТ (см. рис. 3.29,в).

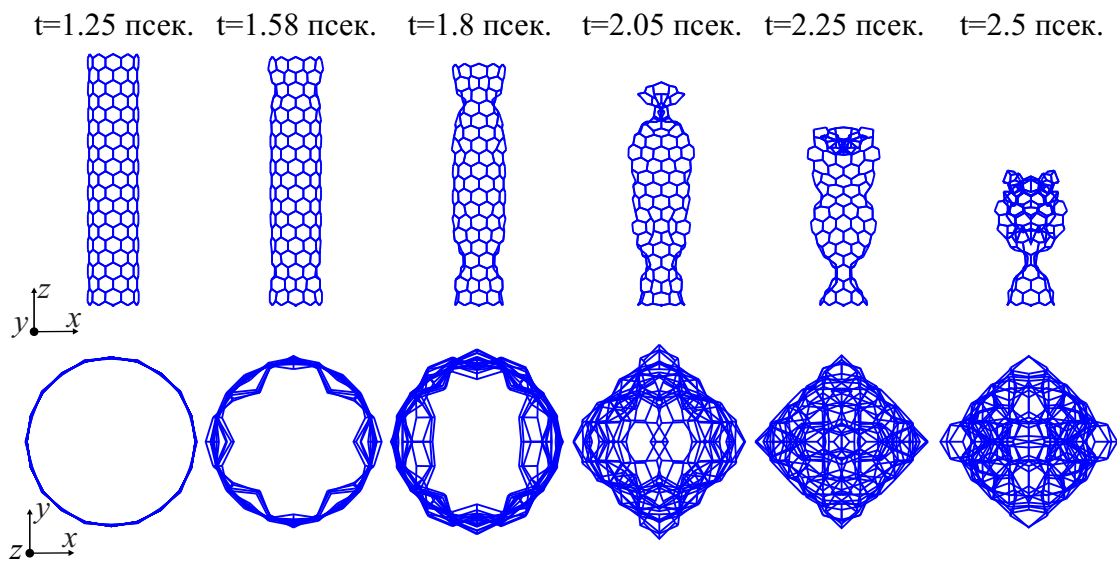


Рис. 3.28. Деформированные конфигурации УНТ «средней» длины, полученные в решении с возмущением типа 1 (формы соответствуют точкам, отмеченным знаком «■», на интегральной кривой рис. 3.25,б).

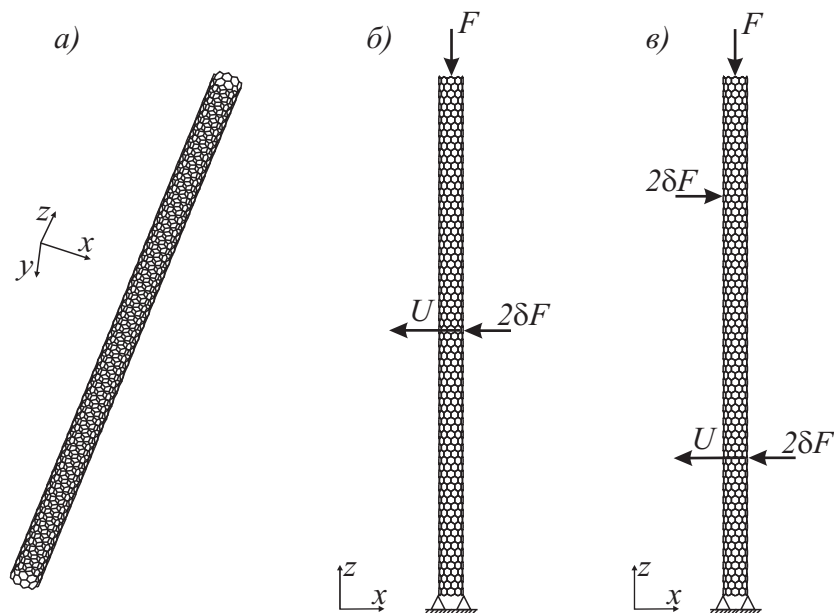


Рис. 3.29. «Длинная» УНТ, сжимаемая осевой силой F : а) общий вид; б) возмущающая сила $2\delta F$ типа PFT1; в) возмущающие силы $2\delta F$ типа PFT2.

3.4.1 Квазистатическое деформирование

Интегральные кривые для различных решений (без возмущений, с возмущениями типов 1, PFT1 и PFT2) представлены на рис. 3.30. Здесь же знаками «×» отмечены точки бифуркации. Типичные равновесные конфигурации при выпучивании УНТ для различных типов приложения возмущающих сил приведены на 3.30, *a, б*. Эти конфигурации соответствуют двум нижним стержнеобразным формам, полученным при решении обобщенной задачи на собственные значения (2.26) в точках бифуркации $F_{b,1}$ и $F_{b,2}$ (см. рис. 3.31, *a, б*). Более высшие (не стержнеобразные) формы близки по критическим нагрузкам друг к другу (см. рис. 3.30) и некоторые из них приведены на рис. 3.31, *в, г*. Формы выпучивания, полученные при решении обобщенной задачи на собственные значения (2.26), соответствующие точкам поворота (максимума), для решений с возмущениями различного типа (см. рис. 3.30) приведены на рис. 3.32. Отметим близость к формам выпучивания, полученных в точках бифуркации решения без возмущений (рис. 3.31), к формам, полученных в точках поворота решений с возмущениями различных типов (рис. 3.32).

3.4.2 Динамическое деформирование

Сначала решаем вспомогательную задачу по определению частот и форм собственных колебаний (2.28) УНТ. Несколько нижних пар частот и форм собственных колебаний представлены на рис. 3.33. Из (2.29) получим верхнюю оценку шага интегрирования Δt ($I=12$):

$$\tilde{\omega}_I = 0.757 \text{ ТГц}, \quad T_I = \frac{1}{\tilde{\omega}_I} = 1.321 \text{ пс}, \quad \Delta t_{max} = \frac{T_I}{10} \approx 0.132 \text{ пс}.$$

Этот шаг интегрирования позволяет достаточно точно воспроизвести вклад 12-ти форм собственных колебаний, представленных на рис. 3.33, в численное решение задачи деформирования УНТ, по крайней мере, в начальный момент выхода УНТ из состояния равновесия.

Вторая серия расчетов проведена в предположении о сжатии УНТ силой F , возрастающей с постоянной скоростью $\dot{F} = 6.25 \text{ нН/пс}$. На рис. 3.34 представлены два решения с шагом интегрирования $\Delta t = 0.02 \text{ пс}$, которые обозначены как «решение без возмущений» и «решение с возмущением типа 1». Там же обозначены три точки квазибифуркации фундаментального решения. Нижние частоты и формы собственных колебаний предварительно нагруженной УНТ, соответствующие нижней точке квазибифуркации $F_{b,1}$ (см. рис. 3.34), представлены на рис. 3.35. Отметим, что первые пять форм собственных колебаний в точке квазибифуркации (рис. 3.35) совпадают с

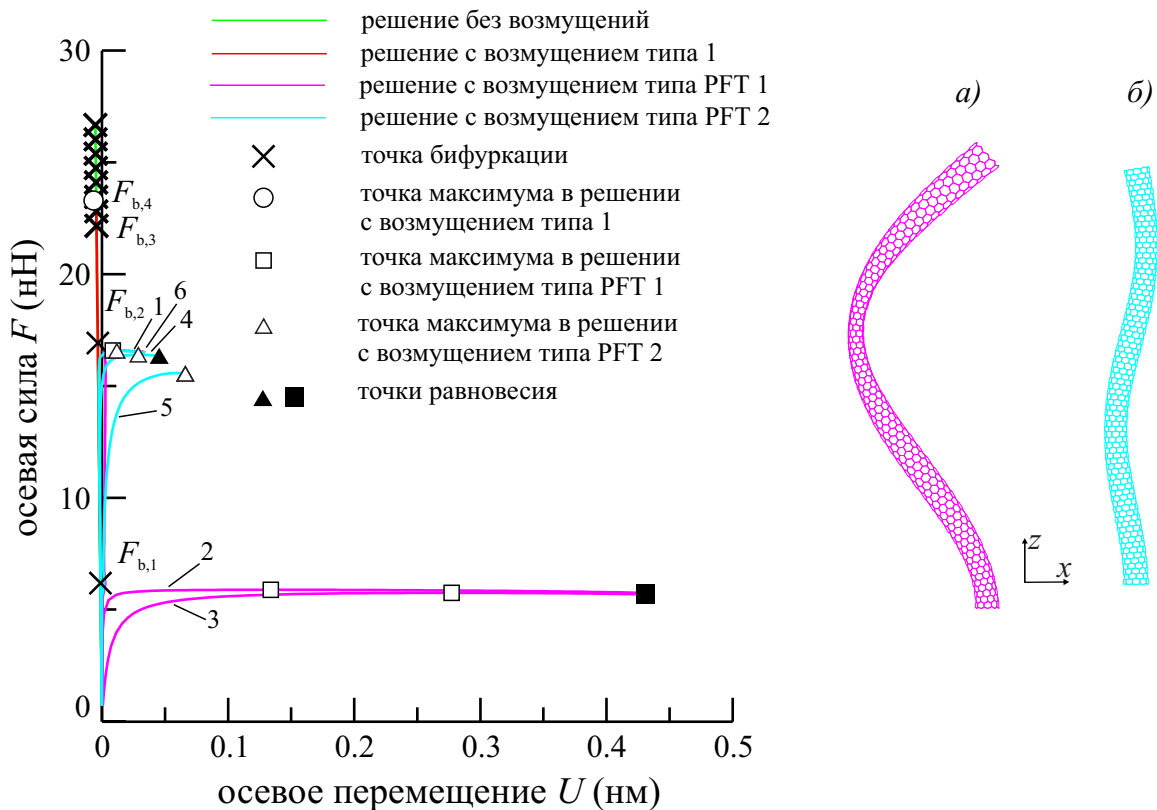


Рис. 3.30. Интегральные кривые квазистатического деформирования «длинной» УНТ: кривые 1, 2, 3 соответствуют решениям с возмущениями типа PFT1 для $\delta = 10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}$; кривые 4, 5, 6 соответствуют решениям с возмущениями типа PFT2 для $\delta = 10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}$; $F_{b,1} = 6.1826$ нН — точка бифуркации, полученная в решении задач без возмущений, с возмущением типа 1 и с возмущениями типов PFT1 ($\delta = 10^{-5}$) и PFT2 ($\delta = 10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}$); $F_{b,2} = 16.9182$ нН, $F_{b,3} = 22.1568$ нН — точки бифуркации, полученные в решении задач без возмущений и с возмущением типа 1; $F_{b,4} = 22.8053$ нН — точка бифуркации, полученная в решении задачи без возмущений. Равновесные конфигурации нанотрубки, полученные в закритическом деформировании (с 10-ти кратным масштабированием вектора перемещений) соответствуют точкам: а) — ■; б) — ▲.

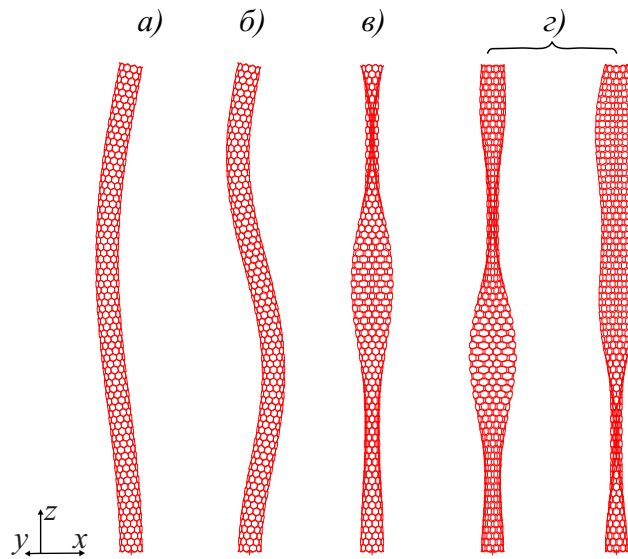


Рис. 3.31. Формы выпучивания «длинной» УНТ, соответствующие нагрузкам бифуркации F_b (см. рис. 3.30): а) нижняя форма в точке $F_b = F_{b,1}$; б) нижняя форма в точке $F_b = F_{b,2}$; в) нижняя форма в точке $F_b = F_{b,3}$; з) две близкие нижние формы в точке $F_b = F_{b,4}$.

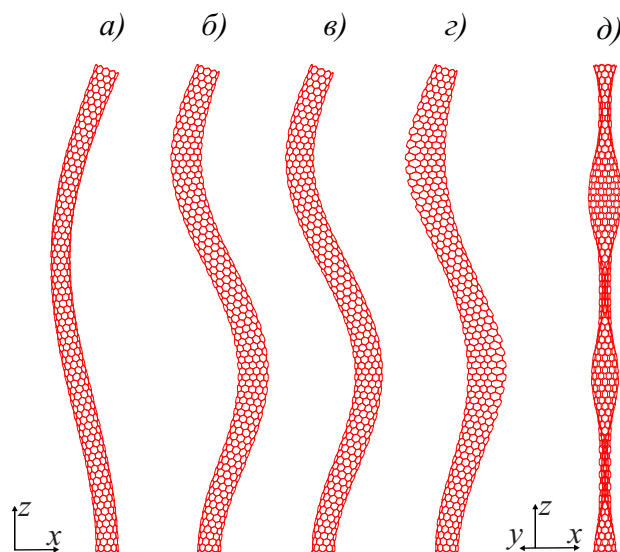


Рис. 3.32. Формы выпучивания «длинной» УНТ, соответствующие нагрузкам максимума (см. рис. 3.30) для: а) решений с возмущением типа PFT1 ($\delta = 10^{-4}, 10^{-3}$), см. кривые 2, 3 на рис. 3.30; б) решения с возмущением типа PFT2 ($\delta = 10^{-4}$), см. кривую 4 на рис. 3.30; в) решений с возмущениями типа PFT1 и типа PFT2 ($\delta = 10^{-5}$), см. кривые 1, 6, на рис. 3.30; з) решения с возмущением типа PFT2 ($\delta = 10^{-3}$), см. кривую 5 на рис. 3.30; д) решения с возмущением типа 1, см. рис. 3.30.

