

УДК 539.3

КП

№ госрегистрации 0109U001389

Инв. №

Министерство образования и науки Украины
Сумский государственный университет
(СумГУ)

40007, г. Сумы, ул. Р.Корсакова, 2;
тел. 33 41 08, факс (542) 33 40 49

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе,
д.ф.-м.н., профессор

_____ А. М. Чёрноус

2010.12.25

ОТЧЕТ

О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ В НАНОРАЗМЕРНЫХ И ФРАКТАЛЬНЫХ СТРУКТУРАХ (промежуточный)

Начальник НИЧ

канд. техн. наук, доцент

_____ В.А. Осипов
2010.12.25

Руководитель НИР зав. кафедрой
прикладной и вычислительной математики
д-р физ.-мат. наук, профессор

_____ Л.А. Фильштинский
2010.12.25

2010

Рукопись закончена 22 декабря 2010 года

Результаты этой работы рассмотрены на заседании научного совета СумГУ,
протокол от 2010.12.23 № 6

СПИСОК АВТОРОВ

Руководитель НИР
главный научный сотрудник,
д-р физ.-мат. наук, профессор

Л.А. Фильштинский
(реферат, раздел 1,
раздел 2, 3, Приложение)

Научный сотрудник

Т. Л. Мизина
(раздел 1)

Инженер 1-й категории

Л. Л. Фильштинская
(раздел 1)

Ассистент

Т. А. Киричек
(раздел 4)

Аспирант

Т. В. Мукомел
(раздел 4 (п. 1.1, 1.2))

РЕФЕРАТ

Отчет о НИР: 48 с., 25 рис., 4 табл., 65 ист.

Рассмотрены проблемы, связанные с определением механических свойств нанообъектов. Выделены три основных подхода к проблеме.

1. Аналитические, на основе стержневых, ферменных оболочных конструкций;

2. Методы МД моделирования на основе экспериментальных потенциалов взаимодействия;

3. Методы, основанные на теории регулярных структур.

Проведен обзор исследований по проблеме определения механических свойств наноразмерных объектов. Построена модель композитного материала с наноразмерной ячейкой. Проведено математическое моделирование эксперимента по определению модуля упругости наностержня.

Выявлены новые закономерности в механических характеристиках нанообъектов, в частности, модулей упругости, нанокристаллов и нанотрубок.

НАНОКРИСТАЛЛ, УГЛЕРОДНАЯ НАНОТРУБКА, МОДУЛЬ УПРУГОСТИ, КОЭФФИЦИЕНТ ПУАССОНА, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, НАНОКОМПОЗИТ, ФУНДАМЕНТАЛЬНОЕ РЕШЕНИЕ, НОВЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ТЕПЛОПЕРЕНОСА

СОДЕРЖАНИЕ

1 МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНООБЪЕКТОВ	5
1.1 Обзор некоторых работ по проблеме.....	5
2 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ МОДУЛЯ УПРУГОСТИ НАНОСТЕРЖНЯ	11
3 МЕХАНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК.	18
4 ДВУМЕРНЫЕ ГРАНИЧНЫЕ ЗАДАЧИ ФРАКТАЛЬНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ	25
4.1 Фундаментальное решение дробно-дифференциального оператора Лапласа ..	26
4.2 Первая основная граничная задача для дробно-дифференциального уравнения Лапласа.....	28
4.3 Фундаментальные решения фрактального уравнения теплопроводности (диффузии) в R^2	33
4.4 Фрактальная теплопроводность в тонкой пластинке, нагреваемой по краю	36
ПРИЛОЖЕНИЕ.....	40
ПЕРЕЧЕНЬ ССЫЛОК.....	44

1 МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНООБЪЕКТОВ

1.1 Обзор некоторых работ по проблеме

Нарушение континуальности материалов при сильном деформировании и разрушении создает серьезные сложности в описании подобных процессов в рамках классической механики сплошной среды. С другой стороны, развитие технологий, позволяющих изучать микроструктуру деформируемых тел, привело к накоплению фактов, свидетельствующих о чрезвычайно высокой роли внутренней структуры материала в процессах, сопровождающих его деформирование. Возросший в последнее десятилетие интерес к механическим свойствам нанобъектов потребовал еще более серьезного внимания к влиянию внутренней структуры материала на его механическое поведение. Особый интерес в этой области связан с появлением технологической возможности не только наблюдать и измерять элементы внутренней структуры твердых тел, но и оказывать влияние на эту структуру, а в случае нанотехнологий и создавать необходимые структурные элементы на микроуровне. В этой ситуации особую актуальность приобретает развитие аналитических и компьютерных моделей, которые бы могли адекватно описать механические свойства подобных сред и структур.

Бурное развитие вычислительной техники позволило на новом уровне вернуться к проблеме описания сред с микроструктурой, дополняя компьютерным моделированием решение проблем, недоступных для аналитического решения. Компьютерное моделирование становится важным звеном, занимающим промежуточное положение между теорией и реальным экспериментом. Основываясь на теоретических моделях, компьютерный эксперимент осуществляется в результате численного расчета, где сложность модели может сколь угодно увеличиваться по мере развития вычислительных средств, добиваясь все более точного соответствия условиям экспериментальных исследований. Таким образом, с одной стороны, повышаются возможности теоретических исследований, а, с другой стороны, появляется возможность многократно дублировать дорогостоящие экспериментальные исследования. Не имея возможности

существовать независимо от аналитической теории, создающей расчетную модель, и эксперимента, обеспечивающего соответствие между моделью и реальностью, компьютерное моделирование оказывается важным звеном объединяющим теорию и эксперимент.

В данной ситуации большие перспективы могут быть связаны с использованием метода частиц, который в последние десятилетия широко применялся в различных областях химии и физики, однако относительно мало использовался для моделирования механического поведения твердых тел. Являясь типичным методом компьютерного моделирования, по мере наращивания количественных возможностей вычислительной техники, метод частиц позволяет получать качественно новые результаты, за счет количественной сложности компьютерной модели. Как принципиально дискретный метод, он не имеет недостатков континуальных моделей, проявляющихся при нарушении сплошности вещества или в результате дискретности его внутренней структуры.

Однако оказались полезными и некоторые простейшие аналитические процедуры. Так, в работах [1 - 7] рассматривалась двумерная монокристаллическая полоса, содержащая N атомных слоев. Учитывалось только центральное взаимодействие каждого атома с атомами 1-й координационной сферы (рис. 1).

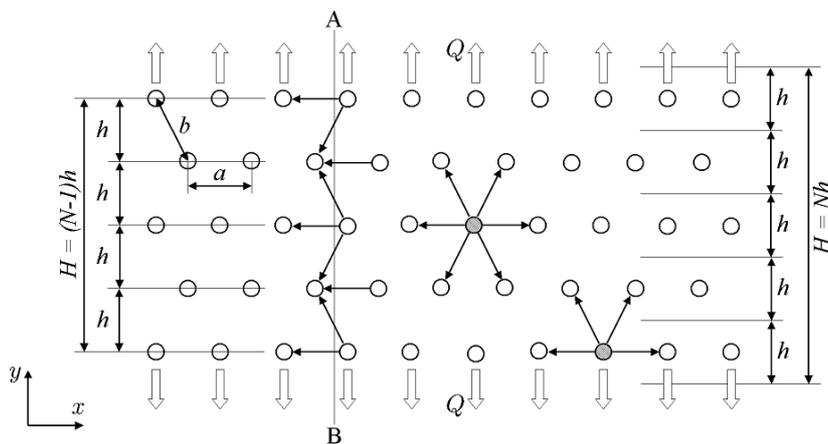


Рисунок 1 - Рассматриваемая модель: двумерная монокристаллическая полоса

Результаты сведены в таблицу 1.

