

БАБИЧЕВ Алексей Владимирович

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ДЕФОРМИРОВАНИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК**

01.02.04 — «Механика деформируемого твердого тела»

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

НОВОСИБИРСК – 2011

Работа выполнена в Учреждении Российской академии наук
Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения
Российской академии наук

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, с.н.с.
Сергей Николаевич Коробейников

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Антон Мирославович Кривцов

кандидат физико-математических наук
Алексей Владимирович Болеста

Ведущая организация: Учреждение Российской академии наук Институт
проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН

Защита состоится 24 октября 2011 г. в 14:00 час. на заседании диссер-
тационного совета Д 003.054.02 при Институте гидродинамики им. М.А.
Лаврентьева СО РАН, в конференц-зале.

Адрес: пр-т Ак. Лаврентьева, 15, Новосибирск, 630090.

Тел. (383) 333-16-12, факс: (383) 333-16-12.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института гидроди-
намики им. М.А. Лаврентьева СО РАН.

Автореферат разослан « » сентября 2011 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физико-математических наук

В.Д. Кургузов

Общая характеристика работы

Актуальность. Математическое моделирование деформирования, потери устойчивости и контактного взаимодействия наноструктур обусловлено стремительным развитием нанотехнологий и их научной основы — наномеханики. Математическое моделирование существенно ускоряет и качественно улучшает процесс проектирования наноструктур с целью оценки их эксплуатационных характеристик, позволяет удешевить процесс создания как наноструктур, так и новых материалов, конструируемых с помощью наноструктур. При математическом моделировании деформирования наноструктур в условиях максимального приближения к реальности требуется учесть все степени нелинейности уравнений, требуемых для этого моделирования. Наиболее оптимальным сочетанием простоты и, в тоже время, высокой степени приближения к реальности для описания деформирования наноструктур является использование уравнений Ньютона движения атомов в силовых полях. Существуют два подхода реализующих решения задач наномеханики уравнениями Ньютона: метод молекулярной механики (ММ) и метод молекулярной динамики (МД). Только метод ММ позволяет использовать критерии потери устойчивости для надежной оценки эксплуатационных качеств тонкостенных наноструктур, к которым относятся и углеродные нанотрубки. Поэтому весьма важно развивать критерии потери устойчивости наноструктур. Сложные наноструктуры состоят из набора примитивных наноструктур типа нанотрубок, фуллеренов, графена и т.д., взаимодействие которых друг с другом осуществляется через действие контактных сил. Поэтому развитие подходов к моделированию контакта наноструктур является актуальным направлением наномеханики. Уравнения молекулярной механики основаны на пошаговых процедурах решения уравнений механики Ньютона движения атомов, поэтому важным направлением в развитии наномеханики является внедрении процедур и алгоритмов контактных взаимодействий наноструктур в пакеты прикладных программ, основанных на численном решении уравнений молекулярной механики. Современное математическое моделирование наноструктур основано на определении критических параметров деформирования, потери устойчивости и контактного взаимодействия наноструктур. Поэтому развитие алгоритмов численного решения задач потери устойчивости и контактных взаимодействий наноструктур является актуальным.

Цель работы: 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, решение новых задач деформирования, выпучивания и контактных взаимодействий углеродных нанотрубок.

Задачи работы:

- Разработать критерии потери устойчивости динамического деформирования наноструктур в нелинейной постановке.
- На основе разработанных критериев потери устойчивости построить алгоритмы решения задач о нелинейной потере устойчивости наноструктур.
- Разработать алгоритмы решения задач о контактных взаимодействиях графеноподобных наноструктур.
- Внедрить развитые процедуры численного решения задач динамической потери устойчивости и контактных взаимодействий наноструктур в пакет PIONER.
- Разработать технологию автоматической 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.

Научная новизна работы, личный вклад:

- Разработаны критерии потери устойчивости динамического деформирования наноструктур в нелинейной постановке.
- На основе разработанных критериев потери устойчивости построены новые алгоритмы решения задач о нелинейной потере устойчивости наноструктур.
- Разработан новый алгоритм решения задач о контактных/самоконтактных взаимодействиях графеноподобных наноструктур.

- Внедрены новые процедуры численного решения задач динамической потери устойчивости и контактных взаимодействий наноструктур в пакет PIONER.
- Разработана новая технология автоматической визуализации полученных с помощью пакета PIONER результатов математического моделирования деформирования углеродных нанотрубок.
- Получены решения новых задач квазистатического/динамического деформирования, выпучивания и контактного взаимодействия углеродных нанотрубок.