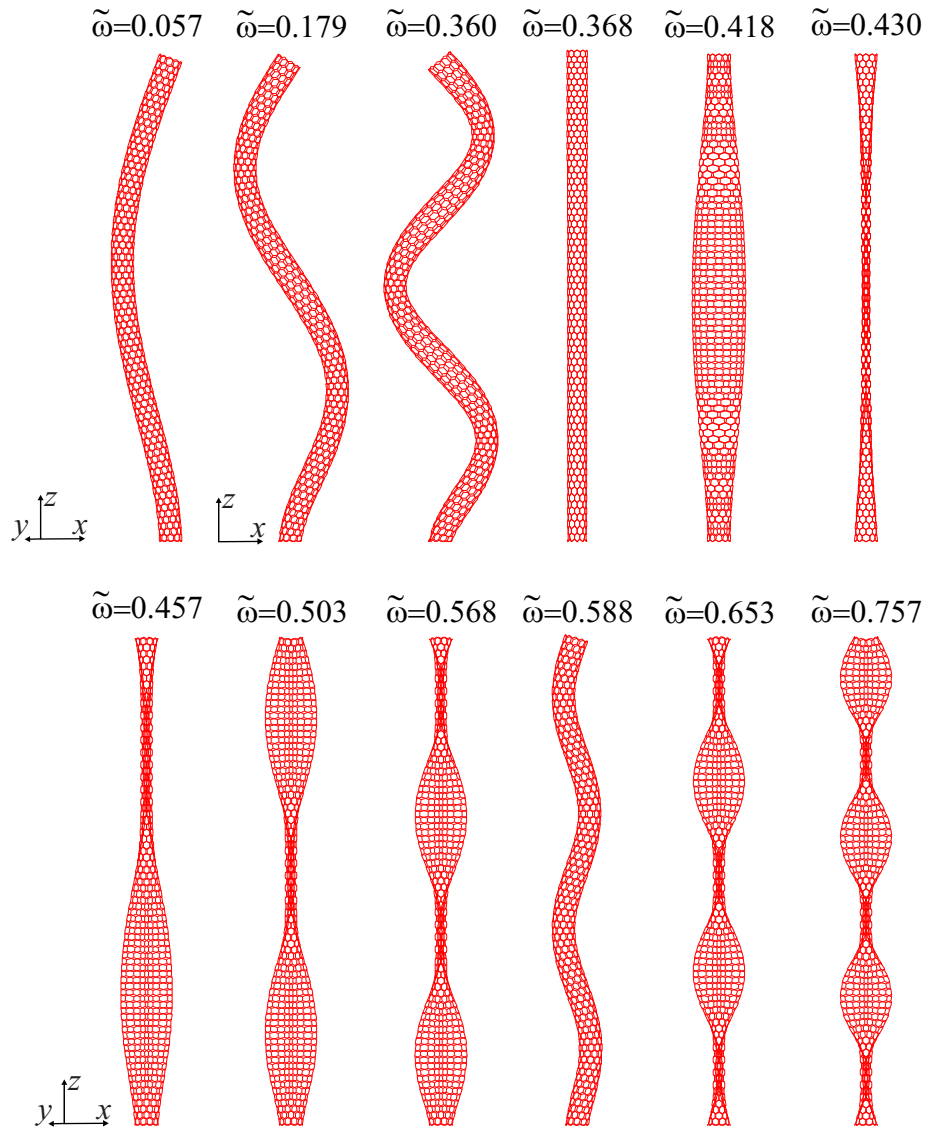


Рис. 3.33. Нижние частоты $\tilde{\omega}$ (ТГц) и соответствующие им формы собственных колебаний «длинной» УНТ.

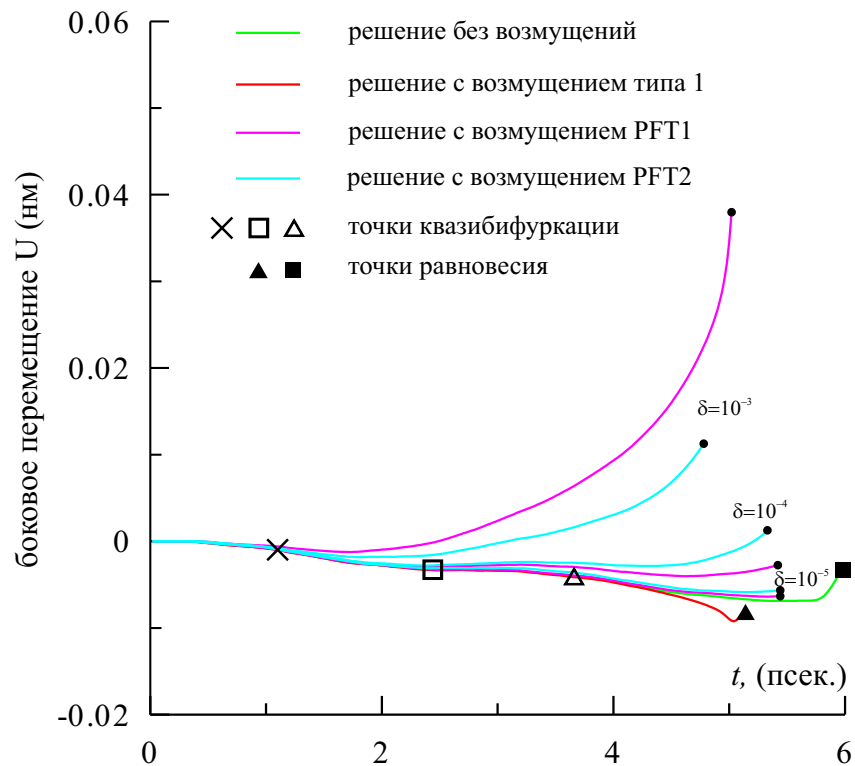


Рис. 3.34. Интегральные кривые динамического деформирования «длинной» УНТ, сжатой силой, возрастающей с постоянной скоростью $\dot{F} = 6.25$ нН/пс; «×», «□», «Δ» — точки квазифуркации, соответствующие силам $F_{b,1} = 5.4486$ нН, $F_{b,2} = 17.1170$ нН, $F_{b,3} = 20.2480$ нН; «■», «▲» — точки равновесия в решениях без возмущений и с возмущением типа 1, соответственно; «●» — точки равновесия в решениях с возмущениями типов PFT1, PFT2, деформированные конфигурации в этих точках представлены на рис. 3.37.

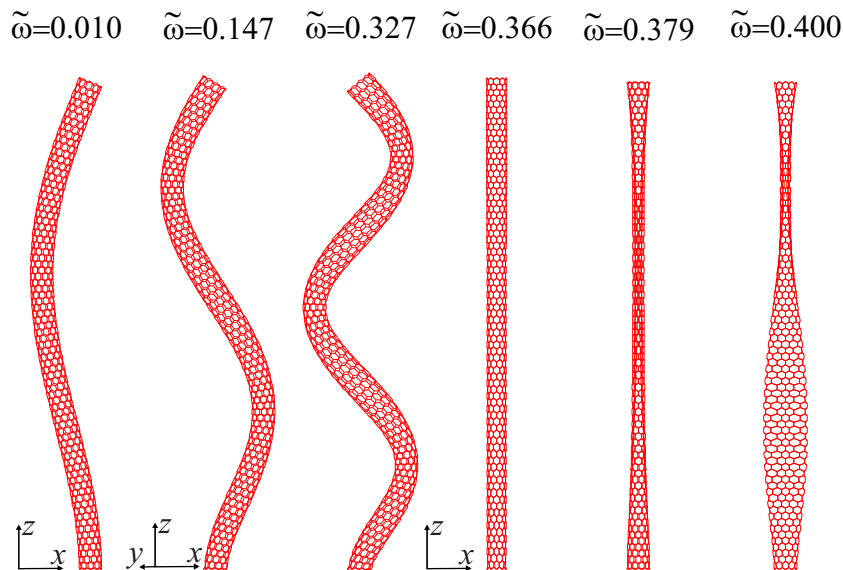


Рис. 3.35. Частоты $\tilde{\omega}$ (ТГц) и соответствующие им формы собственных колебаний предварительно нагруженной «длинной» УНТ, полученные в точке квазибифуркации « \times », отмеченной на рис. 3.34.

формами свободных колебаний, полученными при $t = 0$ (рис. 3.33). При этом формы выпучивания зависят от типа возмущения, введенного в процессе деформирования. Решение без возмущений и решение с возмущением типа 1 соответствуют форме выпучивания оболочек (рис. 3.36), а решения с возмущениями типов PFT1 и PFT2 соответствуют стержневой форме выпучивания (рис. 3.37).

3.5 Деформирование и выпучивание УНТ при кручении

Рассмотрим однослойную УНТ типа «зигзаг» с индексами хиральности $(10, 0)$ радиуса $R = 0.3931$ нм длины $L = 16.90$ нм, состоящую из 1600 атомов, подвергающуюся кручению заданными перемещениями на ее торцах (рис. 3.38,а). В осевом направлении ($x_3 = z$) атомам, находящимся на нижнем торце трубки, перемещения запрещены, а атомы на верхнем торце трубки могут перемещаться в этом направлении без ограничения. На обоих торцах трубки задается одно и то же значение угла закручивания φ . В настоящем исследовании значения M_1 и M_2 крутящих моментов на торцах находятся в процессе решения задачи через значения сил реакции, определяемых для атомов, расположенных на торцах нанотрубки. Так как в статическом анализе других внешних сил, кроме крутящих моментов M_1 и M_2 , нет, то

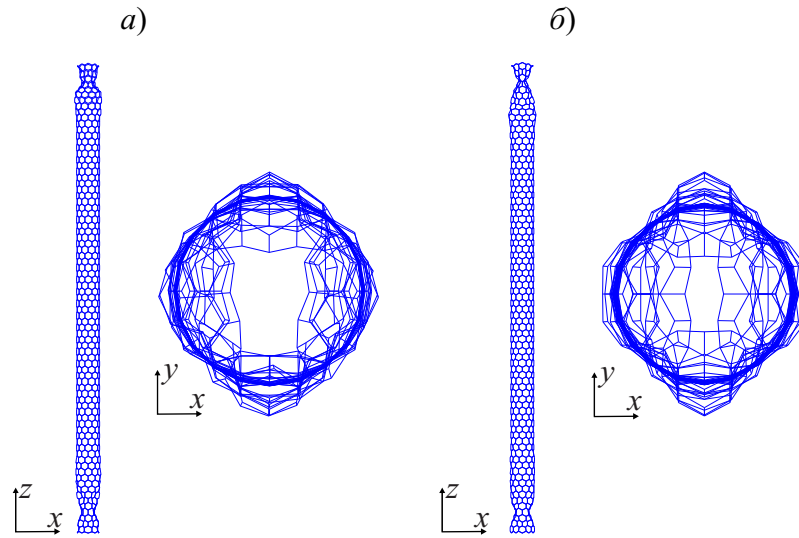


Рис. 3.36. Деформированные конфигурации «длинной» УНТ в точках равновесия, отмеченных на рис. 3.34 для: а) решения без возмущений (точка «■» на рис. 3.34); б) решения с возмущением типа 1 (точка «▲» на рис. 3.34).

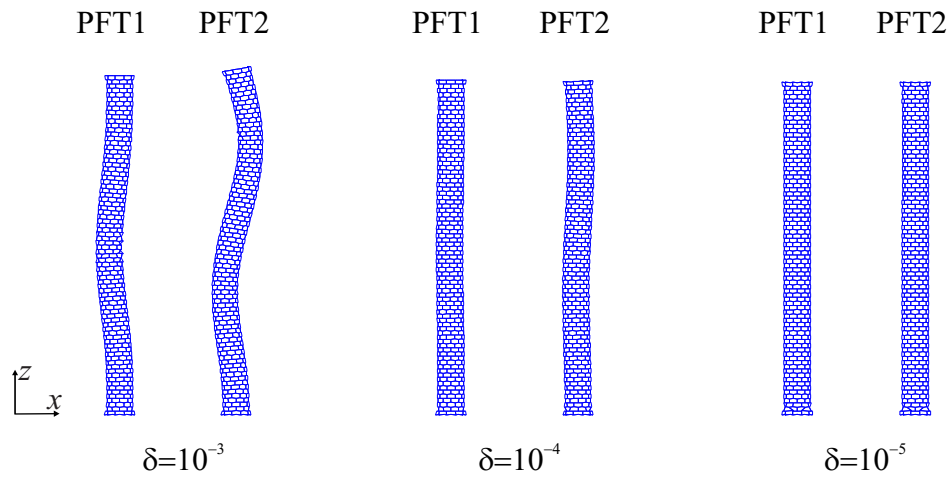


Рис. 3.37. Деформированные конфигурации «длинной» УНТ в точках равновесия (конечные точки кривых на рис. 3.34, отмеченные знаком «●»), полученные для решений с возмущениями типов PFT1 и PFT2 (перемещения увеличены в 10 раз по отношению к истинным значениям).

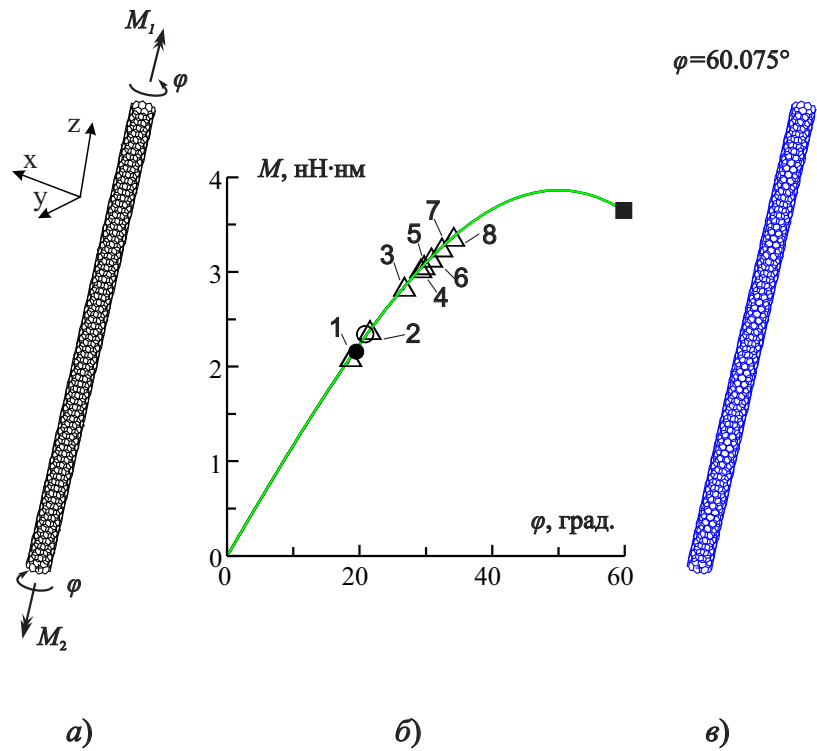


Рис. 3.38. Квазистатическое деформирование нанотрубки при кручении: а) общий вид; б) интегральная кривая; « Δ » — точки бифуркации, полученные в решении задачи без возмущений и с возмущением типа 1, « \circ » — точка максимума при решении задачи с возмущением типа 3, « \bullet » — точка максимума при решении задачи с возмущением типа 4; в) деформированная конфигурация нанотрубки в точке равновесия « \blacksquare », соответствующей решению задачи без возмущений при значении угла закручивания $\varphi = 60.075^\circ$.

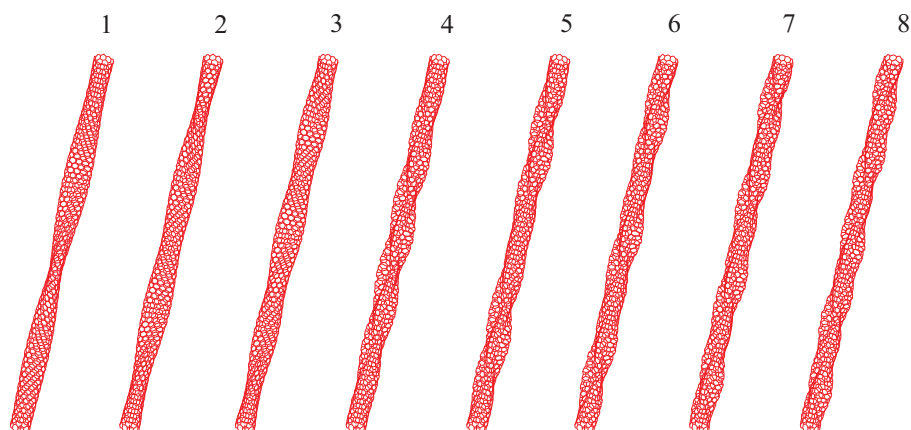


Рис. 3.39. Формы выпучивания нанотрубки при кручении, соответствующие точкам бифуркации 1, 2, ..., 8 на рис. 3.38,б.