Таблица 1 - Зависимость модулей упругости от числа слоев, $E_1^{\max} = E_1|_{N^*=N-1}$

N	E_1^{\max} / E_c	ν_2	ν_2 / ν_∞	E_2 / E_∞
2	2.00	0.18	0.53	1.06
3	1.50	0.23	0.69	1.04
5	1.25	0.27	0.82	1.02
10	1.11	0.30	0.91	1.01
20	1.05	0.32	0.96	1.01
100	1.01	0.33	0.99	1.00

В работе показано, что в определении размера нанобъекта существует принципиальный произвол, приводящий к неоднозначности многих макроскопических характеристик, таких как напряжение, модуль Юнга, удельная объемная энергия деформирования. Выбрать универсальное определение для размера нанобъекта не удастся: если добиваться того, чтобы модули упругости были максимально близки к своим макроскопическим значениям, то видоизменяются соотношения Коши-Грина и нарушается симметрия тензора упругости кристалла. Если, напротив, выполнить соотношения Коши-Грина, то значительно усиливается масштабный эффект.

Согласно полученным в [1, 2] результатам, погрешность, вызванная заменой континуальной среды ее атомарным аналогом, приближенно равна $1/N$, где N - отношение характерного линейного размера модели к среднему межатомному расстоянию. Из данной оценки следует, что для достижения погрешности в 1% при одномерном моделировании требуется 100 частиц, в двумерном случае - 10^4 частиц, в трехмерном - 10^6 . Расчет подобных систем вполне доступен для современных компьютеров, что свидетельствует о принципиальной возможности применения метода частиц в макроскопической области.

В [4, 5] в качестве модели для исследования влияния масштабного фактора на механические характеристики материала рассматривалась двумерная полоса из монокристаллического материала, обладающего гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решеткой (треугольной решеткой). В двумерном случае это единственная плотно-упакованная решетка. Для обобщения исследований на трехмерное пространство был выбран монокристалл, обладающий гранцентрированной

кубической решеткой. Эта решетка не единственная плотноупакованная, однако она была выбрана по нескольким причинам. Решетка весьма простая и широко распространена, такой решеткой обладают многие металлы. Кроме того, если рассмотреть сечение, перпендикулярное главной диагонали куба (направление 111), то можно получить двухмерную ГПУ решетку, что позволяет сравнить результаты, полученные для трехмерного случая с двухмерным [4, 5]. В работе также рассматривается направление вдоль ребра кубической решетки (направление 100), а результаты сравниваются с [7]. Взаимодействие между атомами считается парным. Для определения модулей упругости рассматривается задача трехостного растяжения монокристалла (без учета сдвига), в кристалле учитывается взаимодействие только ближайших атомов.

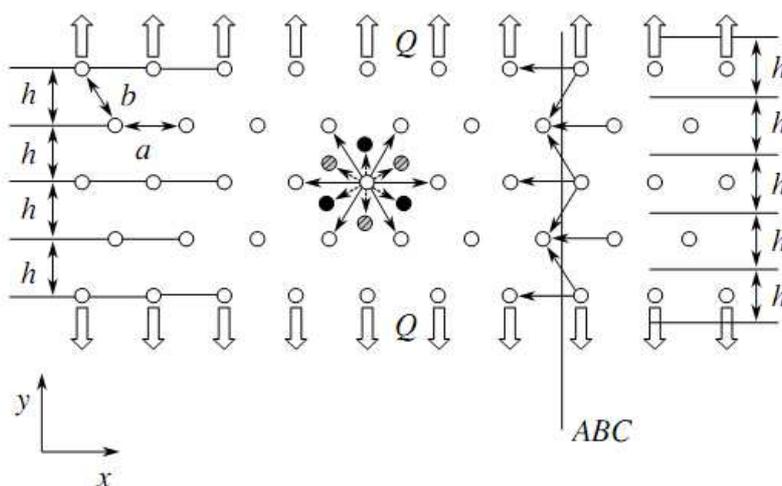


Рисунок 2 - Полоса с N атомными слоями

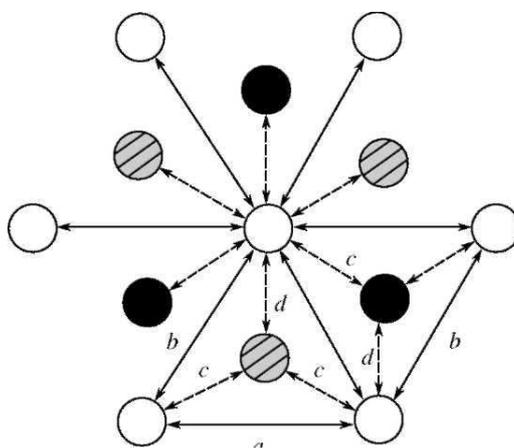


Рисунок 3 - Схема учета второй координационной сферы

Результаты расчетов представлены в таблицах 2, 3. Значения коэффициентов Пуассона для различного количества атомарных слоев N сведены в табл. 2. Для двух атомарных слоев приведены два варианта коэффициентов Пуассона при различных значениях поправок k_1, k_2, p . В строке $N = 2^*$ приведены результаты, полученные при подстановке в исходные уравнения поправок $k_1 = 4, k_2 = 1, p = 0$, которые точно соответствуют нанобрусу, имеющему $N_y = N_z = 2$ и бесконечное число слоев по направлению N_x .

Таблица 2 - Значения коэффициентов Пуассона для различного числа атомарных слоев

N	ν_1 / ν_1^∞	ν_2 / ν_2^∞	ν_3 / ν_3^∞
2*	1.123	0.676	0.569
2	1.163	0.676	0.568
4	1.072	0.847	0.799
6	1.046	0.900	0.869
10	1.027	0.941	0.923
20	1.013	0.971	0.962
50	1.005	0.988	0.985
100	1.003	0.994	0.993

Таблица 3 - Значения модулей упругости в различных направлениях

N	E_1^{\min} / E_1^∞	E_2^{\min} / E_2^∞	E_3^{\min} / E_3^∞	E_1^{\max} / E_1^∞	E_2^{\max} / E_2^∞	E_3^{\max} / E_3^∞
2*	0.958	1.047	0.872	3.833	2.095	1.744
2	0.954	1.015	0.872	3.818	2.030	1.744
4	0.975	1.005	0.937	1.734	1.340	1.249
6	0.983	1.003	0.958	1.416	1.204	1.150
10	0.990	1.002	0.975	1.222	1.113	1.083
20	0.995	1.000	0.988	1.103	1.053	1.039
50	0.998	1.000	0.995	1.039	1.021	1.015
100	0.999	1.000	0.998	1.019	1.010	1.008

Из результатов работы следует, что форма и размеры нанокристалла вносят дополнительную анизотропию в его упругие свойства. На анизотропию, связанную с видом кристаллической решетки накладывается анизотропия, вызванная его размером и формой. Все упругие характеристики трехмерного нанокристалла существенно зависят от числа атомарных слоев N . При увеличении числа слоев все они стремятся к своим макроскопическим значениям, соответствующим бесконечному кристаллу.

В определении размера нанообъекта существует принципиальный произвол, приводящий к неоднозначности таких макроскопических характеристик, как модуль Юнга. Особенно сильно эта неоднозначность проявилась для нанобруса в направлении кристалла 111. Из сравнения результатов, полученных здесь следует, что нельзя однозначно рекомендовать выбор величины N^* . Для направления 111 предпочтительнее выбор $N^* = N$, тогда как для 100 более выгодно выбрать $N^* = N - 1$.

В [4, 5] в двумерной задаче было получено, что для особо тонких пленок модуль может в 2 раза отличаться от своего макроскопического значения. Для трехмерного случая было получено увеличение модуля Юнга в 3.83 раза. Однако значения модуля Юнга не всегда возрастают при уменьшении размеров кристалла. Если выбрать другое определение размеров, то значения модуля Юнга будут уменьшаться с уменьшением количества атомарных слоев.

2 МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ МОДУЛЯ УПРУГОСТИ НАНОСТЕРЖНЯ

Методика определения жесткостных характеристик наностержня. Пусть на подложке в виде тонкой металлической пластинки-полоски или пленки, выращена система наностержней (нанотрубок). Растянув полоску в направлении оси стержня и замерив ее удлинение, можно определить среднюю деформацию системы в этом направлении. С другой стороны, теория регулярных структур [8 - 10] дает возможность вычислить средние деформации системы подложка - наностержни в зависимости от микроструктуры фундаментальной ячейки. Сравнив экспериментальные и теоретические значения средних деформаций, получим функциональное уравнение для определения жесткостных характеристик наностержня. Возникает обратная задача, решение которой может оказаться не единственным и неустойчивым. В качестве примера рассмотрим задачу о растяжении подложки, скрепленной с двоякопериодической системой стержней.