Защищаемые научные результаты:

- Новые критерии потери устойчивости динамического деформирования наноструктур.
- Развитые алгоритмы численного решения задач потери устойчивости и контакта наноструктур и их внедрение в пакет PIONER.
- Алгоритмы прикладных программ визуализации деформированных конфигураций, форм выпучивания и собственных колебаний нанотрубок.
- Решения новых задач квазистатического/динамического деформирования, выпучивания и контактного взаимодействия наноструктур.

Практическая значимость работы заключается в применении разработанных критериев потери устойчивости и построенных на этой основе алгоритмов решения задач деформирования и контактного взаимодействия наноструктур и модернизированного на их основе пакета программ PIONER, оценки деформативных свойств устойчивости, прочности как отдельных нанотрубок, так и построенных на их основе наноструктур.

Достоверность 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, соответствием полученных в диссертации решений задач с решениями других авторов.

Апробация работы. 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.)

Полностью диссертация обсуждалась на научном семинаре Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН (рук. член-корр. РАН Б.Д. Аннин), на семинаре Института проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН (рук. член-корр. РАН Р.В. Гольдштейн), на семинаре кафедры «Теоретической механики» СПбГПУ (рук. д.ф.-м.н., проф. А.М. Кривцов)

Публикации. Результаты исследования по теме диссертации представлены в списке [1–13], 3 статьи ([9–11]) опубликованы в журналах, входящих в перечень изданий, рекомендованных ВАК.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, трех глав и заключения, содержит 142 страницы текста, 68 рисунка. Библиография содержит 144 наименования.

Краткое содержание работы

Во введении обосновывается актуальность выбранной темы исследования, дается обзор существующих работ по математическому моделированию деформирования и потери устойчивости наноструктур, их контактными взаимодействиями. Приводятся подходы и методы математического моделирования наноструктур. Дано краткое описание содержания диссертации по главам.

Первая глава посвящена выводу уравнений молекулярной механики графеноподобных наноструктур.

В **разделе 1.1** приводятся физические основы межатомных и межмолекулярных взаимодействий углеродных наноструктур.

В **разделе 1.2** рассматриваются выражения для полной потенциальной энергии графеноподобной наноструктуры, обсуждается вклад каждого из слагаемых для этого выражения. Потенциальная энергия взаимодействия атомов углерода графеноподобных наноструктур имеет вид

$$V = \sum_{n=1}^N V_b^n(r_n) + \sum_{l=1}^L V_\theta^l(\theta_l - \theta_0^l) + \sum_{j=1}^J V_{\text{vdW}}^j(r_j),$$

где первые два члена в правой части представляют энергию ковалентных связей, а последний член — энергию нековалентных вандерваальсовых (ВдВ) связей атомов. Здесь $V_b^n(r_n)$ — потенциальная энергия n -ой химической связи атомов углерода (r_n — расстояние между атомами в этой связи, N — общее число химических связей всех рассматриваемых наноструктур), $V_\theta^l(\theta_l - \theta_0^l)$ — энергия изменения l -го угла θ^l между соседними ковалентными связями (L — общее число этих углов во всех рассматриваемых наноструктурах); $V_{\text{vdW}}^j(r_j)$ — энергия сил ВдВ j -ой нековалентной связи атомов, находящихся на расстоянии r_j друг от друга (J — общее число нековалентных связей атомов рассматриваемых наноструктур). Иллюстрация действия ковалентных (сплошные линии) и нековалентных (штрих-пунктирные линии) связей в графеноподобной наноструктуре приведена на рис. 1. В настоящей работе предполагается, что ковалентные связи атомов в наноструктурах постоянны (может изменяться только их величина), т.е. целые числа N и L неизменны, а число учитываемых нековалентных связей J может изменяться в процессе движения наноструктур(ы).

Для потенциальной энергии центральных сил взаимодействия атомов атомной пары выбирается функция Морзе