из условия статического равновесия следует выполнение равенства $M = M_1 = M_2$, которое выполняется при численном решении задачи квазистатического деформирования. В динамическом анализе это равенство из-за присутствия инерционных сил может нарушаться. Тем не менее, в численных решениях, соответствующих фундаментальному решению (без складкообразования) динамической задачи о кручении нанотрубки, равенство $M = M_1 = M_2$ также соблюдается, поэтому далее в точках бифуркации и квазибифуркации приводится только одно критическое значение момента $M_{cr} = M_{1,cr} = M_{2,cr}$.

3.5.1 Квазистатическое деформирование

Численные эксперименты показали, что критический угол φ_{cr} , соответствующий первой точке бифуркации на интегральной кривой (рис. 3.38,б), достаточно точно представляется при интегрировании уравнений квазистатического деформирования с шагом угла закручивания $\Delta\varphi = 0,1125^\circ$. В этом случае матрица \mathbf{K} впервые теряет положительную определенность на фундаментальном решении, соответствующим деформированию нанотрубки без складкообразования (рис. 3.38,б) в интервале изменения угла закручивания $\varphi_{cr} \in (18.45^\circ, 18.675^\circ)$, при этом, критическое значение $M_{cr} \in (2.0812 \text{ нН} \cdot \text{нм}, 2.1039 \text{ нН} \cdot \text{нм})$. Полагаем критическим значением угла закручивания φ значение, равное $\varphi_{cr} = 18.45^\circ$, а крутящего момента — значение $M_{cr} = 2.0812 \text{ нН} \cdot \text{нм}$, соответствующие нижним значениям этих величин в интервалах их изменения. Формы выпучивания нанотрубки, полученные в точках бифуркации на фундаментальном решении (т.е. решении, которому соответствует закручивание нанотрубки без складкообразования), представлены на рис. 3.39. В соот-

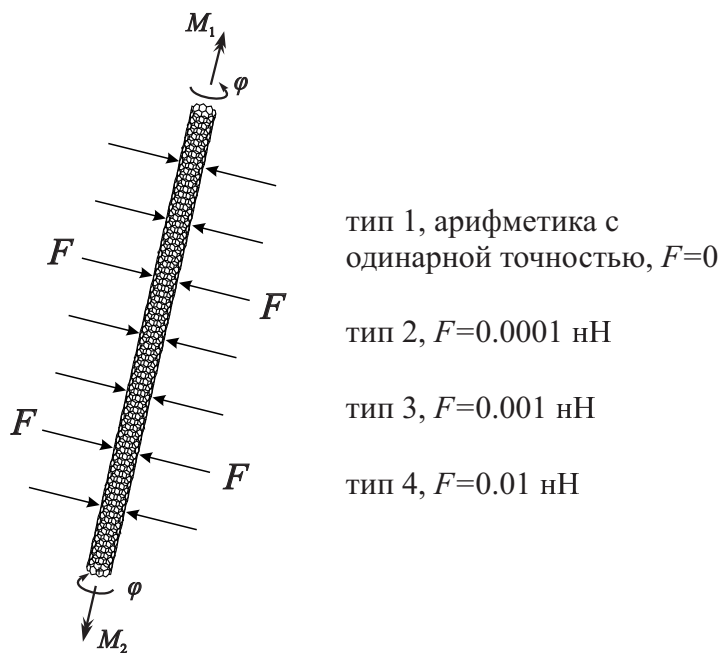


Рис. 3.40. Типы возмущений, вносимые в решения задачи о кручении УНТ.

ветствии с подходом по определению закритических деформированных конфигураций, представленным в [10, 11, 78], надо в процесс деформирования наноструктуры внести малое возмущение, по возможности согласованное с формой выпучивания, полученной в точке бифуркации решения. Далее, под решением задачи без возмущений понимаем решение, полученное при определении начальных положений атомов наноструктуры с использованием арифметики с двойной точностью (числа представляются 16-ю значащими цифрами). Под решением задачи с «возмущением типа 1» понимаем решение, полученное при определении начальных положений атомов наноструктуры с точностью до 5-ти первых значащих цифр, а под решениями задач с «возмущениями типов 2, 3, 4» понимаем решения задач, полученные при задании дополнительных сжимающих сил, которые приложены к атомам по всей длине и по разные от оси стороны нанотрубки, действующих вдоль оси x в противоположных направлениях и имеющих абсолютную величину $F = 10^{-4}$ нН; 10^{-3} нН; 10^{-2} нН, соответственно (рис. 3.40). Первые сингулярные точки на интегральных кривых решений задач с возмущениями типов 3, 4 меняют свой тип (по сравнению с решениями задач без возмущений и с возмущением типа 1) с точки бифуркации на точку поворота (в этой точке крутящий момент достигает своего максимального значения), но, почти сразу за точкой поворота, не удастся определить равновесные конфигурации в закритических режимах деформирования из-за расходимости итерационного процесса уточнения решения методом Ньютона — Рафсона. Тем не менее, эти точки поворо-

та расположены достаточно близко к первой точке бифуркации фундаментального решения (рис. 3.38,б).

3.5.2 Динамическое деформирование

Для того, чтобы получить закритические формы деформирования, моделируем квазистатическое деформирование динамическим деформированием с достаточно растянутым по времени приложением угла закручивания φ . Под «достаточно растянутым по времени» режимом кручения нанотрубки понимаем такой режим, при котором, во-первых, точка квазибифуркации фундаментального решения динамического деформирования нанотрубки близка к точке бифуркации фундаментального решения квазистатического деформирования этой же нанотрубки и, во-вторых, формы выпучивания совпадают в обоих случаях.

Следуя подходу к определению максимально допустимого шага по времени Δt при решении задач динамического деформирования наноструктур, представленному в главе 2, решаем вспомогательную задачу (2.28) по определению частот и форм собственных колебаний УНТ. Нижние 12 собственных частот и соответствующих им форм собственных колебаний представлены на рис. 3.33. Из (2.29) получена верхняя оценка шага интегрирования $\Delta t_{max} = 0.132$ пс, такая же, что и в задаче о динамическом деформировании «длинной» УНТ под действием осевой нагрузки (см. раздел 3.3.2). Численными экспериментами установлено, что достаточно растянутый по времени режим деформирования реализуется при закручивании нанотрубки со скоростью $\dot{\varphi} = 3.6$ град/пс, при этом атомы на каждом торце нанотрубки совершают полный оборот (т.е. $\varphi = 360^\circ$) за интервал времени $T = 100$ пс. Тогда при интегрировании уравнений движения нанотрубки с шагом $\Delta t = 0.03125$ пс ($\Delta t < \Delta t_{max}$), при котором $\Delta\varphi = 0.1125^\circ$ (т.е. таким же, как и для квазистатического интегрирования), получаем точку квазибифуркации, соответствующую $\varphi_{cr} = 18.45^\circ$, $M_{cr} = 2.1751$ нН · нм. Численными экспериментами был подобран шаг по времени $\Delta t = 0.00625$ пс ($\Delta\varphi = 0.0225^\circ$), обеспечивающий сходимость решения вплоть до достижения углом закручивания значения 360° .

Результаты расчетов динамического деформирования нанотрубки при кручении как для решения задачи без возмущений, так и для решений задач с возмущениями типов 1, 2, 3, 4, приведены на рис. 3.41-3.44. На рис. 3.41,а приведены кривые зависимости крутящего момента M_1 от угла закручивания φ для расчетов, выполненных вплоть до значения угла закручивания $\varphi = 60.075^\circ$. Графики зависимости моментов M_1 и M_2 от φ на этом масштабе различаются незначительно, поэтому представлена только зависимость M_1 от φ . Штриховая линия соответствует графику зависимости

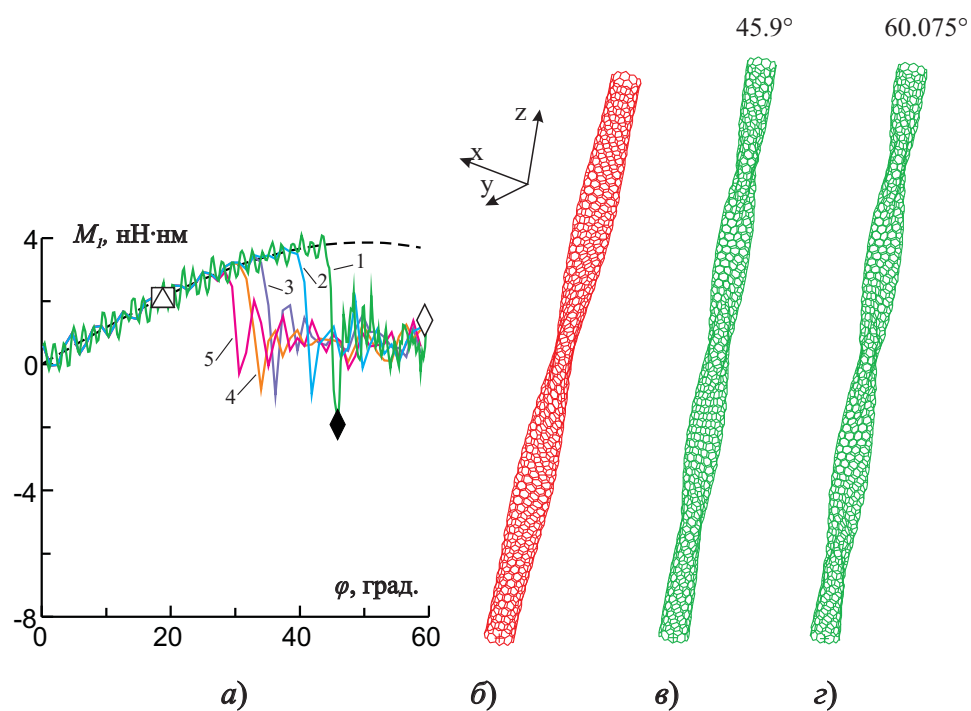


Рис. 3.41. Динамическое деформирование нанотрубки при постоянной скорости закручивания $\dot{\varphi} = 3.6$ град/пс: а) интегральные кривые; б) форма выпучивания, соответствующая невозмущенному решению динамической задачи в точке квазибифуркации; в), з) деформированные конфигурации, полученные в решении задачи без возмущений, в точках, отмеченных знаками « \blacklozenge », « \blacklozenge » на кривой 1, соответственно.

$M_1 \sim \varphi$ в решении задачи квазистатического деформирования, сплошные линии — графикам аналогичных зависимостей в решениях задач динамического деформирования. В последнем случае линия 1 соответствует решению задачи без возмущений, линии 2, 3, 4, 5 — решениям задач с возмущениями типов 1, 2, 3, 4, соответственно. Точка бифуркации решения задачи квазистатического деформирования нанотрубки показана знаком « \triangle », близкая к ней точка квазибифуркации решения задачи динамического деформирования — знаком « \square ». Отметим, что формы выпучивания в точках бифуркации (рис. 3.39, форма 1) и квазибифуркации (рис. 3.41,б) идентичны. Знаками « \blacklozenge » и « \blacklozenge » отмечены точки динамического равновесия на кривой 1, которым отвечают деформированные конфигурации нанотрубки, приведенные на рис. 3.41,в и 3.41,г, соответственно. Анализируя графики расчетов, приведенные на рис. 3.41,а, отмечаем что, чем меньше величина возмущения, внесенного в решение задачи, тем дальше от точки квазибифуркации кривая решения критического деформирования ответвляется от кривой фундаментального решения (от угла закручивания $\varphi = 29.475^\circ$ для кривой 5, до $\varphi = 44.550^\circ$ для кривой 1), при этом кривая решения задачи с возмущением типа 4, ответвляется от кривой фундаментального решения в точке, близкой к точке квазибифуркации. Сама точка ответвления от фундаментального решения определялась достижением крутящим моментом M максимальной величины M_{max} . Отмечаем, что начальный участок кривой при ответвлении от фундаментального решения соответствует решению задачи критического деформирования без осцилляций (т. е. на этом участке решение имеет тип дивергенции). Несмотря на различные значения M_{max} для решений задач с разными типами возмущений, для всех вариантов расчетов равновесные конфигурации, соответствующие начальным участкам кривых критического деформирования, близки к форме выпучивания нанотрубки, полученной в точке квазибифуркации (рис. 3.41,б).

При дальнейшем деформировании (при значениях угла закручивания $\varphi > 60.075^\circ$) кривые $M \sim \varphi$ для крутящих моментов M_1 и M_2 , приложенных к разным торцам нанотрубки, расходятся, поэтому на рис. 3.42 представлены кривые обеих зависимостей, $M_1 \sim \varphi$ и $M_2 \sim \varphi$, соответственно. Кривые соответствуют решениям задач динамического деформирования (кривая 1 получена при решении задачи без возмущений, а кривая 2 — с возмущением типа 4). Равновесные конфигурации критического деформирования нанотрубки для решения задачи без возмущений, соответствующие точкам, отмеченным знаком « \circ » на интегральных кривых (рис. 3.42), приведены на рис. 3.43,а, а для решения задачи с возмущением типа 4 такие же конфигурации, соответствующие точкам, отмеченным знаком « \blacklozenge » на интегральных кривых (рис. 3.42), приведены на рис. 3.43,б.

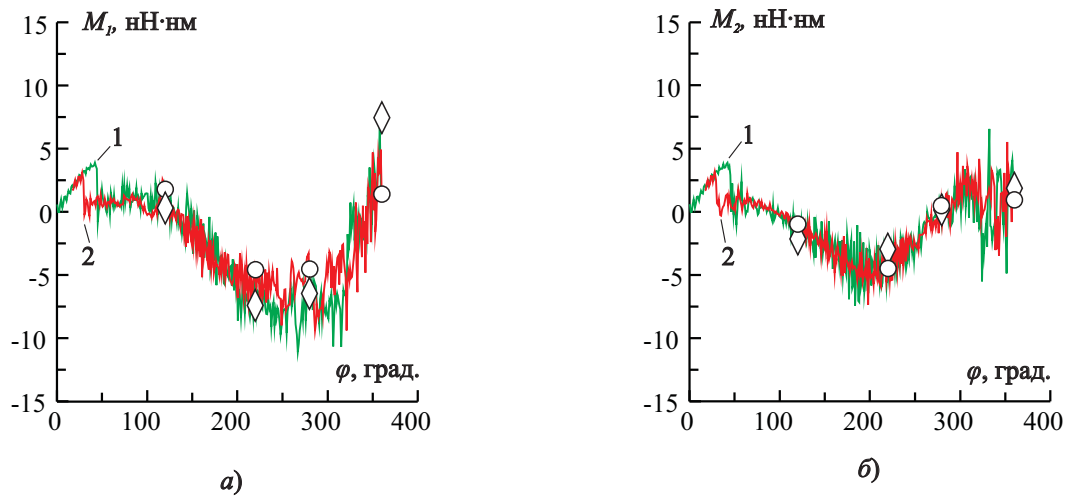


Рис. 3.42. Кривые зависимости крутящих моментов от угла закручивания φ : а) зависимость крутящего момента M_1 , приложенного к верхнему торцу нанотрубки; б) зависимость крутящего момента M_2 , приложенного к нижнему торцу нанотрубки.