Пусть на подложке, которая представляет собой тонкую пластинку или достаточно жесткую пленку, выращена регулярная (двоякопериодическая) система наностержней (нанотрубок), ориентированных вдоль оси x , непрерывно скрепленных с подложкой (рис. 4). Обозначим через ω_1 и ω_2 ($\text{Im } \omega_1 = 0, \text{Im}(\omega_2 / \omega_1) > 0$) основные периоды структуры. Стержень представляет собой отрезок L длиной $2l$ с концевыми точками a, b ($\text{Im } a = \text{Im } b$). Центры стержней образуют двоякопериодическую систему точек $P = m\omega_1 + n\omega_2$.

В области, занимаемой указанной системой, имеют место средние напряжения $\langle \sigma_{ik} \rangle$ ($i, k = 1, 2$). В рамках принимаемой модели передача нагрузки от подложки к стержню осуществляется с помощью касательных напряжений $q_0(t)$. Составляя уравнение равновесия элемента стержня единичной длины в направлении оси x , выражаем погонное нормальное усилие в стержне через контактное усилие $q_0(t)$

$$P(t_0) = -\int_{t_0}^b q_0(t) dt, \quad P(b) = 0, \quad P(a) = -\int_a^b q_0(t) dt = 0.$$

На основе модели плоского напряженного состояния можно выразить смещения и напряжения в подложке через две аналитические в рассматриваемой области функции по формулам

$$\begin{aligned} h(z) &= 2\mu\delta(u_1 + iu_2) = \kappa\varphi(z) - z\overline{\Phi(z)} - \overline{\psi(z)}, \\ \delta(\sigma_{11} + \sigma_{22}) &= 4\operatorname{Re}\Phi(z), \\ \delta(\sigma_{22} - \sigma_{11} + 2i\sigma_{12}) &= 2\left[\overline{z}\Phi'(z) + \Psi(z)\right], \\ \Phi(z) &= \varphi'(z), \quad \Psi(z) = \psi'(z), \end{aligned} \quad (1)$$

Главный вектор сил, действующих вдоль произвольной дуги AB , определяется формулой

$$(X + iY) = \delta \int_{AB} (X_n + iY_n) ds = -i\delta g(z) \Big|_A^B. \quad (2)$$

Здесь

$$g(z) = \varphi(z) + z\overline{\Phi(z)} + \overline{\psi(z)}.$$

Интегральные представления аналитических функций, обеспечивающие двоякопериодическое распределение тензора напряжений в пластине, возьмем в виде [8]

$$\begin{aligned} \Phi(z) &= \frac{1}{2\pi(\kappa+1)} \int_L q_0(t) \zeta(t-z) dt + A_1, \\ \Psi(z) &= \frac{\kappa}{2\pi(\kappa+1)} \int_L q_0(t) \zeta(z-t) dt - \\ &- \frac{1}{2\pi(\kappa+1)} \int_L q_0(t) \left\{ \wp_1(z-t) + \bar{t}\wp(z-t) \right\} dt + A_2, \end{aligned} \quad (3)$$

в котором $\kappa = (3-\nu)/(1+\nu)$; ν – коэффициент Пуассона материала подложки; A_1, A_2 – постоянные, определяемые из условия существования в структуре заданных средних напряжений $\langle \sigma_{ik} \rangle$; $\wp(z)$ и $\zeta(z)$ – двоякопериодическая и квазипериодическая функции Веерштрасса [10]; $\wp_1(z)$ – специальная меморфная функция [8].

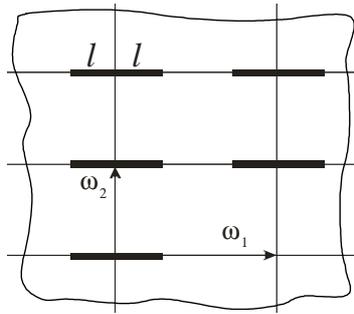


Рисунок 4 - Схема регулярной структуры

Квазипериодичность вектора перемещения и главного вектора сил на дуге. Интегрируя функции (3), находим

$$\begin{aligned} \varphi(z) &= -\frac{1}{2\pi(\kappa+1)} \int_L q_0(t) v(t-z) dt + A_1 z, \quad \varphi'(z) = \Phi(z), \\ \psi(z) &= \frac{\kappa}{2\pi(\kappa+1)} \int_L q_0(t) v(z-t) dt - \frac{1}{2\pi(\kappa+1)} \int_L q_0(t) \left\{ \wp_1^{(-1)}(z-t) + \right. \\ &\quad \left. + i\bar{\wp}^{(-1)}(z-t) \right\} dt + A_2 z, \quad \psi'(z) = \Psi(z), \end{aligned} \quad (4)$$

где [9, 10]

$$\begin{aligned} v'(z) &= \zeta(z), \quad \wp^{(-1)} = -\zeta(z), \quad \wp_1^{(-1)}(z) = \int \wp_1(z) dz, \\ v(z + \omega_\nu) - v(z) &= \pi i + \delta_\nu \left(z + \frac{1}{2} \omega_\nu \right), \quad \delta_\nu = 2\zeta \left(\frac{\omega_\nu}{2} \right) \quad (\nu = 1, 2), \\ \wp_1^{(-1)}(z + \omega_\nu) - \wp_1^{(-1)}(z) &= -\bar{\omega}_\nu \zeta(z) + \gamma_\nu z + \gamma_\nu^*, \\ \gamma_2 \omega_1 - \gamma_1 \omega_2 &= \delta_1 \bar{\omega}_2 - \delta_2 \bar{\omega}_1. \end{aligned}$$

Условия существования в структуре средних напряжений $\langle \sigma_{ik} \rangle$ приводят к системе уравнений относительно постоянных A_1 и A_2 , решение которой имеет вид

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} A_1 &= \frac{\langle \sigma_{11} \rangle + \langle \sigma_{22} \rangle}{4} \delta + \left(\frac{\pi(1+\kappa)}{2F} - \frac{\operatorname{Re} \delta_1}{\omega_1} \right) B, \\ A_2 &= \frac{\delta}{2} (\langle \sigma_{22} \rangle - \langle \sigma_{11} \rangle + 2i \langle \sigma_{12} \rangle) + \left(\frac{\kappa \delta_1 - \gamma_1}{\omega_1} - \frac{\pi(1+\kappa)}{F} \right) B, \\ B &= \frac{1}{2\pi(1+\kappa)} \int_L t q_0(t) dt, \quad F = \omega_1 \operatorname{Im} \omega_2. \end{aligned} \quad (5)$$

Таким образом, интегральные представления (3) при наличии равенств (5) корректны в том смысле, что они обеспечивают: двоякую периодичность поля напряжений в структуре; квазипериодичность вектора перемещений и главного вектора усилий на дуге, соединяющей конгруэнтные точки; существование заданных средних напряжений $\langle \sigma_{11} \rangle$, $\langle \sigma_{12} \rangle$, $\langle \sigma_{22} \rangle$ при любой плотности $q_0(t) \in H(L)$, удовлетворяющей условию

$$\int_L q_0(t) dt = 0.$$

Интегральные уравнения структуры подложка – наностержни. Приравнивая деформацию e_{11} подложки деформации стержня на L , получаем сингулярное интегродифференциальное уравнение

$$\int_L q_0(t) K(t-t_0) dt + \beta(t_0) \int_{t_0}^b q_0(t) dt + M\{q_0(t)\} = N, \quad t_0 \in L,$$

$$K(t-t_0) = \operatorname{Re} \left\{ \zeta(t-t_0) + \frac{(t-t_0) \overline{\wp(t-t_0)} - \overline{\wp_1(t-t_0)}}{2\kappa-1} \right\},$$

$$M\{q_0(t)\} = \left[\frac{\pi(1+\kappa)^2}{2(2\kappa-1)F} - \frac{(2\kappa-1)\operatorname{Re} \delta_1 - \operatorname{Re} \gamma_1}{(2\kappa-1)\omega_1} \right] \int_L t q_0(t) dt,$$

$$\beta\{t_0\} = \frac{8\pi E \delta}{(1+\nu)(5-3\nu)E_0 F_0(t_0)},$$

$$N = \frac{\pi(\kappa+1)\delta}{2(2\kappa-1)} \left[(3-\kappa)\langle \sigma_{22} \rangle - (1+\kappa)\langle \sigma_{11} \rangle \right]. \quad (6)$$

Здесь E , E_0 – модули упругости материалов подложки и наностержня; δ и ν – толщина и коэффициент Пуассона подложки; $F_0(t)$ – площадь поперечного сечения наностержня. Уравнение (6) в совокупности с дополнительным условием

$$\int_L q_0(t) dt = 0$$

однозначно определяет решение $q_0(t)$ на L .