$$V_b(r) \equiv D[e^{-2\alpha(r-r_e)} - 2e^{-\alpha(r-r_e)}], \quad (1)$$

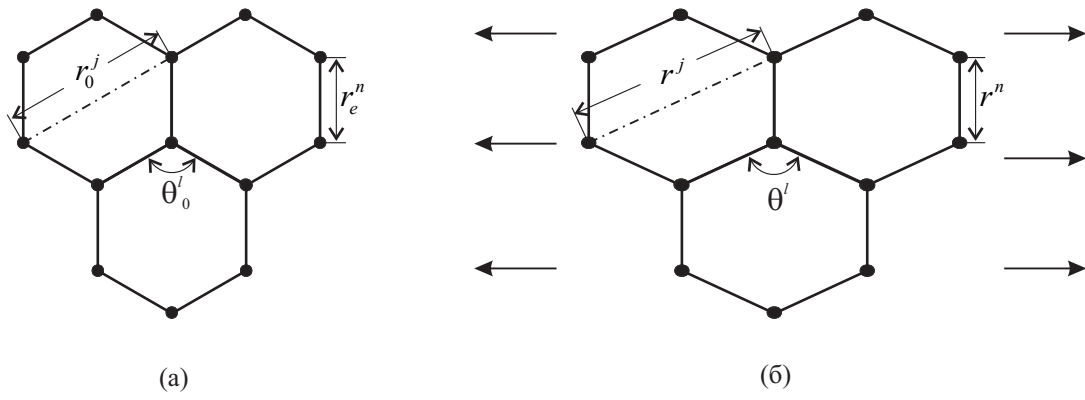


Рис. 1. Геометрия графеноподобной наноструктуры с ковалентными и нековалентными связями атомов: (а) в недеформированном состоянии; (б) в деформированном состоянии.

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

Для энергии изменения угла между соседними связями выбирается простейший вид потенциальной функции

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

где $\theta_0 = \theta(0)$ – начальное значение угла θ (при времени $t = 0$). Энергия (2) изменения угла между соседними связями приближается энергией деформации стержневого элемента¹

$$V_t(r) \equiv \frac{1}{2}r_0ke^2(r), \quad e \equiv \frac{r - r_0}{r_0}, \quad (3)$$

где k – модуль жесткости стержневого элемента, который определяется следующим образом:

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

Здесь r_0 – начальная длина (при $t = 0$) стержневого элемента.

Для потенциальной энергии сил ВдВ выбираем функцию Леннарда-Джонса²

$$V_{\text{vdW}}(r) = \begin{cases} 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] & \text{при } 0 < r \leq r_{\text{cof}} \\ 0 & \text{при } r > r_{\text{cof}}, \end{cases} \quad (4)$$

¹Гольдштейн Р.В., Ченцов А.В. Дискретно-континуальная модель нанотрубки // Изв. РАН. МТТ. – №4 (2005) –С. 57–74.

²Кривцов А.М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой // М.: Физматлит, 2007.

где σ, ε — некоторые константы.

В *разделе 1.3* приведено векторное нелинейное уравнение движения наноструктуры

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{R} - \mathbf{M}\ddot{\mathbf{U}}, \quad \mathbf{U}(0) = \mathbf{U}_0, \quad \dot{\mathbf{U}}(0) = \mathbf{V}_0. \quad (5)$$

Здесь \mathbf{U} — вектор перемещений ансамбля атомов наноструктуры, \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. Пренебрегая инерционными членами, получаем из (5) нелинейное векторное уравнения равновесия наноструктуры (систему из N скалярных алгебраических уравнений)

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{R}. \quad (6)$$

В *разделе 1.4* обсуждаются вопросы устойчивости равновесия и процессов деформирования наноструктуры. Рассматриваются три различных типа потери устойчивости решений уравнений деформирования наноструктур: устойчивость равновесных состояний наноструктуры относительно динамических возмущений, устойчивость квазистатических движений наноструктуры и устойчивость динамических движений наноструктуры. Показано, что свойство положительно определенности матрицы касательной жесткости является универсальным достаточным критерием устойчивости как равновесных состояний, так и квазистатических/динамических движений наноструктуры. Для исследования устойчивости динамических движений используется определение устойчивости обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) второго порядка на конечном интервале времени.

Пусть вектор перемещений $\mathbf{U}(t)$ является фундаментальным (исследуемым на устойчивость) решением уравнения движения (5). Рассмотрим возмущенное по отношению к исследуемому на устойчивость движение наноструктуры в предположении о том, что вектор внешних сил \mathbf{R} не зависит от вектора перемещений \mathbf{U} , но может зависеть от времени t , т. е. $\mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$. Вектор $\bar{\mathbf{U}}$ обозначает вектор перемещений (возмущенного движения наноструктуры), который удовлетворяет следующему уравнению движения с возмущенными начальными условиями

$$\mathbf{M}\ddot{\bar{\mathbf{U}}} + \mathbf{F}(\bar{\mathbf{U}}) = \mathbf{R}(t), \quad \bar{\mathbf{U}}(0) = \bar{\mathbf{U}}_0, \quad \dot{\bar{\mathbf{U}}}(0) = \bar{\mathbf{V}}_0, \quad (7)$$

где введено обозначение для вектора перемещений отклоненного движения

$$\mathbf{q} \equiv \bar{\mathbf{U}} - \mathbf{U}.$$

В предположении малости вектора \mathbf{q} по отношению к вектору перемещений \mathbf{U} , однородное линеаризованное уравнение относительно вектора \mathbf{q} имеет вид:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{K}(\mathbf{U})\mathbf{q} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{q}(0) = \mathbf{q}_0, \quad \dot{\mathbf{q}}(0) = \mathbf{v}_0, \quad (8)$$