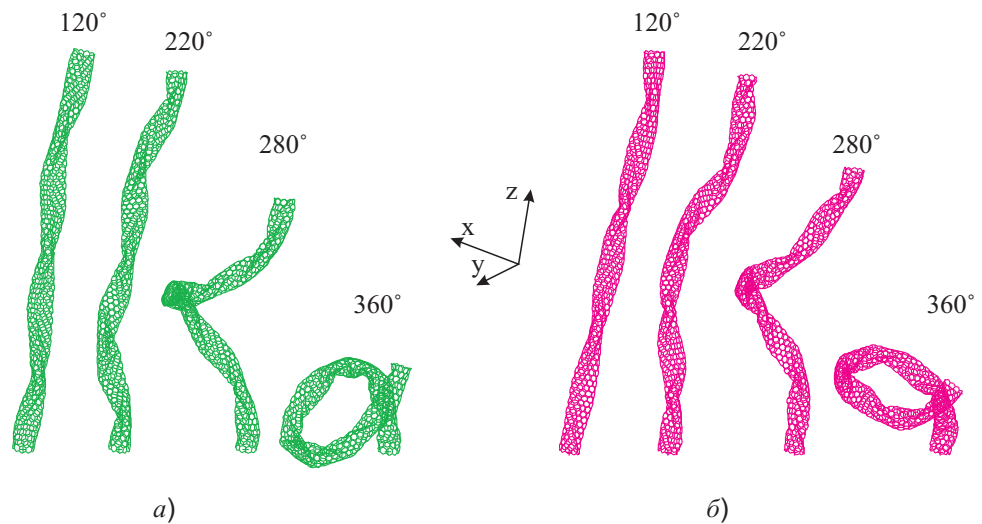


Рис. 3.43. Деформированные конфигурации нанотрубки при ее кручении, полученные с учетом сил нековалентного взаимодействия ВдВ между ее стенками: а) решение задачи без возмущений; б) решение задачи с возмущением типа 4.

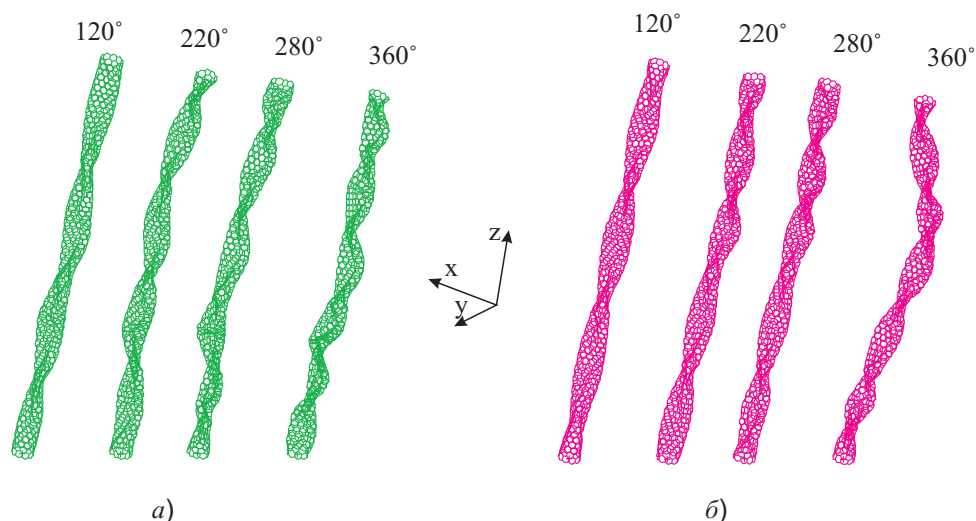


Рис. 3.44. Деформированные конфигурации нанотрубки при ее кручении, полученные без учета сил нековалентного взаимодействия ВдВ между стенками: *а)* решение задачи без возмущений; *б)* решение задачи с возмущением типа 4.

Интегральные кривые и деформированные конфигурации УНТ представленные на рис. 3.41, 3.43 получены с учетом сил нековалентного взаимодействия стенок нанотрубки Ван-дер-Ваальса (см. раздел 3.5). Для сравнения решений с учетом сил нековалентного взаимодействия ВдВ и без их учета были решены задачи без возмущений и с возмущением типа 4. Результаты решений приведены на рис. 3.44. Отмечаем, что равновесные конфигурации закритического деформирования как для решения задачи без возмущений (рис. 3.44, *а*), так и для решения задачи с возмущением типа 4 (рис. 3.44, *б*), близки вплоть до значения угла закручивания $\varphi \approx 280^\circ$. При дальнейшем кручении нанотрубки в решении задачи без возмущений на крутильную форму выпучивания накладывается быстро растущая изгибная форма. Аналогичные результаты получены и в решениях задач по выпучиванию нанотрубок с возмущениями типов 1, 2, 3. Как видно из результатов решений задач кручения УНТ, представленных на рис. 3.43, 3.43, учет нековалентного взаимодействия сил ВдВ показывает существенную разницу в формах равновесных конфигураций при закритическом деформировании нанотрубок.

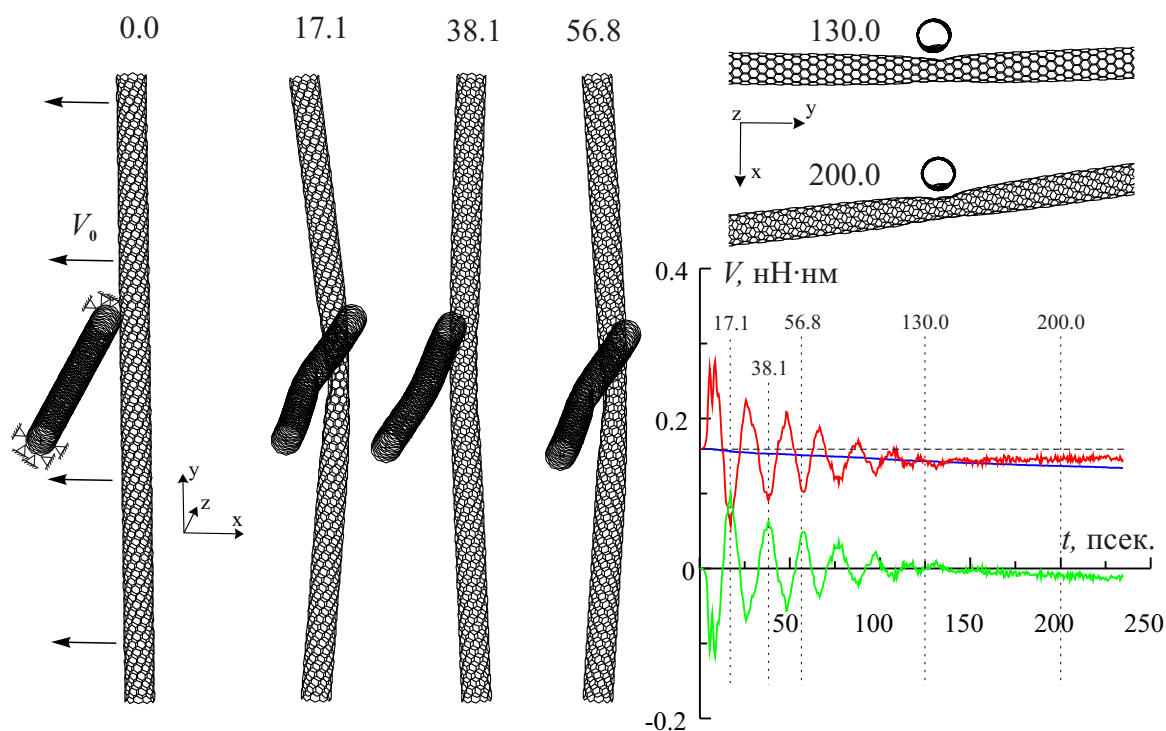


Рис. 3.45. Геометрическая модель нанотрубок и сценарий контакта нанотрубок для заданной начальной скорости движения нанотрубки $V_0 = 0.1$ нм/пс (для деформированных конфигураций приведены значения времени в пикосекундах). Изменение полной энергии системы двух УНТ обозначено линией синего цвета, изменение полной кинетической энергии двух УНТ — линией красного цвета, изменение полной потенциальной энергии двух УНТ — линией зеленого цвета. Штриховая горизонтальная прямая соответствует начальному значению общей энергии. Штриховые вертикальные прямые соответствуют тем моментам времени (в пикосекундах), для которых приведены деформированные конфигурации.

3.6 Контактное взаимодействие углеродных нанотрубок

Рассмотрим решение задачи о контакте двух нанотрубок типа «зигзаг» с индексами хиральности $(10, 0)$ [55] радиуса $R = 0.3931$ нм и длины $L = 16.90$ нм со взаимно-перпендикулярным расположением в пространстве их осевых линий на расстоянии 1.67 нм друг от друга в начальный момент времени $t = 0$ (рис. 3.45). Торцы одной из трубок жестко заземлены, а вторая трубка налетает на первую с начальной скоростью свободного полета V_0 (рис. 3.45). Расстояние между ближайшими стенками нанотрубок равно 0.8838 нм, т.е. больше $r_{\text{cof}} = 0.853$ нм, поэтому в начальный мо-

мент времени супрамолекулярные силы взаимодействий атомов между двумя нанотрубками не учитываются. Но интрамолекулярные силы ВдВ взаимодействия атомов при таком выборе значения r_{cof} будут учитываться не только для сил ВдВ, действующих между атомами в одной ячейке (рис. 2.5) и в соседних ячейках, но и между атомами противоположных стенок, так как $2R = 0.7862 \text{ нм} < r_{\text{cof}}$. Мы предполагаем, что интрамолекулярные силы ВдВ в нанотрубках можно учитывать только между атомами противоположных стенок при их сближении в процессе деформирования, когда действуют достаточно большие силы ВдВ. Далее используем два разных значения r_{cof} : $r_{\text{cof}}^{\text{intra}}$ и $r_{\text{cof}}^{\text{supra}}$, где $r_{\text{cof}}^{\text{intra}}$ — значение параметра r_{cof} , используемое для учета интрамолекулярных взаимодействий ВдВ, а $r_{\text{cof}}^{\text{supra}}$ — значение этого параметра, используемое для учета супрамолекулярных взаимодействий ВдВ. Для параметра $r_{\text{cof}}^{\text{supra}}$ используем стандартное значение r_{cof} , т.е. $r_{\text{cof}}^{\text{supra}} = 0.853 \text{ нм}$, а для параметра $r_{\text{cof}}^{\text{intra}}$ выбираем значение $r_{\text{cof}}^{\text{intra}} = 0.45 \text{ нм}$, достаточно близкое к значению $\bar{r}_e = 0.3830 \text{ нм}$. Для игнорирования сил ВдВ между атомами с соседями выбирается значение параметра $L_{\text{vdW}} = 4$ (рис. 3.17). При таких значениях $r_{\text{cof}}^{\text{intra}}$ и L_{vdW} при $t = 0$ и вплоть до возникновения достаточно больших супрамолекулярных контактных сил, силы ВдВ интрамолекулярных взаимодействий в нанотрубках не учитываются. Такой подход к моделированию контакта нанотрубок существенно экономит вычислительные ресурсы математического моделирования контакта нанотрубок по сравнению с моделированием, в котором используется значение $r_{\text{cof}} = 0.853 \text{ нм}$ для учета как интрамолекулярных, так и супермолекулярных сил ВдВ взаимодействий атомов. Тем не менее, для оценки правильности этого подхода к моделированию контакта нанотрубок были также проведены контрольные расчеты контакта нанотрубок как с «усиленным» учетом интрамолекулярных взаимодействий атомов ($r_{\text{cof}}^{\text{intra}} = r_{\text{cof}}^{\text{supra}} = 0.853 \text{ нм}$, $L_{\text{vdW}} = 2$), так и совсем без учета интрамолекулярных ВдВ взаимодействий нанотрубок (сравнение результатов расчетов по всем подходам к моделированию контактных взаимодействий нанотрубок приведены далее). Рассмотрим решения задачи о контакте нанотрубок с разными значениями начальной скорости V_0 . Общая энергия (сумма кинетической энергии и потенциальной энергии внутренних сил) в точном решении этой задачи не изменяется и при пренебрежении интрамолекулярными силами ВдВ она равна кинетической энергии. Потенциальную энергию ковалентных связей атомов определяем по формуле $V'_b(r) = V_b(r) + D$, энергию сил ВдВ взаимодействия атомов — по выражению $V'_{\text{vdW}}(r) = V_{\text{vdW}}(r) - V_{\text{vdW}}(r_{\text{cof}})$, а потенциальную энергию стержневых элементов, аппроксимирующих энергию изменения угла между ковалентными связями, находим по формуле (1.9). Величину шага по времени в решениях задачи о контакте нанотрубок определяем из условия достаточно точного воспроизведения

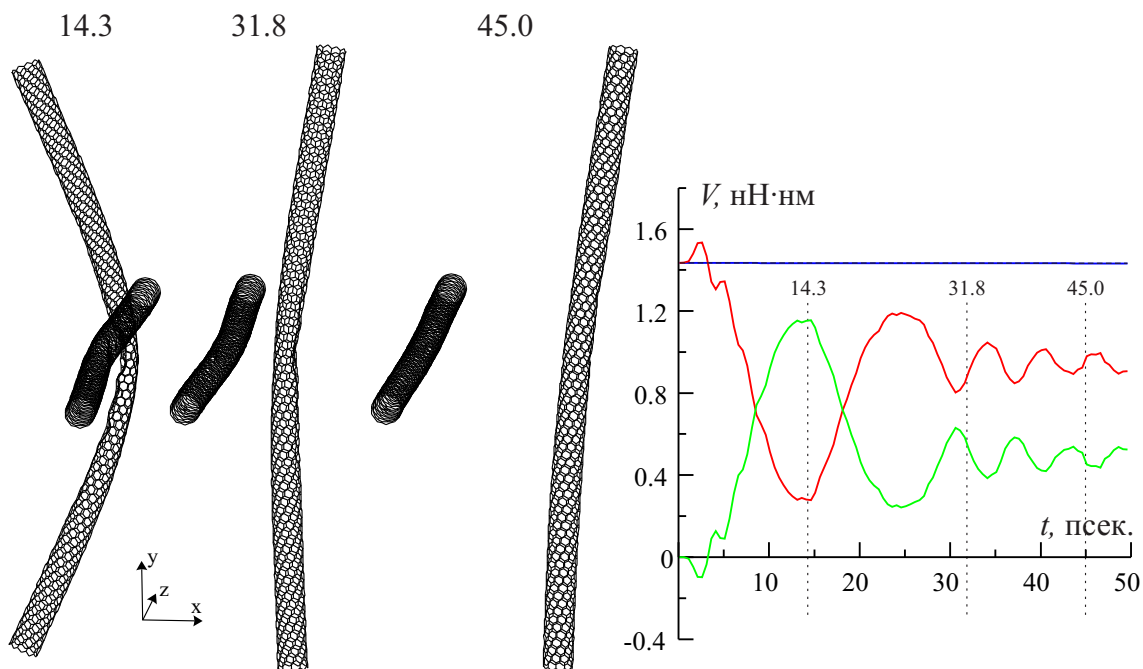


Рис. 3.46. Сценарий контакта нанотрубок для заданной начальной скорости движения нанотрубки $V_0 = 0.3$ нм/пс (для деформированных конфигураций приведены значения времени в пикосекундах). Изменение полной энергии системы двух УНТ обозначено линией синего цвета, изменение полной кинетической энергии двух УНТ — красного цвета, изменение полной потенциальной энергии двух УНТ — зеленым. Штриховая горизонтальная прямая линия (сливается с линией синего цвета) соответствует начальному значению общей энергии. Штриховые вертикальные прямые линии соответствуют тем моментам времени (в пикосекундах), для которых приведены деформированные конфигурации.