Вводя безразмерные координаты $\xi = t/l$, $\lambda = 2l/\omega_1$, уравнение (6) приведем к виду

$$\int_{-1}^1 \frac{q(\xi)}{\xi - \xi_0} d\xi + \int_{-1}^1 K(\xi_0 - \xi)q(\xi) d\xi + \beta(\xi_0) \int_{\xi_0}^1 q(\xi) d\xi = \pi f_1, \quad (7)$$

где

$$K(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda}{2}\right)^{2j+2} \Lambda_j \xi^{2j+1},$$

$$\Lambda_0 = \frac{\omega_1}{2\kappa} \left\{ (2\kappa - 1) \operatorname{Re} \delta_1 - \operatorname{Re} \gamma_1 - \frac{\pi}{2H} (1 + \kappa)^2 \right\}, \quad H = |\omega_2| \sin \alpha,$$

$$\Lambda_j = \frac{1}{\kappa} \left\{ (j+1) \operatorname{Re} g_{2j+3}^{(1)} - (j+1-\kappa) \operatorname{Re} g_{2j+2}^0 \right\} \left(\frac{\omega_1}{2}\right)^{2j+2} \quad (j=1, 2, \dots),$$

$$\beta(\xi) = \frac{4\pi E \delta l}{(3-\nu)(1+\nu) E_0 F_0}, \quad q(\xi) = q_0(l\xi),$$

$$g_{2j+2} = \sum_{m,n} \left(\frac{1}{T}\right)^{2j+2}, \quad g_{2j+3}^{(1)} = \sum_{m,n} \frac{\bar{T}}{(T)^{2j+3}},$$

$$T = \frac{1}{2}(m\omega_1 + n\omega_2),$$

$$f_1 = \frac{(1+\kappa)\delta}{4\kappa} \left\{ (3-\kappa) \langle \sigma_{22} \rangle - (1+\kappa) \langle \sigma_{11} \rangle \right\}.$$

Уравнение (7) необходимо рассматривать совместно с дополнительным условием

$$\int_{-1}^1 q(\xi) d\xi = 0. \quad (8)$$

Макромодель нанокompозита. Пусть $q^c(\xi)$ – стандартное решение уравнений (7), (8), определяемое формулой (при $\langle \sigma_{11} \rangle \neq 0$, $\langle \sigma_{22} \rangle \neq 0$, $\langle \sigma_{12} \rangle = 0$)

$$q_0(t) = q(\xi) = \left[\langle \sigma_{11} \rangle + \frac{\kappa-3}{\kappa+1} \langle \sigma_{22} \rangle \right] \delta q^c(\xi). \quad (9)$$

Соответственно (9) функционал B из (5) примет вид

$$B = \frac{l^2 b_{11}^c \delta}{2\pi(\kappa+1)} \left[\langle \sigma_{11} \rangle + \frac{\kappa-3}{\kappa+1} \langle \sigma_{22} \rangle \right].$$

Здесь

$$b_{11}^c = \int_{-1}^1 \xi q^c(\xi) d\xi.$$

Средние деформации в структуре можно найти по формулам [8]

$$\langle e_{11} \rangle = \frac{1}{\omega_1} u_1(z) \Big|_z^{z+\omega_1}, \quad \langle e_{22} \rangle = \frac{1}{\text{Im } \omega_2} u_2(z) \Big|_z^{z+\omega_2} - \frac{\text{ctg } \alpha}{\omega_1} u_2(z) \Big|_z^{z+\omega_1},$$

$$2\langle e_{12} \rangle = \frac{1}{\omega_1} \left[u_2(z) - u_1(z) \text{ctg } \alpha \right] \Big|_z^{z+\omega_1} + \frac{1}{\text{Im } \omega_2} u_1(z) \Big|_z^{z+\omega_2}.$$

Выполняя предписанные операции взятия приращении от перемещений в конгруэнтных точках и, учитывая, что в рассматриваемом здесь случае $\text{Re } \omega_2 = 0$, приходим к уравнениям макромодели структуры

$$\begin{aligned} \langle e_{11} \rangle &= \langle a_{11} \rangle \langle \sigma_{11} \rangle + \langle a_{12} \rangle \langle \sigma_{22} \rangle, \\ \langle e_{22} \rangle &= \langle a_{12} \rangle \langle \sigma_{11} \rangle + \langle a_{22} \rangle \langle \sigma_{22} \rangle, \end{aligned} \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} \langle a_{11} \rangle &= \frac{1}{\langle E_1 \rangle} = \frac{1}{E} \left(1 + \frac{l^2 b_{11}^c}{\delta F} \right), \quad \langle a_{22} \rangle = \frac{1}{\langle E_2 \rangle} = \frac{1}{E} \left(1 + \nu^2 \frac{l^2 b_{11}^c}{\delta F} \right), \\ \langle a_{12} \rangle &= -\frac{\nu}{E} \left(1 + \frac{l^2 b_{11}^c}{\delta F} \right). \end{aligned}$$

При этом следует учитывать, что при достаточно плотной упаковке решетки площадь ячейки F должна иметь порядок l^2 . Только в этом случае можно рассчитывать на устойчивость решения обратной задачи.

Из (10) видно, что наиболее существенно изменяется макромодуль $\langle a_{11} \rangle$, величина $\langle a_{12} \rangle$ по абсолютной величине равна $\nu \langle a_{11} \rangle$, величина $\langle a_{22} \rangle \cdot E$ изменяется как $1 + O(\nu^2)$. Это объясняется тем, что стержни ориентированы вдоль оси Ox и их присутствие не влияет на сдвиговые деформации системы. Функционал b_{11}^c содержит в себе информацию о структуре фундаментальной ячейки (в данном

случае о жесткости и геометрических параметрах наностержня). Поэтому, определив $\langle E_1 \rangle$ из эксперимента, получаем уравнение для определения модуля упругости наностержня

$$b_{11}^c = \frac{\delta F}{l^2} \left(\frac{E}{\langle E_1 \rangle} - 1 \right).$$

Из анализа результатов следует, что симбиоз аналитического алгоритма и эксперимента может иметь успех, т.е. привести к определению модуля упругости наностержня в зависимости от его геометрических параметров, только при достаточно плотной упаковке их в системе подложка–наностержни.

3 МЕХАНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Углеродные нанотрубки (УНТ) привлекают все больший интерес в связи с их исключительными механическими, термическими и электрическими свойствами [11 - 16]. Один из возможных способов применения УНТ – это развитие композитов на основе УНТ с включением нанотрубок в различных матрицах и, это приводит к улучшению их физических свойств. Qian и др. [17] получили, что добавление всего 1% мас. УНТ в полистирол приводит к увеличению модуля упругости и прочности примерно на 35% - 42% и 25% соответственно. В общем, точная оценка свойств отдельных нанотрубок имеет важное значение для развития на основе УНТ армированных композитов. Таким образом, механические свойства УНТ были предметом ряда экспериментальных [18 - 22] и теоретических исследований [23 - 41, 43 - 45], со времени их открытия в 1991 году. Экспериментальные методы измерения механических свойств нанотрубок в основном базируются на технологиях трансмиссионной электронной микроскопии (ТЭМ) и атомно – силовой микроскопии (АСМ).