где введены векторы

$$\mathbf{q}_0 \equiv \bar{\mathbf{U}}_0 - \mathbf{U}_0, \quad \mathbf{v}_0 \equiv \bar{\mathbf{V}}_0 - \mathbf{V}_0.$$

Пользуясь положительной определенностью матрицы масс \mathbf{M} , из (8) получаем

$$\mathbf{q}^T \ddot{\mathbf{q}} = -\mathbf{q}^T \mathbf{M}^{-1} \mathbf{K}(\mathbf{U}) \mathbf{q}. \quad (9)$$

В работах Л.Х.Н. Ли и М. Клейбера и др.³ показано, что устойчивость динамического движения определяется знаком свертки $\mathbf{q}^T \ddot{\mathbf{q}}$. Тогда из (9) следует, что устойчивость динамического движения определяется тем, является ли касательная матрица жесткости \mathbf{K} положительно определенной. Получаем следующее правило определения интервала времени $(0, T_{cr})$ устойчивого динамического движения наноструктуры.

Пусть в начальный момент времени $t = 0$ матрица касательной жесткости \mathbf{K} положительно определена ($\mathbf{K} \succ 0$) и остается таковой на интервале времени $(0, T_{cr})$, в момент времени $t = T_{cr}$ матрица \mathbf{K} становится положительно полуопределенной ($\mathbf{K} \succeq 0$), а при $t > T_{cr}$ матрица \mathbf{K} неопределена ($\mathbf{K} \not\geq 0$). Тогда решение уравнения (5) устойчиво на интервале времени $(0, T_{cr})$. При $t = T_{cr}$ устойчивый режим деформирования сменяется неустойчивым режимом деформирования, таким, что в одном или более возмущенных движениях выделяется неосциллирующая форма движения, соответствующая форме собственных колебаний с нулевой частотой, полученной при решении обобщенной задачи на собственные значения

$$(\mathbf{K} - \mu \mathbf{M}) \Phi = \mathbf{0} \text{ при } t = T_{cr}.$$

Так как матрицы \mathbf{K} и \mathbf{M} симметричные, то собственные значения этой задачи вещественны. В силу того, что $\mathbf{M} \succ 0$, $\mathbf{K} \succeq 0$, все собственные значения неотрицательны, и мы их располагаем в возрастающем порядке

$$0 = \mu_1 = \dots = \mu_K < \mu_{K+1} \leq \mu_{K+2} \leq \dots, \quad (10)$$

³Lee L.H.N. On dynamic stability and quasi-bifurcation // Int. J. Non-Linear Mechanics. – 16(1981)–Рр. (79–87), Kleiber M., Kotula W., Saran M. Numerical analysis of dynamic quasi-bifurcations // Engineering Computations. – 4(1987) – Рр. (48 – 52).

где кратность K нулевого собственного значения равна дефекту матрицы \mathbf{K} . Пусть Φ_i ($i = 1, \dots, NEQ$) – М-ортонормированные собственные векторы, NEQ – общее число независимых степеней свободы наноструктуры. Расположим собственные пары (μ_i, Φ_i) ($i = 1, \dots, NEQ$) в соответствии с нумерацией собственных значений в (10):

$$(\mu_1, \Phi_1), (\mu_2, \Phi_2), \dots, (\mu_K, \Phi_K), (\mu_{K+1}, \Phi_{K+1}), \dots .$$

Если решение $\bar{\mathbf{U}}$ уравнения (7) представить в виде разложения по собственным формам

$$\bar{\mathbf{U}} = \sum_{i=1}^{NEQ} \alpha_i \Phi_i, \quad (11)$$

то пары

$$(\mu_1, \Phi_1), (\mu_2, \Phi_2), \dots, (\mu_K, \Phi_K)$$

в окрестности времени T_{cr} определяют неосциллирующие (дивергентного типа) составляющие решения $\bar{\mathbf{U}}$ в (11), а пары

$$(\mu_{K+1}, \Phi_{K+1}), (\mu_{K+2}, \Phi_{K+2}), \dots, (\mu_{NEQ}, \Phi_{NEQ})$$

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 $\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_K$ с нулевой частотой называем, по аналогии с квазистатическим анализом⁴ формами (формой) выпучивания наноструктуры, а ситуацию, при которой матрица \mathbf{K} вырождается и, следовательно, существует решение (11) с вкладом в это решение форм (формы) выпучивания Φ_i ($i = 1, \dots, K$) – квазибифуркацией фундаментального решения.

Во второй главе приведены процедуры численных решений уравнений молекулярной механики и их программная реализация.