условия неизменности общей энергии.

Результаты численных решений задачи для значений начальной скорости $V_0 = 0.1; 0.3$ нм/пс приведены на рис. 3.45, 3.46, соответственно. Численные эксперименты показали, что для обеспечения разумного баланса между точностью решения и затратами компьютерного времени в решениях задач со значениями начальной скорости $V_0 = 0.1; 0.3$ нм/пс достаточно ограничиться величинами шагов во времени $\Delta t = 0.01$ пс и $\Delta t = 0.002$ пс, соответственно. Из графиков изменения кинетической энергии (см. рис. 3.45, 3.46) видно, что при вхождении в контакт кинетическая энергия движения нанотрубок возрастает (т.е. скорость сближения нанотрубок увеличивается). Но дальнейшие сценарии контакта трубок различаются. Трубка с начальной скоростью движения $V_0 = 0.1$ нм/пс (рис. 3.45) «прилипает» к первоначально неподвижной трубке с постепенным взаимным гашением амплитуд изгибных

форм колебаний и распределением кинетической энергии на колебания всех атомов обеих трубок около состояния равновесия (т.е. осуществляется переход механической энергии в тепловую). Вмятины на обеих трубках обусловлены тем, что в районе непосредственного контакта трубок преобладают силы ВдВ отталкивания, а на более далеких расстояниях — силы притяжения, которые и «склеивают» трубки. Такой вывод следует из того, что не заземленная по торцам трубка после перехода механической энергии в тепловую проворачивается вокруг заземленной трубки с соответствующим поворотом вмятины на заземленной по торцам трубке (см. деформированные конфигурации трубок в моменты времени 130 пс и 200 пс на рис. 3.45). Трубка с начальной скоростью движения $V_0 = 0.3$ нм/пс (рис. 3.46) «отскакивает» с меньшей скоростью от первоначально неподвижной трубки и обе трубки совершают колебания с выделением изгибных форм с почти постоянными амплитудами. Необходимо отметить, что для достаточно больших значений времени общая энергия в обоих расчетах диссипирует из-за накапливающихся ошибок численного решения, несмотря на то, что используется консервативная схема Ньюмарка интегрирования уравнений движения (консервативность обеспечивается выбором параметров $\delta = 0.5$ и $\alpha = 0.25$), так как ошибки аппроксимаций уравнений движения устраняются только уменьшением шага интегрирования этих уравнений во времени (применяемая в расчетах итерационная процедура метода Ньютона — Рафсона для уточнения решения не устраняет ошибок аппроксимации уравнений движения по времени). Более того, решение задачи о движении нанотрубки с начальной скоростью $V_0 = 0.1$ нм/пс с шагом во времени $\Delta t = 0.05$ пс привело к неустойчивости интегрирования уравнений движения в момент времени, приблизительно равный 107.5 пс, несмотря на то, что при решении систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений консервативная схема Ньюмарка является безусловно устойчивой. Решение этой же задачи с шагом во времени $\Delta t = 0.01$ пс является устойчивым во всем интересующем интервале интегрирования уравнений движения.

Аналогичные результаты численных решений задачи для значений начальной скорости $V_0 = 1; 3$ нм/пс приведены на рис. 3.47-3.48, соответственно. Решения проводились с шагами во времени $\Delta t = 0.002; 0.001$ пс, соответственно. На рис. 3.47, 3.48 приведены сценарии развития контактов нанотрубок, а на рис. 3.49 — графики изменения энергий этих трубок во времени в решениях задач с $V_0 = 1$ нм/пс (рис. 3.49, *a*) и $V_0 = 3$ нм/пс (рис. 3.49, *б*). Как и при решении задачи о контакте нанотрубок при начальном свободном полете одной из трубок со скоростью $V_0 = 0.3$ нм/пс, налетающая трубка после контакта отлетает в противоположную от начального движения сторону с совершением колебаний по изгибным формам, но качественное отличие

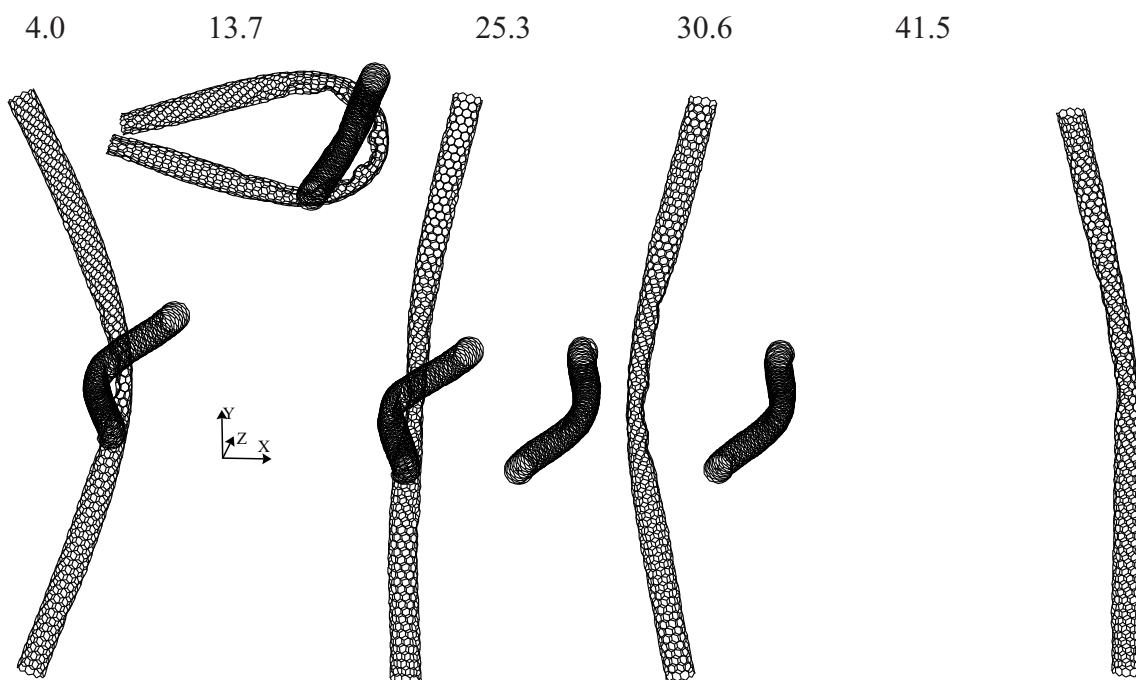


Рис. 3.47. Сценарий контакта нанотрубок для заданной начальной скорости движения нанотрубки $V_0 = 1.0$ нм/пс (для деформированных конфигураций приведены значения времени в пикосекундах).

двух последних решений от решения задачи о контакте нанотрубок с $V_0 = 0.3$ нм/пс состоит в том, что трубки, налетающие на первоначально неподвижную трубку с начальными скоростями $V_0 = 1; 3$ нм/пс, в результате изгиба вокруг трубки с заземленными торцами вступают своими противоположными торцами в самоконтакт с небольшой областью контакта в первом случае и с достаточно протяженной областью контакта во втором случае. Далее во времени в результате действия инерционных сил торцы трубки выходят из самоконтакта (но интрамолекулярные силы ВдВ между стенками трубки продолжают действовать), а в дальнейшем и сама трубка выходит из контакта с первоначально неподвижной трубкой. Отметим, что трубка имеющая первоначальную скорость полета $V_0 = 3$ нм/пс, после выхода из контакта со второй трубкой в результате повторного сильного изгиба вступила во вторичный самоконтакт своими торцами (см. деформированные конфигурации на рис. 3.48 для момента времени $t = 18.15$ пс) с дальнейшим выпрямлением при $t = 24.75$ пс.

Для всех рассмотренных решений задачи о контакте нанотрубок на рис. 3.50 приведены поперечные сечения нанотрубки (точнее говоря, деформированные конфигурации пояaska ячеек центральной части нанотрубки), которая в начальный момент времени имела скорость полета V_0 . Верхние четыре горизонтальных ряда кон-

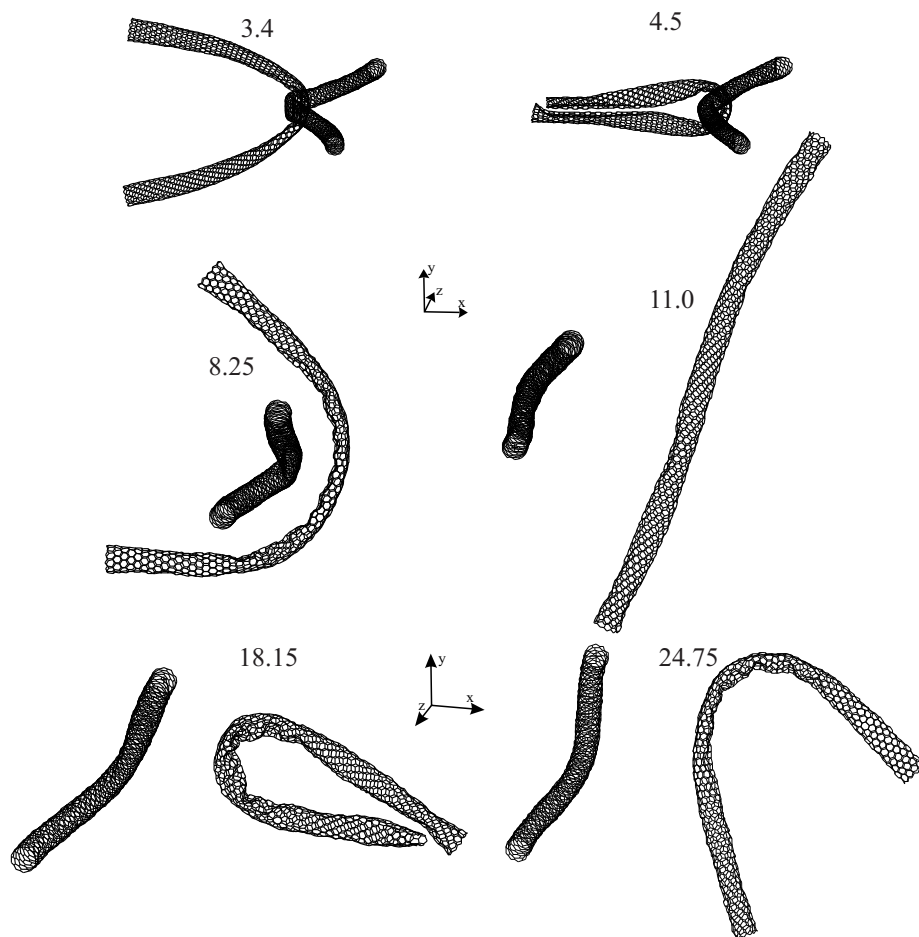


Рис. 3.48. Сценарий контакта нанотрубок для заданной начальной скорости движения нанотрубки $V_0 = 3.0$ нм/пс (для деформированных конфигураций приведены значения времени в пикосекундах). Деформированные конфигурации трубок для моментов времени $t = 18.15; 24.75$ пс искусственно приближены с целью экономии пространства рисунка.

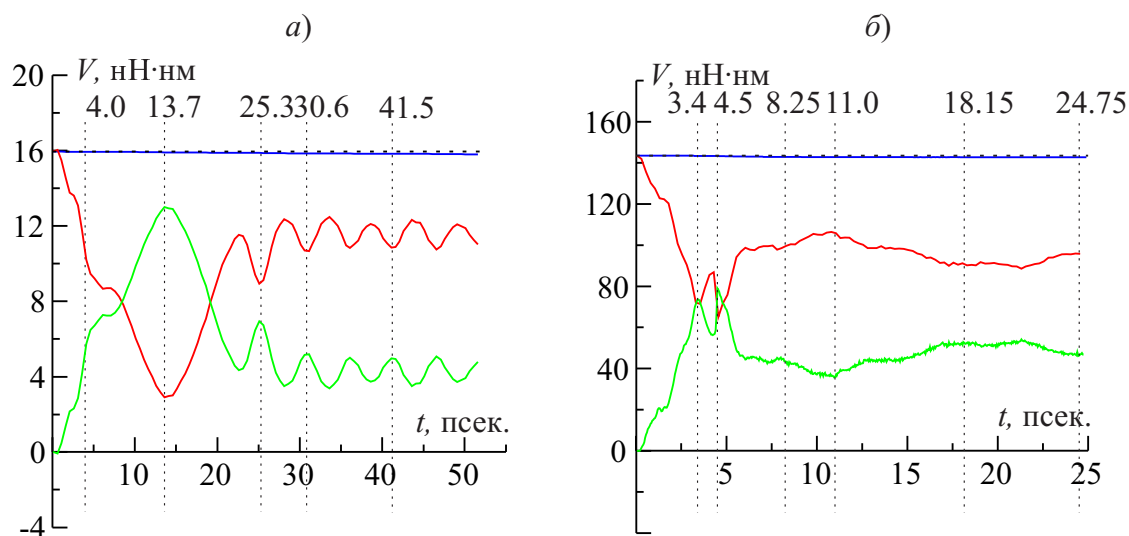


Рис. 3.49. Графики изменения энергий нанотрубок во времени в решениях задач с величинами начальной скорости: а) $V_0 = 1 \text{ nm/ps}$; б) $V_0 = 3 \text{ nm/ps}$. Изменение полной энергии системы двух УНТ обозначено линией синего цвета, изменение полной кинетической энергии двух УНТ — линией красного цвета, изменение полной потенциальной энергии двух УНТ — линией зеленого цвета. Штриховая горизонтальная прямая (сливается с линией синего цвета) соответствует начальному значению общей энергии. Штриховые вертикальные прямые соответствуют тем моментам времени (в пикосекундах), для которых приведены деформированные конфигурации на рис. 3.47 и 3.48 соответственно.