Однако экспериментальные уровни ошибок слишком велики, чтобы предоставить характеристики УНТ в зависимости от различных размеров и конструкции. Математическое моделирование для прогнозирования механических свойств нанотрубок рассматривалось в качестве мощного инструмента по сравнению с экспериментальными методами, где есть свои трудности. Классическая молекулярная динамика (МД) и не эмпирические методы [23 - 31] использовались широко. Yakobson и его сотрудники [23 - 26] использовали МД метод моделирования упругости и пластичности свойств нанотрубок. Они использовали модели многоатомных потенциалов в совокупности с моделью оболочки сплошной среды и оценили модуль упругости около 5,5 ТПа [21]. Hernandez и др. [27, 28] оценили модуль упругости и коэффициент Пуассона ОУН с различными хиральными векторами. Используя метод сильной механической связи, они получили оценку поверхностного модуля 0,42–нм. В целом, не эмпирические

методы дают более точные результаты, чем МД – моделирование. Lieg и др. [29] получили модуль упругости выше, чем 1 ТПа с использованием не эмпирического метода. Lu [30, 31] исследовал упругие свойства нанотрубок и наностержней с использованием эмпирической модели с постоянными силами. Он получил, что модуль Юнга и модуль сдвига не превышает 1,0 и 0,45 ТПа, соответственно. Odegard и др. [32] предложили моделирование УНТ как континуум приравнивая потенциальную энергию к той, что представляет единицу объема (ПЕО). Они применяют методы ПЕО к базовой модели УНТ композитных систем [33]. Ruqff и Lorents [36] предложили использовать модуль упругости графита без учета изменения атомной структуры, когда часть листа графена скатывается в нанотрубку. Однако, теоретических работ посвященных механическим свойствам многослойных нанотрубок сравнительно мало [37, 38] Tu и др. [38], показали, что эффективность определения упругости многослойных нанотрубок будет зависеть от их номера (порядка) слоя и иметь большую область варьирования. Молекулярная и механика деформируемого твердого тела стали достаточно развиты для описания свойств материалов с микро- и макроструктурами, соответственно. Тем не менее, МД – метод требователен к доступным вычислительным мощностям. Хорошо утвердившая себя модель механики сплошных сред в наномасштабах является сложной задачей для компьютерного моделирования. Т. Natsuki и др. определяют в замкнутой форме выражения для моделирования упругих модулей и однослойных углеродных нанотрубок, и многослойных углеродных нанотрубок на основе ферменных моделей конструкций.

Сравнение теоретических результатов с данными по МД моделированию приведены на рис. 9-12.

Механические характеристики углеродных нанотрубок.

Углеродные нанотрубки - протяжённые структуры, состоящие из свёрнутых гексагональных сеток диаметром от одного до нескольких десятков нанометров и длиной до нескольких сантиметров с атомами углерода в узлах.

Для получения нанотрубки (n, m), графитовую плоскость надо разрезать по направлениям пунктирных линий и свернуть вдоль направления вектора R .

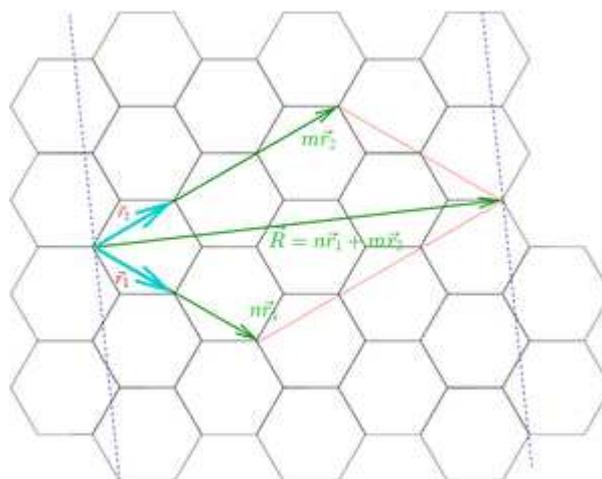


Рисунок 5 - Плоская графитовая сетка

Идеальная нанотрубка - это цилиндр, полученный при свертывании плоской гексагональной сетки графита без швов (рис. 6).

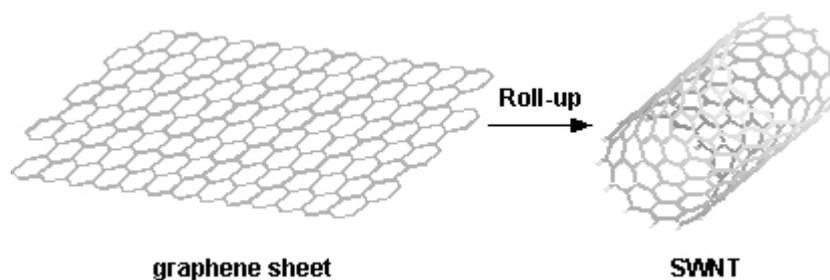


Рисунок 6 - Схема сворачивания графитового листа в нанотрубку

По значению параметров (n, m) различают (рис. 7)
 прямые (ахиральные) нанотрубки
 «кресло» или «зубчатые» (armchair) $n=m$
 зигзагообразные (zigzag) $m=0$ или $n=0$
 спиральные (хиральные) нанотрубки

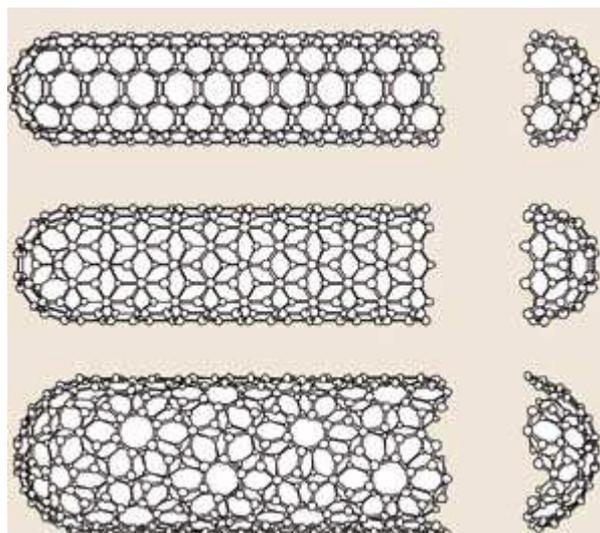


Рисунок 7 - Типы нанотрубок

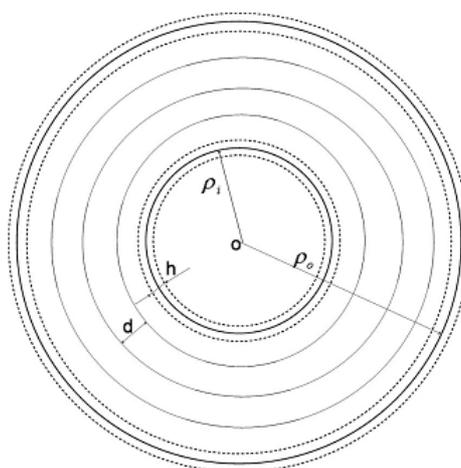


Рисунок 8 - Конструкция MWNT с поперечным сечением перпендикулярно оси трубки

$$Y_m = \frac{N}{N-1+h/d} \frac{h}{d} Y.$$

Результаты расчетов представлены в таблице.

Таблица 4 - Зависимость модуля Юнга от числа слоев трубки

N	1	2	3	4	5	8	10	20	100
Y_m	4.70	1.70	1.41	1.29	1.23	1.15	1.13	1.08	1.05

В [44] описывается структурный подход к моделированию механических свойств углеродных нанотрубок (УНТ). На основе модели ферменных конструкций, связанных межатомными потенциалами, получено замкнутое упругое решение для определения механических свойств однослойных углеродных нанотрубок (ОУН).