В *разделе 2.1* для пошагового интегрирования уравнений равновесия используется метод Эйлера, полученное решение уточняется методом Ньютона – Рафсона. Для решения линеаризованного уравнения движения (5) используется метод Ньюмарка, полученное решение уточняется методом Ньютона – Рафсона.

⁴Korobeinikov S.N. The numerical solution of nonlinear problems on deformation and buckling of atomic lattices // Int. J. Fracture. –128(2004) –Pp. 315–323.

В *разделе 2.2* представлены алгоритмы решения задач о выпучивании наноструктур как в квазистатической, так и в динамической постановке, основанные на теоретических выводах раздела 1.4. Для каждого дискретного значения момента времени t при интегрировании уравнения (5) проводятся факторизации симметричных матриц ${}^t\hat{\mathbf{K}}$ и ${}^t\mathbf{K}$

$${}^t\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{D}}\hat{\mathbf{L}}^T, \quad {}^t\mathbf{K} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^T, \quad (12)$$

где $\hat{\mathbf{L}}$ и \mathbf{L} — нижние треугольные матрицы, а $\hat{\mathbf{D}}$ и \mathbf{D} — диагональные матрицы. Первая факторизация в (12) требуется для численного интегрирования уравнения (5), а вторая факторизация производится в том случае, если одновременно с задачей деформирования наноструктуры проводится анализ устойчивости полученного решения. Цель второй факторизации в (12) состоит в отслеживании изменения знаков диагональных элементов матрицы \mathbf{D} в силу следующих эквивалентных утверждений, справедливых для симметричной матрицы \mathbf{K} :

$$\begin{aligned} \mathbf{K} \succ 0 &\Leftrightarrow d_{ii} > 0 \quad (i = 1, \dots, NEQ); \\ \mathbf{K} \succeq 0 &\Leftrightarrow d_{ii} \geq 0 \quad (i = 1, \dots, NEQ), \quad \exists j \quad (1 \leq j \leq NEQ) : d_{jj} = 0; \\ \mathbf{K} \not\geq 0 &\Leftrightarrow \exists j \quad (1 \leq j \leq NEQ) : d_{jj} < 0. \end{aligned} \quad (13)$$

В соответствии с утверждениями в (13), при пошаговом интегрировании уравнения (5) 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 полагаем $T_{cr} \in [t_1, t_2]$, т. е. точка квазибифуркации впервые встречается в этом сегменте времени.

В *разделе 2.3* представлены алгоритмы о контакте/самоконтакте наноструктур(ы). Отдельные наноструктуры набираются из элементов атомных пар и стержневых элементов. Предполагается, что ковалентные связи отдельной наноструктуры не изменяются в процессе ее деформирования. Элементы атомных пар, соответствующие нековалентным ВдВ связям атомов наноструктуры, являются «виртуальными». Эти элементы создаются при условии того, что расстояние между потенциально контактирующими атомами не превышает заранее заданного значения r_{cof} . Начальным шагом построения математической модели контакта наноструктур является

введение атомов всего ансамбля наноструктур. Далее формируются наноструктуры, состоящие из элементов атомных пар и стержневых элементов. Следующим шагом является создание верхней треугольной части (включающей диагональные элементы) квадратной таблицы (симметричной матрицы) возможного контакта наноструктур(ы). Заполненные элементы таблицы на главной диагонали включают в работу пакета PIONER программные модули учета возможного ВдВ взаимодействия атомов наноструктуры (самоконтакта наноструктуры). Заполненные внедиагональные элементы таблицы включают в работу этого пакета программные модули учета возможного ВдВ взаимодействия атомов наноструктур (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} . 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 для атомов, находящихся на L_{vdW} уровнях ковалентных связей с рассматриваемым атомом. 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.

В *разделе 2.4* рассмотрена автоматизация процесса визуализации полученных с помощью пакета PIONER результатов компьютерного моделирования деформирования углеродных нанотрубок (УНТ). Для математического моделирования деформирования УНТ создан пакет прикладных программ, осуществляющий построение геометрической модели УНТ, а также автоматизирующий процесс визуализации результатов математического моделирования деформирования УНТ в среде пакетов MSC.Patran и VMD.

В *третьей главе* описано как развитые критерии динамической потери устойчивости и алгоритмы контактных взаимодействий УНТ внедрены в вычислительный пакет PIONER, математическое моделирование деформирования, выпучивания и контакта углеродных нанотрубок проведено с

помощью этого пакета.

Раздел 3.1 посвящен верификации численных решений задач о деформировании и выпучивании УНТ с решениями других авторов. Рассмотрены решения задачи о кручении УНТ типа «кресло» хиральности (10, 10), содержащей 2020 атомов⁵. Полученные значение потенциальной энергии деформирования и значения критических углов закручивания настоящей работы близки к значениям полученным этими авторами, также близки и деформированные конфигурации, полученные при значении угла закручивания $\psi = 25^\circ$.