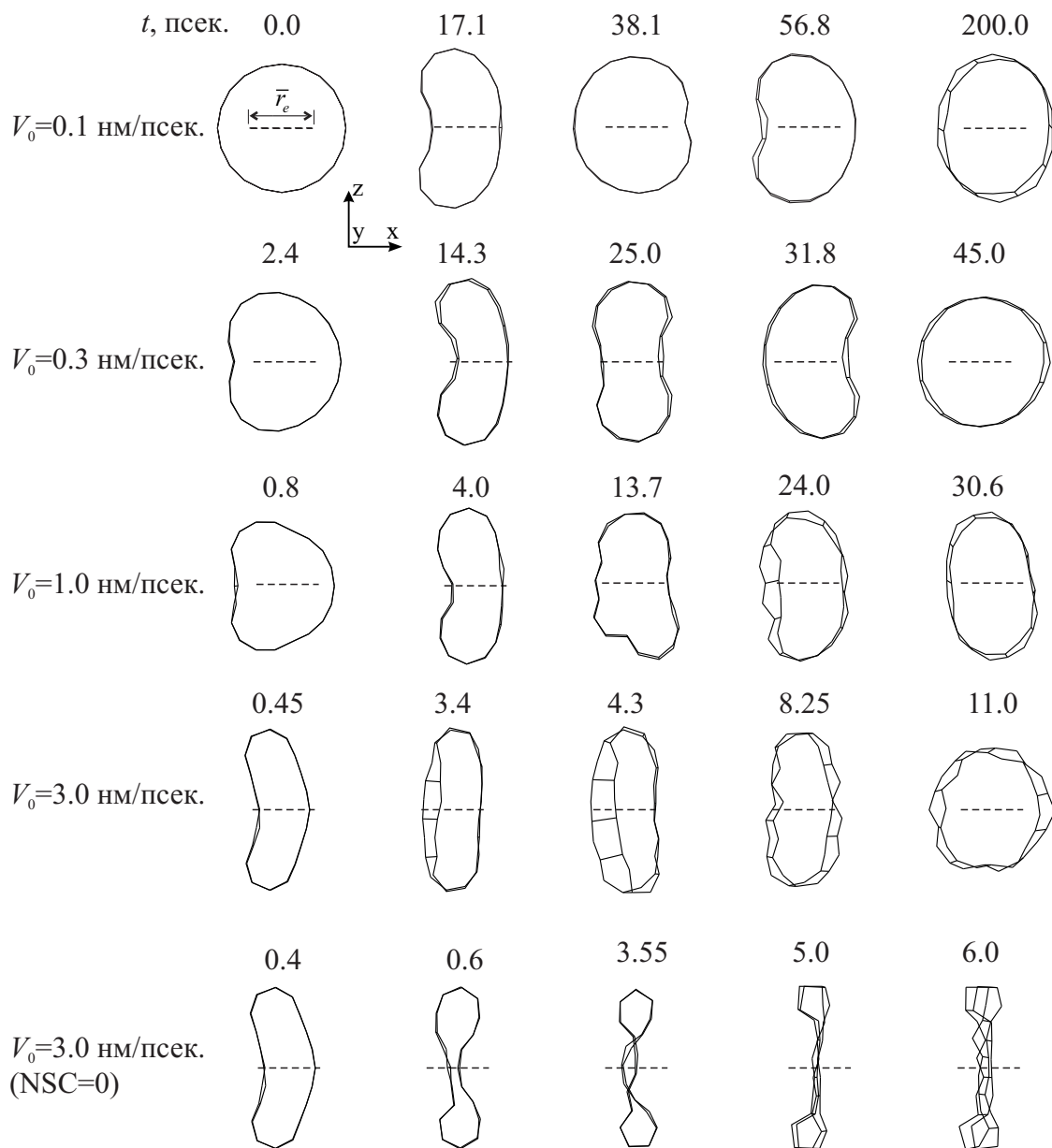


Рис. 3.50. Деформированные конфигурации поперечных сечений средней части нанотрубки, налетающей со скоростью V_0 . Штриховой линией показан отрезок прямой, который в масштабе недеформированной конфигурации поперечного сечения нанотрубки равен $\bar{r}_e = 0.383$ нм.

фигураций поперечных сечений соответствуют решениям задач о контакте трубок с учетом самоконтакта, а в нижнем ряде приведены поперечные сечения нанотрубки, полученные при решении задачи с параметром $NSC=0$, соответствующим пренебрежению интрамолекулярными ВдВ взаимодействиями нанотрубки (т.е. в этом решении самоконтакт нанотрубок не учитывался). Из приведенных рисунков следует, что интрамолекулярные силы ВдВ взаимодействия атомов противоположных стенок трубки предохраняют их от взаимных самопересечений. Также видно, что «склеивание» стенок происходит мгновенно и сопровождается последующим их «расклеиванием». Этот результат не согласуется с результатами, представленными [28, 62, 63], в которых стенки нанотрубки не «расклеиваются». Причинами «расклеивания» стенок нанотрубок в данных расчетах могут быть малый радиус нанотрубки и действие «расклеивающих» инерционных сил, превышающих по абсолютной величине притягивающие силы ВдВ.

С целью изучения влияния различных уровней учета самоконтакта на сценарии решения задачи о контакте нанотрубок получены новые решения задачи о налетании трубки с начальной скоростью $V_0 = 3$ нм/пс на неподвижную трубку. Отличие двух новых от приведенной выше постановки задачи состоит в том, что в первой новой постановке решалась задача с «усилением» условий самоконтакта трубок с заданными параметрами $r_{\text{cof}}^{\text{intra}} = r_{\text{cof}}^{\text{supra}} = 0.853$ нм, $L_{\text{vdW}} = 2$, а во второй новой постановке задачи самоконтакт трубок не рассматривался (т.е. в таблице возможного контакта диагональные элементы не заполнялись, значение параметра $NSC=0$, см. рис. 3.50). Все остальные параметры решения были теми же, что и при рассмотренном выше решении задачи контакте трубок с той же самой скоростью $V_0 = 3$ нм/пс подлета подвижной к неподвижной трубке. В первом новом решении обе трубки находились в самоконтакте под действием интрамолекулярных сил ВдВ с момента времени $t = 0$. Поэтому общая энергия двух нанотрубок равна сумме начальной кинетической энергии и начальной энергии интрамолекулярных сил ВдВ. В целях сравнения решения задачи в постановке с «усилением» условий самоконтакта из общей энергии и из потенциальной энергии сил ВдВ вычиталось начальное значение потенциальной энергии сил ВдВ. Сравнение решений проводилось сопоставлением деформированных конфигураций нанотрубок и графиков поведения энергий во времени. Проведенное сравнение решений показывает близость развития сценариев контакта, откуда следует, что решающим влиянием в постановке этой задачи является учет самоконтакта противоположных стенок трубки. В то же время пренебрежение учетом самоконтакта трубок приводит к решению задачи о контакте двух трубок, не имеющим физического смысла, так как внутренние и наружные стенки

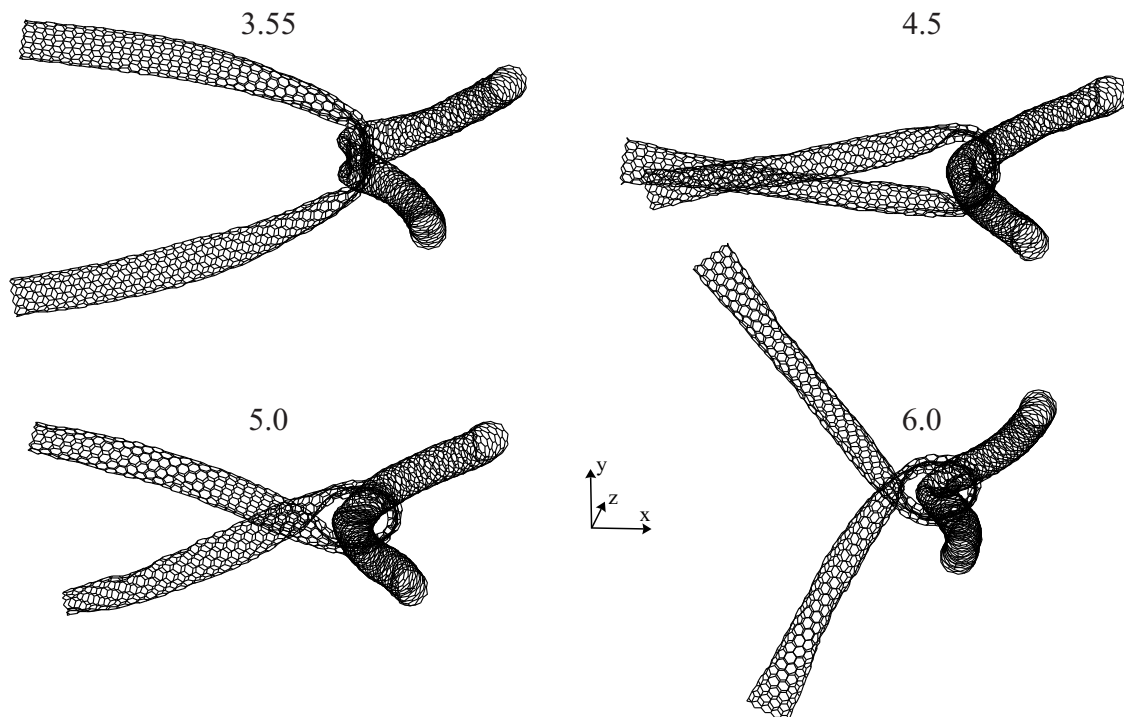


Рис. 3.51. Сценарий контакта нанотрубок для заданной начальной скорости движения нанотрубки $V_0 = 3.0$ нм/пс без учета самоконтакта. Для деформированных конфигураций приведены значения времени в пикосекундах.

трубок самопересекаются (конфигурации поперечных сечений приведены в нижнем ряду на рис. 3.50 и на рис. 3.51). Таким образом, приведенное ранее решение задачи о самоконтакте в «ослабленном» варианте учета сил ВдВ сохраняет физический смысл и позволяет проводить компьютерное моделирование задачи в экономном режиме, но пренебрежение возможностью самоконтакта в некоторых случаях приводит к недостоверным решениям задачи о контакте нанотрубок.

Выводы по главе 3

Представлены результаты компьютерного моделирования деформирования, выпучивания и контакта углеродных нанотрубок. Основные выводы по результатам компьютерного моделирования можно сформулировать следующим образом:

- При внезапном приложении нагрузки критическое время динамической потери устойчивости УНТ, сжатой по оси, зависит от величины этой силы: чем больше приложенная сила, тем меньше критическое время выпучивания УНТ.
- При внезапном приложении нагрузки динамическая потеря устойчивости УНТ,

сжатой по оси, происходит при значениях этой силы, меньшей, чем в статическом анализе или при достаточно растянутом во времени приложении этой силы с постоянной скоростью в динамическом анализе.

- При достаточно растянутом во времени приложении сжимающих сил с постоянной скоростью критические нагрузки и формы выпучивания УНТ, полученные в точках квазибифуркации, близки к нагрузкам и формам, полученным в точках бифуркации.
- До точки квазибифуркации «возмущенные» решения близки к фундаментальному решению.
- Чем больше величина возмущения, тем ранее по времени «возмущенное» решение динамической задачи отклоняется от фундаментального решения и тем ближе по времени к точке квазибифуркации происходит «срыв» движения колебательного типа в движение дивергентного типа.
- Для «короткой» и «средней» УНТ, сжатой по оси, реализуются формы выпучивания оболочки.
- Для «длинной» УНТ, сжатой по оси, равновесные конфигурации полученные в решении статической задачи совпадают с формами выпучивания, полученными в этих точках, для различных типов «возмущающих» нагрузок. Реализуемыми формами выпучивания для решений без «возмущений» являются формы выпучивания оболочек, а формами выпучивания для решений с «возмущениями» различного типа являются формы выпучивания стержней.
- Показано, что учет нековалентных сил взаимодействия противоположных участков стенок нанотрубок оказывает существенное влияние на равновесные конфигурации закритического деформирования при кручении УНТ.
- Задача контакта двух УНТ решена в динамической постановке. Показано что:
 - тип ударного взаимодействия существенно зависит от скорости соударения нанотрубок;
 - при относительно невысокой скорости соударения происходит «прилипание» нанотрубок из-за действия сил ВдВ;
 - при увеличении скорости соударения нанотрубок происходит их разлет из-за действия нековалентных сил отталкивания;

3.6. Контактное взаимодействие углеродных нанотрубок

- учет нековалентных сил взаимодействия противоположных участков стенок нанотрубок предотвращает их самопересечение.

Заключение

В диссертации получены следующие основные результаты:

- Получены критерии потери устойчивости динамического деформирования наноструктур.
- Развита процедура численных решений задач динамического выпучивания наноструктур, основанные на решении нелинейных уравнений методом молекулярной механики.
- Процедуры численного решения динамических задач выпучивания наноструктур внедрены в пакет PIONER.
- Разработан и реализован в пакете PIONER алгоритм решения задач о контакте/самоконтакте графеноподобных наноструктур в нелинейной постановке.
- С помощью пакетов прикладных программ MSC.Patran и VMD автоматизирован процесс построения наноструктур, визуализации результатов компьютерного моделирования деформирования и выпучивания наноструктур, полученных с использованием пакета PIONER.
- Получены решения новых задач о деформировании и выпучивании углеродных нанотрубок при их сжатии и кручении.
- Получены решения новых задач о контакте двух углеродных нанотрубок.

Автор искренне благодарен научному руководителю С. Н. Коробейникову за постоянное внимание к работе и неоценимую помощь, В. В. Алехину за помощь в разработке алгоритмов и их внедрение в пакет PIONER. Автор благодарен проф. В. М. Корневу и А. Л. Куперштоху за обсуждение результатов вошедших в настоящую работу, а также д.г.-м.н., О. П. Полянскому, член-корр. РАН Б. Д. Аннину, акад. РАН В. В. Ревердатто за оказание финансовой поддержки в представлении результатов настоящего исследования на международных и всероссийских конференциях.