Кроме того, модуль упругости многослойных углеродных нанотрубок (МУН) также определен и для группы из вышеупомянутых ОУН с равномерным интервалом расстояния. Используя структурный подход механики, модуль упругости, коэффициент Пуассона и коэффициент деформации ОУН были исследованы в зависимости от размера и структуры нанотрубок. Коэффициент Пуассона ОУН показывает зависимость от хиральности, а модуль упругости нечувствителен к хиральности. Расположение энергии деформации связей показывает, достаточна ли разница между конфигурациями «зигзаг» и «кресло» трубы под нагрузкой. «Зигзаг» трубки, по прогнозам, имеют более низкое собственное удлинение, чем «кресло» трубки.

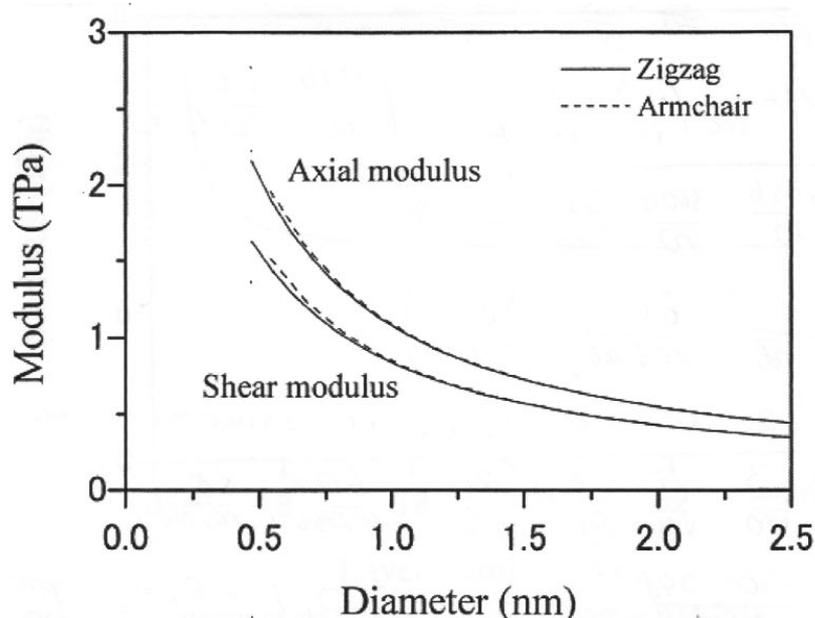


Рисунок 9 - Изменение модуля упругости в зависимости от диаметра для «armchair» и зигзагообразной трубок

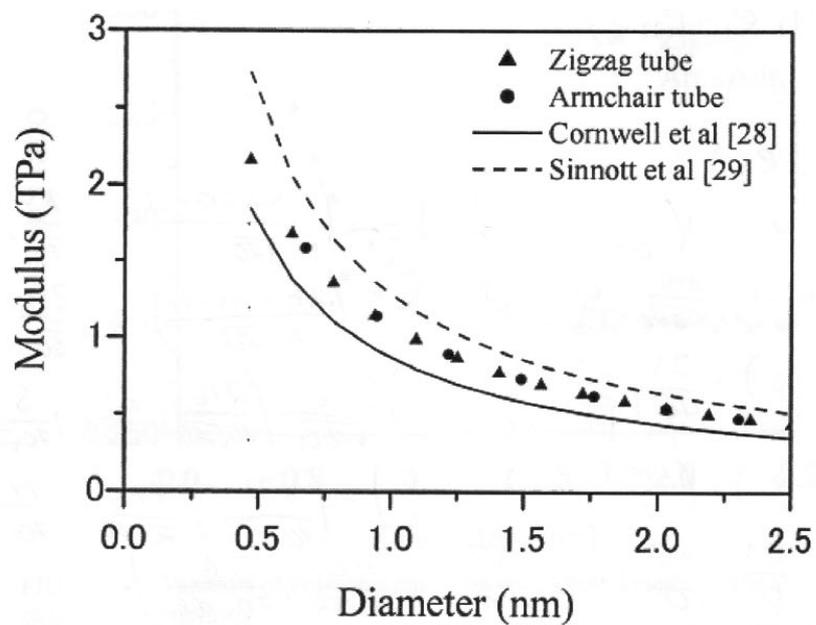


Рисунок 10 - Сравнение данной теории с проведенными MD моделированиями

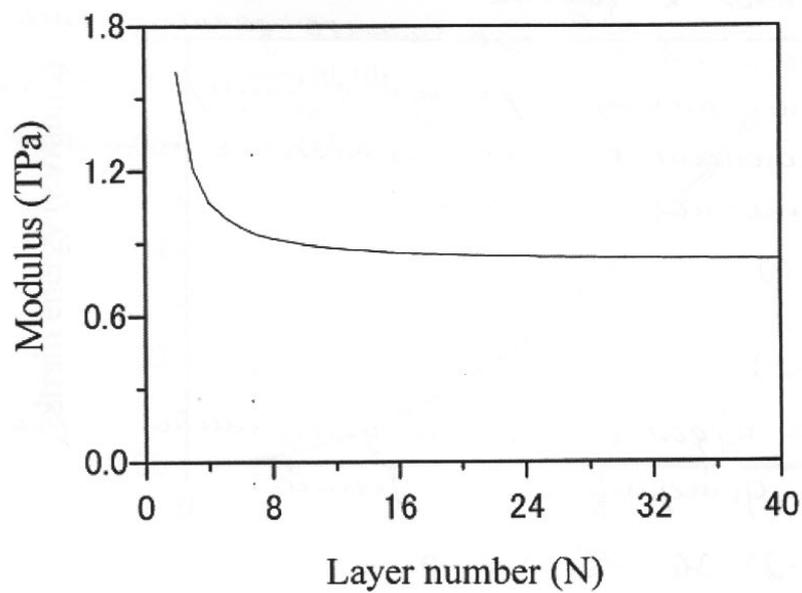


Рисунок 11 - Изменение модуля упругости в зависимости от количества слоев многослойных углеродных нанотрубок

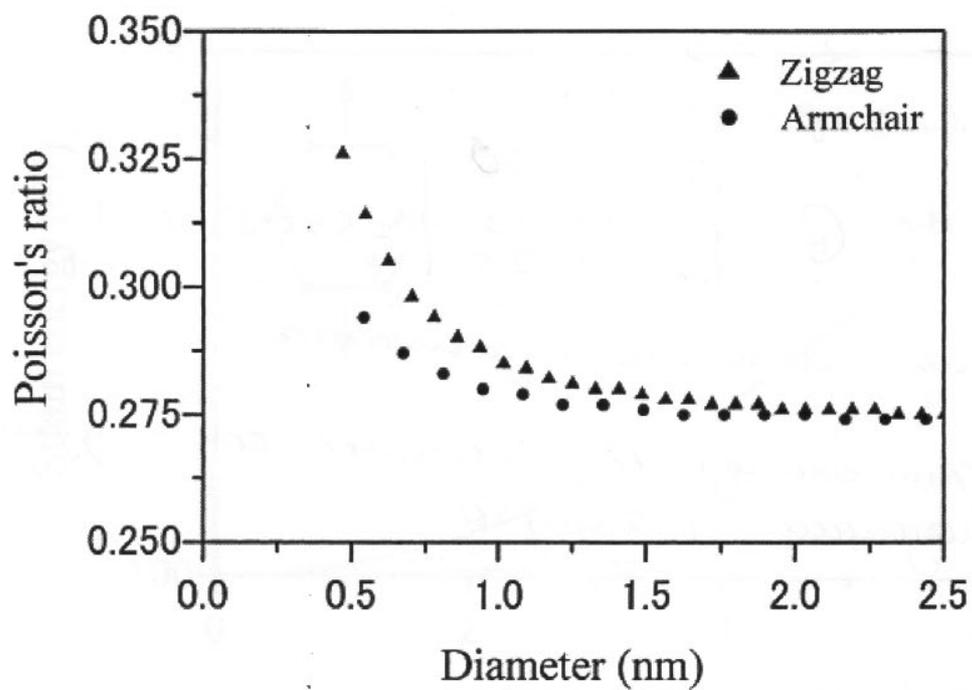


Рисунок 12 - Изменение коэффициента Пуассона в зависимости от диаметра для "armchair" и зигзагообразной трубок

4 ДВУМЕРНЫЕ ГРАНИЧНЫЕ ЗАДАЧИ ФРАКТАЛЬНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Дробную степень Лапласиана $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial x_n^2}$ в евклидовом

пространстве R^n называют также дробной производной Рисса [45] либо оператором Рисса-Вейля [46]. Она легко определяется при помощи преобразования Фурье F : $F\left[(-\Delta)^{\beta/2} f(\xi)\right] = |\xi|^\beta F[f(\xi)]$. Дробный Лапласиан $-(-\Delta)^{\beta/2}$ с показателем $1 < \beta < 2$ порождает β -устойчивый закон Леви [47, 48] и входит в состав уравнений, описывающих модели случайных блужданий, процессы аномальной диффузии (теплопроводности).