В **разделах 3.2, 3.3** представлены результаты компьютерного моделирования деформирования и выпучивания «короткой» и «средней» длины УНТ типа «зиг-заг», содержащей 100 и 400 атомов соответственно, хиральности (10,0), сжатой по оси. Результаты компьютерного моделирования показывают, что при выбранных скоростях нагружения трубок как при статическом деформировании, так и при динамическом деформировании нижние формы выпучивания, полученные в точках бифуркации и точке квазибифуркации совпадают. Как и предсказывает теория, развитая в главе 1, устойчивое движение УНТ фундаментального решения и решения с возмущением происходит вплоть до точки квазибифуркации, за точкой квазибифуркации колебательный режим сменяется неосциллирующим движением для решения с возмущением, а позднее и для решения без возмущений.

В **разделе 3.4** представлены результаты математического моделирования деформирования и выпучивания «длинной» УНТ, содержащей 1600 атомов, хиральности (10,0), сжатой по оси. При квазистатическом деформировании УНТ формы выпучивания, полученные в первых двух точках бифуркации, имеют тот же вид, что и формы выпучивания стержней. В этой постановке получены деформированные конфигурации УНТ в точках поворота для решений с возмущениями различных типов. Отмечается близость форм выпучивания, полученных в точках бифуркации решения без возмущений, к формам, полученным в точках поворота решений с возмущениями различных типов. При динамическом деформировании УНТ сжимающей силой, возрастающей с постоянной скоростью, отмечается зависимость форм выпучивания от типов возмущения. Чем больше амплитуда возмущений, тем раньше интегральная кривая деформирования УНТ «ответвляется» от интегральной кривой невозмущенного решения, а деформированная конфигурация совпадает с формой выпучивания полученной в

⁵Arroyo M., Belytschko T. An atomistic-based finite deformation membrane for single layer crystalline films // J. Mech. Phys Solid. – 50(2002). –Pp. 1941–1977.

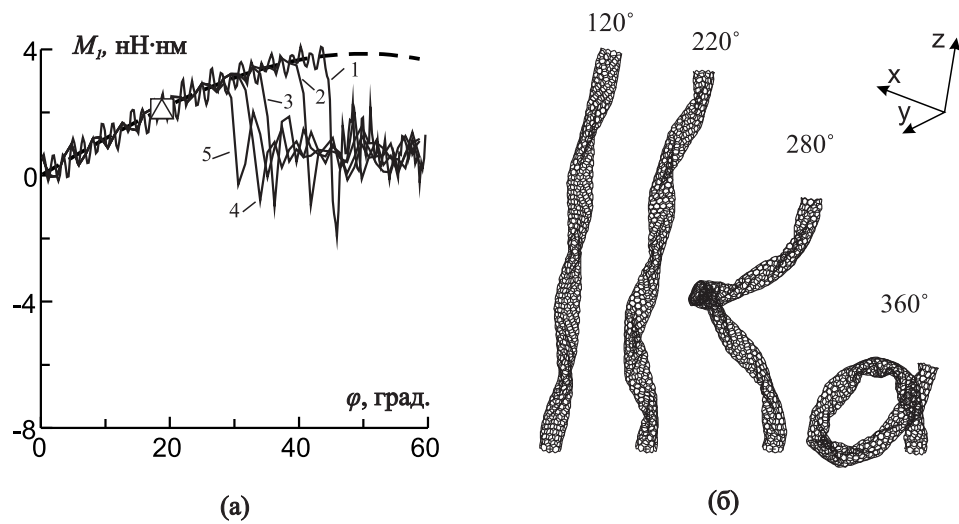


Рис. 2. Динамическое деформирование нанотрубки при постоянной скорости закручивания $\dot{\varphi} = 3.6$ град/пс: (а) – графики зависимости крутящего момента от угла закручивания, кривая 1 соответствует решению без возмущений, кривые 2 – 5 решениям задач с возрастающей амплитудой возмущений, штриховая линия соответствует решению квазистатической задачи; (б) – деформированные конфигурации в решении задачи без возмущений с учетом сил ВдВ.

точке квазибифуркации. В зависимости от вносимого в решение типа возмущения получены два типа деформированных конфигураций: стержневая и оболочечная.