Литература

1. 2-d nano-scale finite element analysis of a polymer field / Y. Wang, C. Sun, X. Sun et al. // *Composites Science and Technology*. — 2003. — Vol. 63. — Pp. 1581–1590.
2. Аннин, Б. Д. Компьютерное моделирование выпучивания нанотрубки при кручении / Б. Д. Аннин, С. Н. Коробейников, А. В. Бабичев // *Сиб. журн. индустриальной математики*. — 2008. — Т. 11, № 1. — С. 3–22.
3. Бабичев, А. В. Автоматизация построения моделей и визуализация результатов численного моделирования деформирования наноструктур / А. В. Бабичев // *Вычислительная механика сплошных сред*. — 2008. — Т. 1, № 4. — С. 21–27.
4. Головнев, И. Ф. Молекулярно-динамический расчет уравнения состояния наноструктур: Учеб. пособие / И. Ф. Головнев. — Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т., 2009. — С. 46.
5. Гольдштейн, Р. В. Дискретно-континуальная модель нанотрубки / Р. В. Гольдштейн, А. В. Ченцов // *Изв. РАН. МТТ*. — 2005. — № 4. — С. 57–74.
6. Дьячков, П. Н. Электросопротивление единичных углеродных трубок / П. Н. Дьячков // *Природа*. — 1997. — № 1. — С. 107–108.
7. Карслоу, Г. Теплопроводность твердых тел / Г. Карслоу, Д. Егер; Под ред. Н. Райская. — М.: Наука, 1964. — С. 488.
8. Кобаяси, Н. Введение в нанотехнологию / Н. Кобаяси. — М.: Бином, 2007. — С. 134.
9. Компьютерное моделирование контакта нанотрубок / Б. Д. Аннин, В. В. Алевхин, А. В. Бабичев, С. Н. Коробейников // *Изв. РАН. МТТ*. — 2010. — № 3. — С. 56–76.
10. Коробейников, С. Н. Применение метода конечных элементов к решению нелинейных задач по деформированию и потере устойчивости атомных решеток /

- С. Н. Коробейников. — Новосибирск, 1997. — С. 33. — (Препр./ РАН. Сиб. отд-ние. Институт гидродинамики; № 1–97).
11. *Коробейников, С. Н.* Нелинейное деформирование твердых тел / С. Н. Коробейников. — Новосибирск: Издательство СО РАН, 2000. — С. 262.
 12. *Коробейников, С. Н.* Выпучивание нанотрубки при внезапном приложении постоянной осевой нагрузки / С. Н. Коробейников, А. В. Бабищев // Сборник научных трудов «Математическое моделирование систем и процессов» / Под ред. П. В. Трусков, и др. — № 16. — Пермь: Издательство ПГТУ, 2008. — С. 43–54.
 13. *Кравчук, А. С.* О моделях и решении задач механики наноконтакта / А. С. Кравчук // Сборник научных трудов «Математическое моделирование систем и процессов» / Под ред. П. В. Трусков, и др. — № 15. — Пермь: Издательство ПГТУ, 2007. — С. 123–141.
 14. *Кривцов, А. М.* Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой / А. М. Кривцов. — М.: Физматлит, 2007. — С. 304.
 15. *Кривцов, А. М.* Аномалии механических характеристик наноразмерных объектов / А. М. Кривцов, Н. Ф. Морозов // *Доклады Академии наук.* — 2001. — Т. 381, № 3. — С. 345 – 347.
 16. *Кривцов, А. М.* О механических характеристиках наноразмерных объектов / А. М. Кривцов, Н. Ф. Морозов // *Физика твердого тела.* — 2002. — Т. 44, № 12. — С. 2158 – 2163.
 17. Методы и метрологическое обеспечение механических испытаний нано- и микромасштабных объектов, материалов и изделий нанотехнологий / Р. В. Гольдштейн, А. В. Ченцов, Р. М. Кадушников, Н. А. Штуркин // *Российские нанотехнологии.* — 2008. — Т. 3, № 1-2. — С. 114–124.
 18. Применение моментного взаимодействия к построению устойчивой модели кристаллической решетки графита / И. Е. Беринский, Е. А. Иванова, А. М. Кривцов, Н. Ф. Морозов // *Изв. РАН. МТТ.* — 2007. — № 5. — С. 6 – 16.
 19. *Раков, А. Г.* Нанотрубки и фуллерены / А. Г. Раков. — М.: Логос, 2006. — С. 376.
 20. *Суздаев, И. П.* Нанотехнология: Физико-Химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов / И. П. Суздаев. — 2-е, испр. изд. — М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2009. — С. 592.

21. Физические величины. Справочник. / Под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. — М: Энергоатомиздат, 1991. — С. 1232.
22. Шусторович, Е. М. Природа химической связи / Е. М. Шусторович. — М.: Издательство Академии наук СССР, 1963. — С. 136.
23. Эльсгольц, Л. А. Дифференциальные уравнения и вариационное исчисление / Л. А. Эльсгольц. — М.: Наука, 1969. — С. 424.
24. Analytical and numerical techniques to predict carbon nanotubes properties / A. L. Kalamkarov, A. V. Georgiades, S. K. Rokkam et al. // *Int. J. Solids Struct.* — 2006. — Vol. 43. — Pp. 6832–6854.
25. Anomalous potential barrier of double-wall carbon nanotube / R. Saito, R. Matsuo, T. Kimura et al. // *Chem. Phys. Lett.* — 2001. — Vol. 348. — Pp. 187–193.
26. Ariga, K. Supramolecular Chemistry – Fundamentals and Applications / K. Ariga, T. Kunitake. — Berlin: Springer, 2006. — P. 208.
27. Arroyo, M. An atomistic-based finite deformation membrane for single layer crystalline films / M. Arroyo, T. Belytschko // *J. Mech. Phys. Solids.* — 2002. — Vol. 50, no. 9. — Pp. 1941–1977.
28. Arroyo, M. A finite deformation membrane based on inter-atomic potentials for the transverse mechanics of nanotubes / M. Arroyo, T. Belytschko // *Mechanics of Materials.* — 2003. — Vol. 35, no. 3–6. — Pp. 193–215.
29. Arroyo, M. Finite element methods for the non-linear mechanics of crystalline sheets and nanotubes / M. Arroyo, T. Belytschko // *Int. J. Numer. Meth. Engng.* — 2004. — Vol. 59, no. 3. — Pp. 419–456.
30. The atomic-scale finite element method / B. Liu, Y. Huang, H. Jiang et al. // *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.* — 2004. — Vol. 193, no. 17-20. — P. 1849–1864.
31. Atomic-scale finite element method in multiscale computation with applications to carbon nanotubes / B. Liu, H. Jiang, Y. Huang et al. // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Jul. — Vol. 72, no. 3. — P. 035435.
32. Atomistic simulations of nanotube fracture / T. Belytschko, S. Xiao, G. C. Schatz, R. S. Ruoff // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 65. — Pp. 235430–235438.

33. *Barnard, A. K.* Theoretical basis of Inorganic Chemistry / A. K. Barnard. — New York: McGraw Hill Publishing Co. Ltd., 1965. — P. 361.
34. *Bathe, K. J.* Finite Element Procedures / K. J. Bathe. — New Jersey: Prentice Hall, Upper Saddle River, 1996. — P. 1037.
35. *Bathe, K. J.* On the automatic solution of nonlinear finite element equations / K. J. Bathe, E. N. Dvorkin // *Computers and Structures*. — 1983. — Vol. 17. — Pp. 871–879.
36. *Batra, R. C.* Continuum model of multi-walled carbon nanotubes / R. C. Batra, A. Sears // *Int. J. Solids Structures*. — 2007. — Vol. 44. — Pp. 7577–7596.
37. *Behfar, K.* Nanoscale vibrational analysis of a multi-layered graphene sheet embedded in an elastic medium / K. Behfar, R. Naghdabadi // *Composites Science and Technology*. — 2005. — Vol. 65. — Pp. 1159–1164.
38. *Behfar, K.* Nanoscale modeling of an embedded multi-shell fullerene and its application to vibrational analysis / K. Behfar, R. Naghdabadi // *Int. J. Engineering Sci.* — 2006. — Vol. 44. — Pp. 1156–1163.
39. *Belytschko, T.* Finite crystal elasticity of carbon nanotubes based on the exponential cauchy-born rule / T. Belytschko, M. Arroyo // *Phys. Rev. B*. — 2004. — Vol. 69. — Pp. 115415–115426.
40. Bending buckling of single-walled carbon nanotubes by atomic-scale finite element / X. Guo, A. Y. T. Leung, X. Q. He et al. // *Composites, Part B: Engineering*. — 2008. — Vol. 39, no. 1. — Pp. 202–208.
41. *Berber, S.* Unusually high thermal conductivity of carbon nanotubes / S. Berber, Y.-K. Kwon, D. Tománek // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — Vol. 84, no. 20. — Pp. 4613–4616.
42. *Bolesta, A. V.* Ingaas/gaas nanotubes simulation: Comparison between continual and molecular dynamics approaches / A. V. Bolesta, I. F. Golovnev, V. M. Fomin // *Computational Materials Science*. — 2006. — Vol. 36. — P. 147–151.
43. *Brenner, D. W.* Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films / D. W. Brenner // *Phys. Rev. B*. — 1990. — Vol. 42. — P. 9458–9471.

44. *Brenner, D. W.* The art and science of an analytic potential / D. W. Brenner // *Physica Status Solidi B*. — 2000. — Vol. 217, no. 23.
45. Buckling and postbuckling analysis of multi-walled carbon nanotubes based on the continuum shell model / X. Q. He, C. Qu, Q. H. Qin, C. M. Wang // *Int. J. Struct. Stab. Dyn.* — 2007. — Vol. 7, no. 4. — P. 629–645.
46. *Buehler, M. J.* Atomistic Modeling of Materials Failure / M. J. Buehler. — N.Y.: Springer, 2008. — P. 488.
47. C60: Buckminsterfullerene / H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien et al. // *Nature*. — 1985. — Vol. 318. — Pp. 162–163.
48. Carbon Nanotubes / Ed. by M. Endo, S. Iijima, M. Dresselhaus. — Pergamon, 1996. — P. 183.
49. Carbon Nanotubes Properties and Applications / Ed. by M. J. O'Connell. — 6000 Broken Sound Parkway NW, Suite 300 Boca Raton, FL 33487-2742: Taylor & Francis Group, 2006. — P. 313.
50. *Chang, T.* Size-dependent elastic properties of a single-walled carbon nanotube via a molecular mechanics model / T. Chang, H. Gao // *J. Mech. Phys. Solids*. — 2003. — Vol. 51. — Pp. 1059–1074.
51. Computational materials: multi-scale modeling and simulation of nanostructured materials / T. S. Gates, G. M. Odegard, S. J. V. Frankland, T. C. Clancy // *Composites Sci. Tech.* — 2005. — Vol. 65. — Pp. 2416–2434.
52. A continuum model for zigzag single-walled carbon nanotubes / A. Y. T. Leung, X. Guo, X. Q. He, S. Kitipornchai // *Appl. Phys. Letters*. — 2005. — Vol. 86. — Pp. 083110–083113.
53. *Corp., D. S.* — Abaqus/CAE User's Manual. — Dassault Systemes Corp., Rising Sun Mills, 166 Valley Street, Providence, RI, USA, 2010.
54. *Cummings, J.* Low-friction nanoscale linear bearing realized from multiwall carbon nanotubes / J. Cummings, A. Zettl // *Science*. — 2000. — Vol. 289.
55. *Curnier, A.* Computational methods in solid mechanics / A. Curnier. — Dordrecht: Kluwer Acad. Publ., 1994.

56. Diameter scalability of rolled-up in (ga)as/gaas nanotubes / C. Deneke, C. Müller, N. Y. Jin-Phillipp, O. G. Schmidt // *Semicond. Sci. Tech.* — 2002. — Vol. 17. — Pp. 1278–1281.
57. *Dumitrică, T.* Objective molecular dynamics / T. Dumitrică, R. D. James // *J. Mech. Phys. Solids.* — 2007. — Vol. 55, no. 10. — Pp. 2206–2236.
58. *Dym, C. L.* Stability Theory and its Applications to Structural Mechanics / C. L. Dym. — Leyden, The Netherlands: Noordhoff International Publishing, 1974. — P. 191.
59. *E, W. N.* Cauchy-born rule and the stability of crystalline solids: dynamic problems / W. N. E, P. B. Ming // *Acta Mathematicae Applicatae Sinica, English Series.* — 2007. — Vol. 23, no. 4. — P. 529–550.
60. Electric field effect in atomically thin carbon films / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. Morozov et al. // *Science.* — 2004. — Vol. 306, no. 5696. — Pp. 666–669.
61. Equivalent-continuum modeling of nano-structured materials / G. M. Odegard, T. S. Gates, L. M. Nicholson, E. Wise // *Composites Sci. and Tech.* — 2002. — Vol. 62, no. 14. — Pp. 1869–1880.
62. Fully collapsed carbon nanotubes / N. G. Chopra, L. X. Benedict, V. H. Crespi et al. // *Nature.* — 1995. — Vol. 377. — Pp. 135–138.
63. *Gao, G.* Energetics, structure, mechanical and vibrational properties of single walled carbon nanotubes / G. Gao, T. Cagin, W. A. Goddard III // *Nanotechnology.* — 1998. — Vol. 9, no. 3. — Pp. 184–191.
64. *Gao, G.* Energetics, structure, mechanical and vibrational properties of single walled carbon nanotubes / G. Gao, T. Cagin, W. A. Goddard III // *Nanotechnology.* — 1998. — Vol. 9, no. 3. — Pp. 184–191.
65. The general purpose nonlinear finite element structural analysis program pioner / S. N. Korobeinikov, V. P. Agapov, M. I. Bondarenko, A. N. Soldatkin // Proc. of Int. Conf. on Numerical Methods and Applications / Ed. by B. Sendov, et al. — Sofia: Publ. House of the Bulgarian Acad. of Sci., 1989. — Pp. 228–233.
66. *Girifalco, L. A.* Carbon nanotubes, buckyballs, ropes, and a universal graphitic potential / L. A. Girifalco, M. Hodak, R. S. Lee // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 62, no. 19. — Pp. 13104–13110.

67. *Hannay, N. B.* Solid-state chemistry / N. B. Hannay. — Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1967. — P. 225.
68. *Harris, P. J. F.* Carbon Nanotube Science: Synthesis, Properties and Applications / P. J. F. Harris. — The Edinburgh Building, Cambridge CB2 8RU, UK: Cambridge University Press, 2009. — P. 314.
69. *He, X. Q.* Buckling analysis of multi-walled carbon nanotubes: a continuum model accounting for van der waals interaction / X. Q. He, S. Kitipornchai, K. M. Liew // *J. Mech. Phys. Solids.* — 2005. — Vol. 53. — Pp. 303–326.
70. *Hill, R.* Eigenmodal deformations in elastic/plastic continua / R. Hill // *J. Mech. Phys. Solids.* — 1967. — Vol. 15. — Pp. 371–386.
71. *Humphrey, W.* Vmd - visual molecular dynamics / W. Humphrey, A. Dalke, K. Schulten // *J. Molec. Graphics.* — 1996. — Vol. 14. — Pp. 33–38.
72. *Iijima, S.* Helical microtubules of graphitic carbon / S. Iijima // *Nature.* — 1991. — Vol. 354. — Pp. 56–58.
73. Inelastic buckling of carbon nanotubes / Q. Wang, W. H. Duan, K. M. Liew, X. He // *Applied Physics Letters.* — 2007. — Vol. 90, no. 3. — Pp. 033110–033113.
74. *Jalalahmadi, B.* Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes with introducing a new wall thickness / B. Jalalahmadi, R. Naghdabadi // *Journal of Physics: Conference Series.* — 2007. — Vol. 61. — P. 497–502.
75. *Jiang, H.* A comparison of different interatomic potentials: radius effect of single wall carbon nanotubes / H. Jiang, Y. Huang, K. C. Hwang // *IUTAM Symposium on Mechanical Behavior and Micro-Mechanics of Nanostructured Materials.* — Springer, 2007. — P. 121–134.
76. *Kasti, N.* Zigzag carbon nanotubes - molecular/structural mechanics and finite element method / N. Kasti // *Int. J. Solids Struct.* — 2007. — Vol. 44. — Pp. 6914–6929.
77. *Kleiber, M.* Numerical analysis of dynamic quasi-bifurcations / M. Kleiber, W. Kotula, M. Saran // *Engineering Computations.* — 1987. — Vol. 4. — Pp. 48–52.
78. *Korobeinikov, S. N.* The numerical solution of nonlinear problems on deformation and buckling of atomic lattices / S. N. Korobeinikov // *Int. J. Fracture.* — 2004. — Vol. 128, no. 1. — Pp. 315–323.