В настоящее время существует значительное число работ, посвященных численному решению граничных задач для дифференциальных уравнений, содержащих дробную производную Рисса. В работе [49] исследованы вычислительные аспекты конечно-элементной аппроксимации фрактального уравнения переноса в ограниченной двумерной области. В статье [50] рассматривается метод конечных разностей в качестве метода решения пространственно-дробного уравнения диффузии для отрезка с изолированными концами. Несколько численных схем аппроксимации оператора дифференцирования Рисса предложено авторами [51].

Аналитические и численно-аналитические методы практически отсутствуют в литературе, и поэтому их разработка является важной исследовательской задачей. Наиболее популярным аналитическим методом решения граничных задач для уравнений аномальной диффузии и теплопроводности является метод интегральных преобразований. Так, в работе [52] рассмотрено уравнение реакции-диффузии, содержащее дробные операторы дифференцирования Капуто и Рисса-Феллера. Для решения краевой задачи применяются интегральные преобразования Лапласа и Фурье.

В данном разделе рассмотрена первая основная граничная задача для двумерного фрактального уравнения теплопроводности, содержащего производные Капуто и Рисса. В качестве вспомогательных задач найдены фундаментальные решения дробного оператора Лапласа и уравнения аномальной теплопроводности. При решении задач применялся метод интегральных преобразований и интегральных уравнений.

4.1 Фундаментальное решение дробно-дифференциального оператора Лапласа

Фундаментальное решение дробно-дифференциального оператора Лапласа будем искать из уравнения [53]

$$(-\Delta)^{\beta/2} T(x) = \delta(x), \quad 1 < \beta < 2, \quad x = (x_1, x_2) \in R^2. \quad (11)$$

Используя определение дробной степени Лапласиана и применяя преобразование Фурье к уравнению (11), получим

$$|\xi|^\beta F[T(x)] = 1, \quad F[T] = 1/|\xi|^\beta, \quad (12)$$

где $F[T(x)] = \int_{R^2} T(x) e^{-i\xi x} dx$.

Обращение преобразования Фурье в последнем уравнении (12) приводит к следующему выражению

$$T(r, \alpha) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \left\{ \frac{1}{\rho^\beta} \int_0^{2\pi} e^{i\rho r \cos(\varphi - \alpha)} d\varphi \right\} \rho d\rho, \quad \xi = \rho e^{i\varphi}, \quad x = r e^{i\alpha}. \quad (13)$$

Справедливы следующие формулы [54]

$$e^{i\rho r \cos(\varphi - \alpha)} = \cos[\rho r \cos(\varphi - \alpha)] + i \sin[\rho r \cos(\varphi - \alpha)] = J_0(\rho r) + 2 \sum_{k=1}^{\infty} J_{2k}(\rho r) \cos(2k(\varphi - \alpha)) + 2i \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k J_{2k+1}(\rho r) \cos((2k+1)(\varphi - \alpha)). \quad (14)$$

Подставляя (14) в (13) и интегрируя, получим искомую функцию в виде [55]

$$T(r, \alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{J_0(\rho r)}{\rho^{\beta-1}} d\rho = \frac{\Gamma(1-\beta/2)}{2^\beta \cdot \pi \cdot \Gamma(\beta/2)} \cdot \frac{1}{r^{2-\beta}}, \quad (15)$$

где $\Gamma(\beta)$ – Гамма-функция Эйлера.

Фундаментальное решение (15) было недавно получено в работе [56] при помощи метода интегральных преобразований и контурного интегрирования.

При $\beta = 2$ уравнение (11) принимает вид

$$\Delta T = -\delta(x). \quad (16)$$

Фундаментальное решение (16) запишется в виде [57]

$$T_2 = -\frac{1}{2\pi} \ln r.$$

На рис. 13 изображена функция (15) в зависимости от r при различных значениях параметра β . При $\beta \rightarrow 2$ решение (15) совпадает с функцией T_2 с точностью до некоторой постоянной (рис. 14).

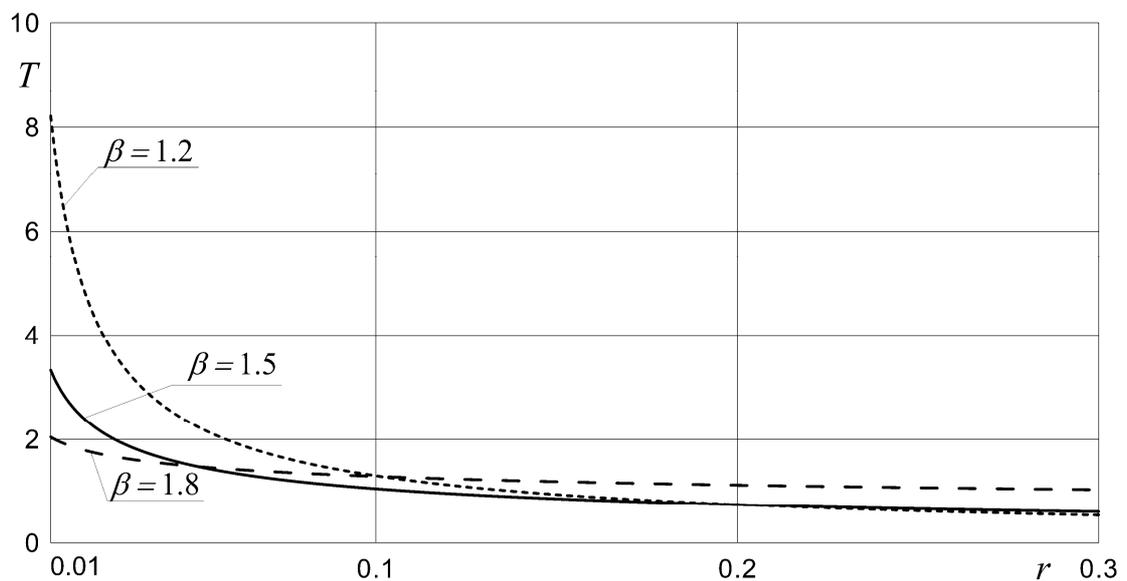


Рисунок 13 - Графики зависимости фундаментального решения (1.5) от координаты r при различных $1 < \beta < 2$

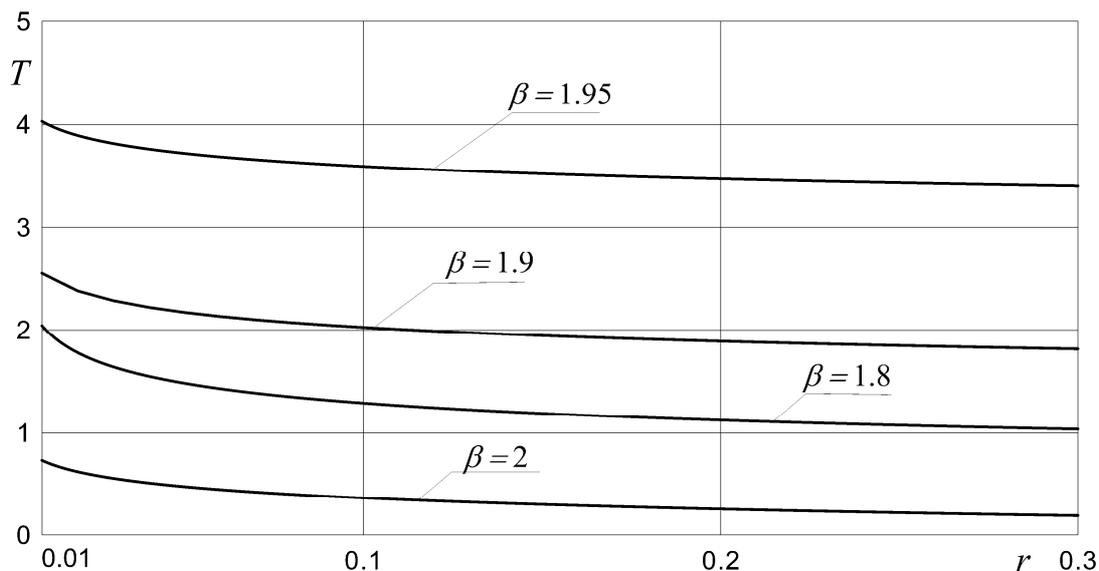


Рисунок 14 - Графики зависимости фундаментального решения (1.5) от координаты r при $\beta \rightarrow 2$