В *разделе 3.5* приведены результаты математического моделирования деформирования и выпучивания «длинной» УНТ при кручении. Полученные в решениях квазистатической/динамической задач точки бифуркации/квазибифуркации на интегральных кривых деформирования при кручении близки. Формы выпучивания в этих точках идентичны. Чем меньше величины вносимого в решение возмущения (см. рис. 2,(а)), тем дальше от точки квазибифуркации кривая решения закритического деформирования «ответвляется» от кривой фундаментального решения (решения без складкообразования). При этом кривая решения с наибольшей величиной возмущения ответвляется от кривой фундаментального решения практически сразу за точкой квазибифуркации. Для всех вариантов расчетов с различными величинами возмущений равновесные конфигурации, соответствующие начальным участкам кривых закритического деформирования, близки к форме выпучивания нанотрубки, полученной в точке квазибифуркации. Отмечается существенное различие в результатах математического моделирования кручения УНТ без учета и с учетом сил ВдВ. Деформированные конфигурации с учетом сил ВдВ представлены на рис. 2,(б).

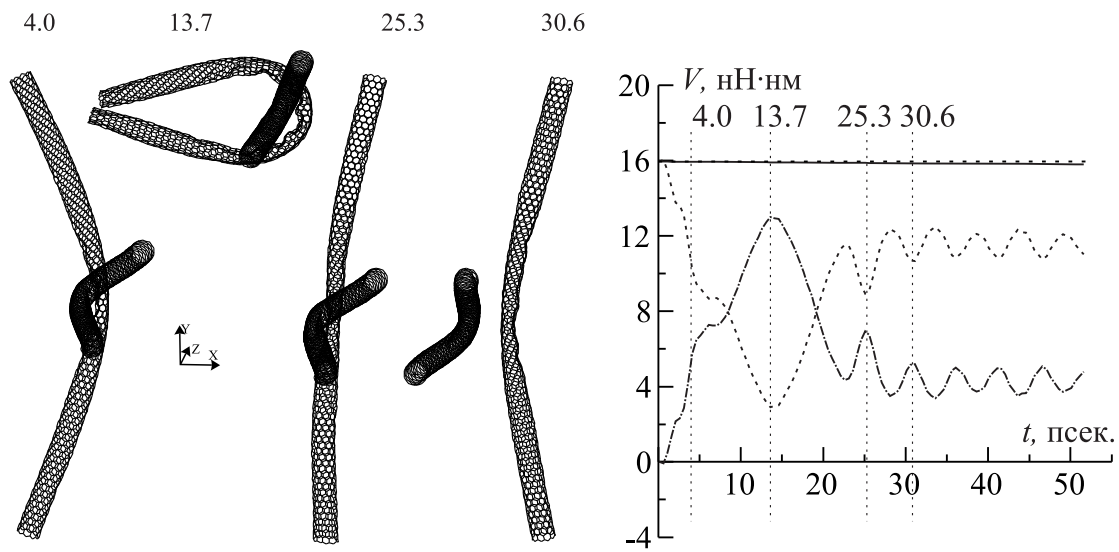


Рис. 3. Сценарий контакта нанотрубок для заданной начальной скорости движения нанотрубки $V_0 = 1.0$ нм/пс. Изменение полной энергии системы двух УНТ обозначено горизонтальной кривой, изменение полной кинетической энергии двух УНТ – штриховой линией, изменение полной потенциальной энергии двух УНТ – штрихпунктирной кривой. Штриховая горизонтальная прямая линия соответствует начальному значению общей энергии. Штриховые вертикальные линии соответствуют тем моментам времени, для которых приведены деформированные конфигурации.

Раздел 3.6 посвящен решению задач контакта двух нанотрубок. Торцы одной нанотрубки жестко закреплены, а вторая налетает на первую с заданной начальной скоростью свободного полета V_0 . Рассматривались четыре варианта начальной скорости налетания УНТ: $V_0 = 0.1; 0.3; 1.0; 3.0$ нм/псек. В зависимости от скорости налетания были отмечены три возможных сценария контактного взаимодействия: подлет и вход в контакт нанотрубок, последующее их склеивание и дальнейшее прокручивание одной относительно оси другой нанотрубки, контакт торцов налетающей нанотрубки (самоконтакт) и выход из контакта при отлете. Результаты численных решений задачи для значений начальной скорости $V_0 = 1.0$ нм/пс приведен на рис. 3. На рис. 3 представлены все стадии контактного взаимодействия нанотрубок: контакт, самоконтакт налетающей нанотрубки, отлет и выход из контактного взаимодействия, свободный полет трубки с наложенными свободными колебаниями. Показано, что пренебрежение учетом самоконтакта трубок приводит к решению задачи о контакте двух трубок, не имеющим физического смысла, так как внутренние и наружные стенки трубок самопересекаются.

В заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы:

1. Получены критерии потери устойчивости динамического деформирования наноструктур.
2. Развита процедура численных решений задач динамического выпучивания наноструктур, основанные на решении нелинейных уравнений методом молекулярной механики.
3. Процедуры численного решения динамических задач выпучивания наноструктур внедрены в пакет PIONER.
4. Разработан и реализован в пакете PIONER алгоритм решения задач о контакте/самоконтакте графеноподобных наноструктур в нелинейной постановке.
5. 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.
6. Получены решения новых задач о деформировании и выпучивании углеродных нанотрубок при их сжатии и кручении.
7. Получены решения новых задач о контакте двух углеродных нанотрубок.

Публикации по теме диссертации

1. Korobeynikov S.N., Babichev A.V. Numerical Simulation of Dynamic Deformation and Buckling of Nanostructures // Fracture Mechanics in Design of Fracture Resistent Materials and Structures, Moscow, Russia, 7-12 July 2007. Book of abstracts. – 2007. – 55 с.
2. Korobeynikov S.N., Babichev A.V. Stability Criteria for Processes of Nanostructures Deformation // MicroNanoReliability 2007, Berlin, Germany, September 2-5, 2007. Volume of abstracts. – 2007. – 130 с.
3. Аннин Б.Д., Коробейников С.Н., Бабичев А.В. Потеря устойчивости нанотрубки при кручении // V Всероссийская научная конференция «Механика микронеоднородных материалов и разрушение», Екатеринбург, Россия, 24-28 марта, 2008. – 2008. – 75 с.
4. Бабичев А.В. Компьютерное моделирование выпучивания фуллерена, сжатого на полюсах // Международная молодежная научная конференция «XXXV гагаринские чтения», Москва, Россия, 6-10 апреля, 2009. – 2009. – 12 с.

5. Бабичев А.В. Компьютерное моделирование контактного взаимодействия нанотрубок // Международная молодежная научная конференция «XXXVI гагаринские чтения», Москва, Россия, 6-10 апреля, 2010. – 2010. – 8 с.
6. Korobeynikov S.N., Annin B.D., Babichev A.V. Buckling Criteria for Nanostructures and Their Applications in Computer Simulation of Nanotube Twisting // 18th European Conference on Fracture "Fracture of Materials and Structures from Micro to Macro Scale, Dresden, Germany, August 30 – September 3, 2010. Volume of abstracts. – 2010. – 226 с.
7. Korobeynikov, S.N., Annin B.D., Babichev A.V. Methods of Determining the Critical Deformation Parameters and Buckling Modes of Nanostructures at Bifurcation/quasi-bifurcation Points of Integral Curves // International Conference on Applied Mathematics and Informatics, San Andres Island, Columbia, November 28 - December 3, 2010. – 2010. – 173 с.
8. Коробейников, С.Н., Бабичев А.В. Выпучивание нанотрубки при внезапном приложении постоянной осевой нагрузки // Сборник научных трудов «Математическое моделирование систем и процессов». под ред. П.В. Трусова и др. Пермь: Издательство ПГТУ. – 2008, – № 16. – С. 43 – 54. – 54 с.
9. **Бабичев А.В. Автоматизация построения моделей и визуализация результатов численного моделирования деформирования наноструктур // Вычислительная механика сплошных сред. – 2008. – №1. – С. 21 – 27. – с. 27.**
10. **Аннин Б.Д., Коробейников С.Н., Бабичев А.В. Компьютерное моделирование выпучивания нанотрубки при кручении // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2008. – №11. – С. 3 – 22. – с. 22.**
11. **Аннин Б.Д., Алехин В.В., Бабичев А.В., Коробейников С.Н. Компьютерное моделирование контакта нанотрубок // Известия РАН. МТТ. – 2010. – №3. – С. 56 – 76. – с. 76.**
12. Аннин Б.Д., Коробейников С.Н., Алехин В.В., Бабичев А.В. Эффект учета сил Ван-дер-Ваальса в задаче о выпучивании углеродной нанотрубки // Труды Всероссийской научной конференции «фундаментальные и прикладные вопросы механики и процессов управления», Владивосток, Россия, 11-17 сентября, 2011. – 2011. – 111 с.
13. Аннин Б.Д., Коробейников С.Н., Алехин В.В., Бабичев А.В. Критерии потери устойчивости наноструктур и их применение при компьютерном моделировании кручения одностенной углеродной нанотрубки // Сборник докладов Всероссийской научной конференции «Фундаментальные и прикладные вопросы механики и процессов управления», посвященной 75-летию со дня рождения академика В.П. Мясникова, Владивосток, Россия, 11-17 сентября, 2011 г. – 2011. – С. 15 – 35.

Подписано в печать 20.09.2011
Формат бумаги 60x84 1/16
Тираж 75 экз.

Заказ № 82
Объем 1 п.л.
Бесплатно

Отпечатано на полиграфическом участке Института гидродинамики
им. М.А. Лаврентьева СО РАН, 630090, Новосибирск, просп. акад. Лаврентьева, 15