79. *Korobeynikov, S. N.* Buckling criteria of atomic lattices / S. N. Korobeynikov // CD ICF 11 full papers: The 11-th Int. Conf. on Fracture Turino / Ed. by A. Carpinteri. — Vol. Sect. 30 'Nano- or Micro-scale'. — Turino: 2005.
80. *Korobeynikov, S. N.* Nonlinear equations of deformation of atomic lattices / S. N. Korobeynikov // *Arch. Mech.* — 2005. — Vol. 57, no. 6. — Pp. 457–475.
81. *Korobeynikov, S. N.* Determination of equilibrium configurations of atomic lattices at quasistatic deformation / S. N. Korobeynikov // CD ECF16 full papers: The 16-th Eur. Conf. of Fracture / Ed. by E. E. Gdoutos. — Alexandroupolis: 2006.
82. *Korobeynikov, S. N.* Numerical simulation of dynamic deformation and buckling of nanostructures / S. N. Korobeynikov, A. V. Babichev // CD ICF Interquadrennial conference full papers. — Moscow, Russia: 2007. — July.
83. *Lee, L. H. N.* Flexural waves in rods within an axial plastic compressive wave / L. H. N. Lee // *Wave motion.* — 1981. — Vol. 3. — Pp. 243–255.
84. *Lee, L. H. N.* On dynamic stability and quasi-bifurcation / L. H. N. Lee // *Int. J. Non-Linear Mechanics.* — 1981. — Vol. 16, no. 1. — Pp. 79–87.
85. *Leung, A. Y. T.* Postbuckling of carbon nanotubes by atomic-scale finite element / A. Y. T. Leung, X. Guo, X. Q. He // *J. Appl. Phys.* — 2006. — Vol. 99. — P. 124308.
86. *Leung, A. Y. T.* Nanomechanics of a multiwalled carbon nanotube via Flugge's theory of a composite cylindrical lattice shell / A. Y. T. Leung, J. L. Kuang // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 71. — Pp. 165415–165424.
87. *Li, C. Y.* A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes / C. Y. Li, T. W. Chou // *Int. J. Solids Struct.* — 2003. — Vol. 40. — Pp. 2487–2499.
88. *Li, C. Y.* Modeling of elastic buckling of carbon nanotubes by molecular structural mechanics approach / C. Y. Li, T. W. Chou // *Mechanics of Materials.* — 2004. — Vol. 36. — Pp. 1047–1055.
89. *Li, C. Y.* Modeling of carbon nanotubes and their composites / C. Y. Li, T. W. Chou // *Nanomechanics of Materials and Structures.* — 2006. — Pp. 55–65.
90. *Li, X.* Strain induced semiconductor nanotubes: from formation process to device applications / X. Li // *J. Phys. D: Appl. Phys.* — 2008. — Vol. 41. — Pp. 205411–205419.

91. *Liew, K. M.* Tensile and compressive properties of carbon nanotube bundles / K. M. Liew, C. H. Wong, M. J. Tan // *Acta Materialia*. — 2006. — Vol. 54, no. 1. — Pp. 225–231.
92. *Liu, W. K.* Nano Mechanics and Materials: Theory, Multiscale Methods and Applications / W. K. Liu, E. G. Karpov, H. S. Park. — Chichester: Wiley, 2006. — P. 320.
93. *Lu, J. P.* Elastic properties of carbon nanotubes and nanoropes / J. P. Lu // *Phys. Rev. Lett.* — 1997. — Vol. 79, no. 7. — Pp. 1297–1300.
94. *Lu, S.* A new extension of cauchy–born rule for monolayer crystal films / S. Lu, C. Cho // *Nanoscale Res. Lett.* — 2010. — no. 5. — Pp. 863–867.
95. MARC Users Guide. Vol. C: Program Input. MSC.Software Corporation, 2010.
96. Mechanical properties of nanotubule fibers and composites determined from theoretical calculations and simulations / S. B. Sinnott, O. A. Shenderova, C. T. White, D. W. Brenner // *Carbon*. — 1998. — Vol. 36, no. 1–2. — Pp. 1–9.
97. Mechanics of defects in carbon nanotubes: Atomistic and multiscale simulations / S. Zhang, S. L. Mielke, R. Khare et al. // *Phys. Rev. B*. — 2005. — Vol. 71. — Pp. 115403–115415.
98. Modeling of van der waals force for infinitesimal deformation of multi-walled carbon nanotubes treated as cylindrical shells / X. Q. He, S. Kitipornchai, C. M. Wang, K. M. Liew // *Int. J. Solids Struct.* — 2005. — Vol. 42. — Pp. 6032–6047.
99. Molecular dynamics (md) simulations of the dependence of c–c bond lengths and bond angles on the tensile strain in single-wall carbon nanotubes (swcnt) / P. M. Agrawal, B. S. Sudalayandi, L. M. Raff, R. Komanduri // *Comp. Mat. Sci.* — 2008. — Vol. 41. — Pp. 450–456.
100. Numerical analyses for the atomistic-based shell theory of carbon nanotubes / J. Wu, Z. Zhang, B. Liu et al. // *Int. J. Plast.* — 2009. — Vol. 25, no. 10. — Pp. 1879–1887. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TWX-4V74VC2-2/2/ec45cd8e4e71dd27c906ab26c5934db3>.
101. On instability of single-walled carbon nanotubes with a vacancy defect / Q. Wang, V. K. Varadan, Y. Xiang et al. // *Int. J. of Str. Stab. and Dyn.* — 2008. — Vol. 8, no. 2. — P. 357–366.

102. *Ozaki, T.* Stiffness of single-walled carbon nanotubes under large strain / T. Ozaki, Y. Iwasa, T. Mitani // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — Vol. 84, no. 8. — Pp. 1712–1715.
103. *Pantano, A.* Nonlinear structural mechanics based modeling of carbon nanotube deformation / A. Pantano, M. C. Boyce, D. M. Parks // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 91, no. 14. — Pp. 145504–145508.
104. Parametric variational principle and quadratic programming method for van der waals force simulation of parallel and cross nanotubes / H. W. Zhang, L. Wang, J. B. Wang, H. F. Ye // *Int. J. Solids Struct.* — 2007. — Vol. 44, no. 3. — Pp. 2783–2801.
105. PATRAN Users Guide. MSC.Software Corporation, 2010.
106. Phonon dispersion analysis of carbon nanotubes based on inter-belt model and symplectic solution method / H. W. Zhang, Z. Yao, J. B. Wang, W. X. Zhong // *Int. J. Solids Struct.* — 2007. — Vol. 44. — Pp. 6428–6449.
107. Prediction of buckling characteristics of carbon nanotubes / N. Hu, K. Nunoya, D. Pan et al. // *Int. J. Solids Struct.* — 2007. — Vol. 44, no. 20. — Pp. 6535–6550.
108. Prediction of elastic properties of carbon nanotube reinforced composites / N. Hu, H. Fukanaga, C. Lu et al. // *Proc. R. Soc. A.* — 2005. — Vol. 461. — Pp. 1685–1710.
109. *Prinz, V. Y.* Precise, molecularly thin semiconductor shells: from nanotubes to nanocorrugated quantum systems / V. Y. Prinz // *Phys. stat. sol.* — 2006. — Vol. 243, no. 13. — P. 3333–3339.
110. *Rafii-Tabar, H.* Computational Physics of Carbon Nanotubes / H. Rafii-Tabar. — Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2008. — P. 493.
111. Recent studies on buckling of carbon nanotube / C. M. Wang, Y. Y. Zhang, Y. Xiang, J. N. Reddy // *App. Mech. Rev.* — 2010. — Vol. 63. — Pp. 030804–030832.
112. *Rieth, M.* Nano-Engineering in Science and Technology an Introduction to the World of Nano-Design / M. Rieth. — World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2003. — P. 151.
113. *Sears, A.* Buckling of multiwalled carbon nanotubes under axial compression / A. Sears, R. C. Batra // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Vol. 73, no. 8. — Pp. 085410–085421.

114. A second-generation reactive empirical bond order (rebo) potential energy expression for hydrocarbons / D. W. Brenner, O. A. Shenderova, J. A. Harrison et al. // *J. Phys.: Condens. Matter.* — 2002. — Vol. 14. — P. 783–802.
115. Self-Assembled Nanostructures / J. Z. Zhang, Z. L. Wang, L. J. et al. — N.Y.: Kluwer Acad. Publ., 2004. — P. 316.
116. Self-folding and unfolding of carbon nanotubes / M. J. Buehler, Y. Kong, H. Gao, Y. Huang // *Trans. ASME, J. Engineering Materials and Technology.* — 2006. — Vol. 128. — Pp. 3–10.
117. *Shen, H. S.* Postbuckling prediction of axially loaded double-walled carbon nanotubes with temperature dependent properties and initial defects / H. S. Shen, C. L. Zhang // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Jul. — Vol. 74, no. 3. — Pp. 035410–035426.
118. Simulation of the elastic response and the buckling modes of single-walled carbon nanotube / Y. Wang, X. Wang, X. Ni, H. Wu // *Comp. Materials Science.* — 2005. — Vol. 32, no. 2. — P. 141–146.
119. *Sohi, A. N.* Stability of C₆₀-peapods under hydrostatic pressure / A. N. Sohi, R. Naghdabadi // *Acta Materialia.* — 2007. — Vol. 55. — Pp. 5483–5488.
120. *Sohi, A. N.* Stability of single-walled carbon nanopeapods under combined axial compressive load and external pressure / A. N. Sohi, R. Naghdabadi // *Physica E.* — 2009. — Vol. 41. — Pp. 513–517.
121. *Sohi, A. N.* Torsional buckling of carbon nanopeapods / A. N. Sohi, N. R. // *Carbon.* — 2007. — Vol. 45. — Pp. 952–957.
122. *Sokol, T.* The equilibrium path determination in nonlinear analysis of structures / T. Sokol, M. Witkowski // *Advances in Non-Linear Finite Element Methods* / Ed. by M. Eds. Papadrakakis, B. H. V. Topping. — Edinburg: Civil-Comp., 1994. — Pp. 35–45.
123. *Songmuang, R.* Rolled-up micro- and nanotubes from single-material thin films / R. Songmuang, C. Deneke, O. G. Schmidt // *Applied physics letters.* — 2006. — Vol. 89. — Pp. 223109–223112.
124. Springer Handbook of Nanotechnology / Ed. by B. Bhushan. — 3rd edition edition. — Springer, 2010. — P. 1800.

125. The stress-strain behavior of polymer-nanotube composites from molecular dynamics simulation / S. J. V. Frankland, V. M. Harik, G. M. Odegard et al. // *Composites Science and Technology*. — 2003. — Vol. 63. — Pp. 1655–1661.
126. Tu, Z. Single-walled and multiwalled carbon nanotubes viewed as elastic tubes with the effective young's moduli dependent on layer number / Z. Tu, Z. Ou-Yang // *Phys. Rev. B*. — 2002. — Jun. — Vol. 65, no. 23. — Pp. 233407–233411.
127. Wang, C. Y. Axially compressed buckling of pressured multiwall carbon nanotubes / C. Y. Wang, C. Q. Ru, M. A. // *Int. J. Solids Struct.* — 2003. — Vol. 40. — Pp. 3893–3911.
128. Wang, L. F. Instabilities of carbon nanotubes studied using a hybrid atom/continuum approach / L. F. Wang, Q. S. Zheng // *IUTAM Symposium on Mechanical Behavior and Micro-Mechanics of Nanostructured Materials* / Ed. by Y. Bai, et al. — Springer, 2007. — P. 145–152.
129. Wang, Q. Effect of the van der waals interaction on analysis of double-walled carbon nanotubes / Q. Wang // *Int. J. of Str. Stab. and Dyn.* — 2005. — Vol. 5, no. 3. — P. 457–474.
130. Wang, Q. Axi-symmetric wave propagation of carbon nanotubes with non-local elastic shell model / Q. Wang // *Int. J. of Str. Stab. and Dyn.* — 2006. — Vol. 6, no. 2. — P. 285–296.
131. Wang, Q. Separation of atoms with carbon nanotubes / Q. Wang // *Carbon*. — 2009. — Vol. 47. — Pp. 2752–2760.
132. Wang, Q. Torsional instability of carbon nanotubes encapsulating c_{60} fullerenes / Q. Wang // *Carbon*. — 2009. — Vol. 47. — Pp. 507–512.
133. Wang, Q. Continuum model for stability analysis of carbon nanotubes under initial bend / Q. Wang, F. Xu, G. Y. Zhou // *Int. J. of Str. Stab. and Dyn.* — 2005. — Vol. 5, no. 4. — P. 579–595.
134. Wang, X. Buckling of embedded multi-walled carbon nanotubes under combined torsion and axial loading / X. Wang, G. Lu, Y. J. Lu // *Int. J. Solids Struct.* — 2007. — Vol. 44. — Pp. 336–351.
135. Xin, H. Buckling and axially compressive properties of perfect and defective single-walled carbon nanotubes / H. Xin, Q. Han, X. Yao // *Carbon*. — 2007. — Vol. 45. — Pp. 2486–2495.

136. *Yakobson, B. I.* Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear response / B. I. Yakobson, C. J. Brabec, J. Bernholc // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — Vol. 76, no. 14. — Pp. 2511–2514.
137. *Yakobson, B. I.* Carbon nanotubes: Supramolecular mechanics / B. I. Yakobson, L. S. Couchman // *Dekker Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology.* — 2004. — Pp. 587–601.
138. *Yang, J.* Generalized cauchy–born rules for elastic deformation of sheets, plates, and rods: Derivation of continuum models from atomistic models / J. Yang, W. E // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Nov. — Vol. 74, no. 18. — P. 184110.
139. *Zhang, C.-L.* Buckling and postbuckling analysis of single-walled carbon nanotubes in thermal environments via molecular dynamics simulation / C.-L. Zhang, H.-S. Shen // *Carbon.* — 2006. — Vol. 44, no. 13. — Pp. 2608–2616.
140. *Zhang, C.-L.* Buckling and postbuckling of single-walled carbon nanotubes under combined axial compression and torsion in thermal environments / C.-L. Zhang, H.-S. Shen // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Jan. — Vol. 75, no. 4. — Pp. 045408–045415.
141. *Zhang, H. W.* Computer simulation of buckling behavior of double-walled carbon nanotubes with abnormal interlayer distances / H. W. Zhang, L. Wang, J. B. Wang // *Computational Materials Science.* — 2007. — Vol. 39, no. 3. — Pp. 664–672.
142. *Zhang, Y.* Effect of strain rate on the buckling behavior of single- and double-walled carbon nanotubes / Y. Zhang, V. B. C. Tan, C. M. Wang // *Carbon.* — 2007. — Vol. 45, no. 3. — Pp. 514–523.
143. *Zhou, W.* Adhesion between carbon nanotubes and substrate: mimicking the gecko foot-hair / W. Zhou, Y. Huang // *NANO: Brief Reports and Reviews.* — 2007. — Vol. 2, no. 3. — P. 175–179.
144. *Zienkiewicz, O. C.* The Finite Element Method / O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor. — Oxford: Butterworth-Heinemann, 2000. — P. 689.