4.2 Первая основная граничная задача для дробно-дифференциального уравнения Лапласа

Рассмотрим следующую граничную задачу

$$(-\Delta)^{\beta/2} T(x) = 0, \quad 1 < \beta < 2, \quad x = (x_1, x_2) \in D \subset R^2, \quad (17)$$

$$T(x)|_{\Gamma} = f(x), \quad \Gamma = \bar{D} \setminus D \text{ – граница области } D. \quad (18)$$

На основании полученного фундаментального решения (15) представим функцию $T(x)$ в виде свертки

$$T(x) = A \int_{\Gamma} \frac{p(\zeta)}{|\zeta - x|^{2-\beta}} dg, \quad A = \frac{\Gamma(1 - \beta/2)}{2^{\beta} \cdot \pi \cdot \Gamma(\beta/2)}. \quad (19)$$

Здесь $\zeta \in \Gamma$, $p(\zeta)$ – неизвестные функции, подлежащие определению на Γ , dg – элемент дуги кривой Γ .

Подставляя представление (19) в граничное условие (18), получим функциональное равенство для определения $p(\zeta)$

$$\int_{\Gamma} \frac{p(\zeta)}{|\zeta - \zeta_0|^{2-\beta}} dg = \frac{1}{A} f(\zeta_0), \quad \zeta_0 \in \Gamma.$$

После параметризации контура Γ : $\zeta = \zeta(t) = \zeta_1(t) + i\zeta_2(t)$, $\zeta_0 = \zeta_0(t_0)$, получаем следующее уравнение

$$\int_0^{2\pi} \frac{p(t) \sqrt{\zeta_1'^2(t) + \zeta_2'^2(t)}}{|\zeta(t) - \zeta_0(t_0)|^{2-\beta}} dt = \frac{1}{A} f(t_0). \quad (20)$$

Уравнение (20) представляет собой интегральное уравнение I рода со слабой особенностью. При $1.5 < \beta < 2$ ядро данного интегрального уравнения является Фредгольмовым. Справедлива следующая

Теорема. Пусть $K(t, t_0)$ – симметричное, положительно определенное ядро и пусть уравнение

$$\int_a^b K(t, t_0) y(t) dt = f(t_0), \quad f(t_0) \in L^2[a, b] \quad (21)$$

имеет единственное решение. Тогда последовательность функций $\{y_n(x)\}$, определяемая рекуррентным соотношением

$$y_n(t_0) = y_{n-1}(t_0) + \lambda \left[f(t_0) - \int_a^b K(t_0, t) y_{n-1}(t) dt \right], \quad n = 1, 2, \dots, \quad (22)$$

где

$$y_0(t_0) \in L^2[a, b], \quad 0 < \lambda < 2\lambda_1,$$

λ_1 – наименьшее характеристическое число ядра $K(t_0, t)$, сходится (по норме $L^2[a, b]$) к решению уравнения (21).

В качестве примера рассмотрим граничную задачу (17) - (18) при $f(t_0) = \sin t_0$. Численное решение уравнения (20) проводилось при помощи метода последовательных приближений, причем в качестве нулевого приближения была выбрана функция $y_0(t_0) = 0$. Выбор параметра λ контролировался сходимостью процесса (22).

На рис. 15-16 изображены линии уровня функции $T(x)$ (температуры) в эллиптической и круговой области при различных значениях β .

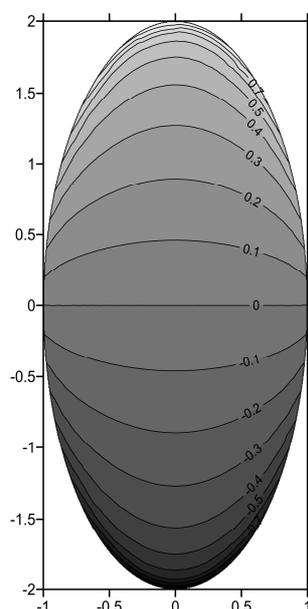


Рисунок 15 - Распределение $T(x)$ в эллиптической области при $\beta = 1.1$

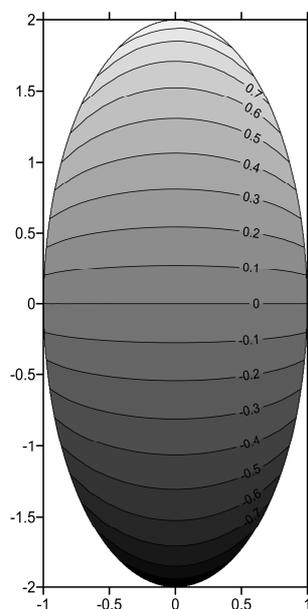


Рисунок 16 - Распределение $T(x)$ в эллиптической области при $\beta = 1.5$

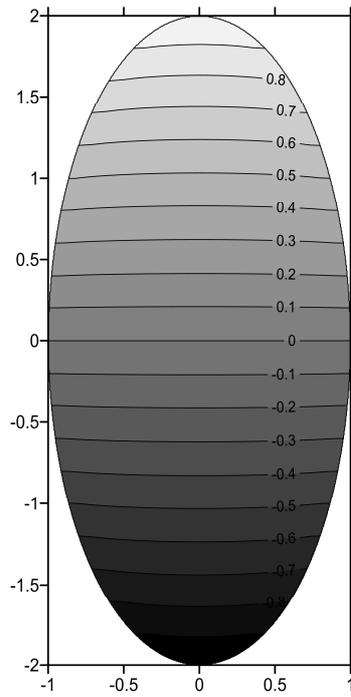


Рисунок 17 - Распределение $T(x)$ в эллиптической области при $\beta = 1.9$

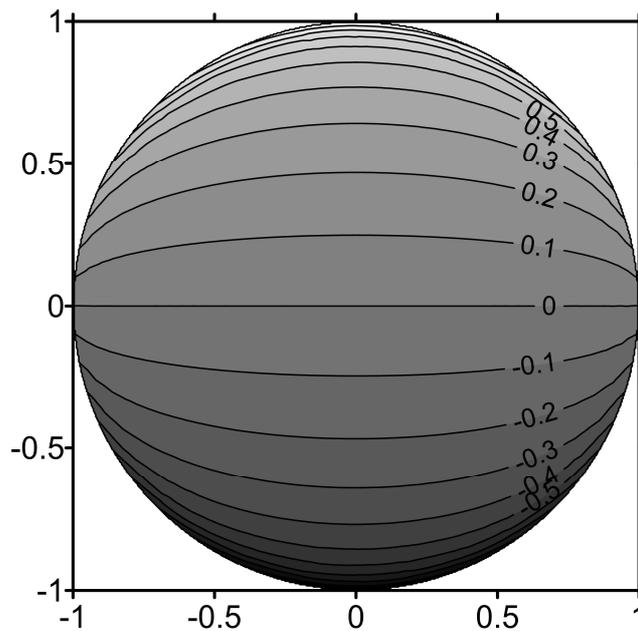


Рисунок 18 - Распределение $T(x)$ в круговой области при $\beta = 1.1$

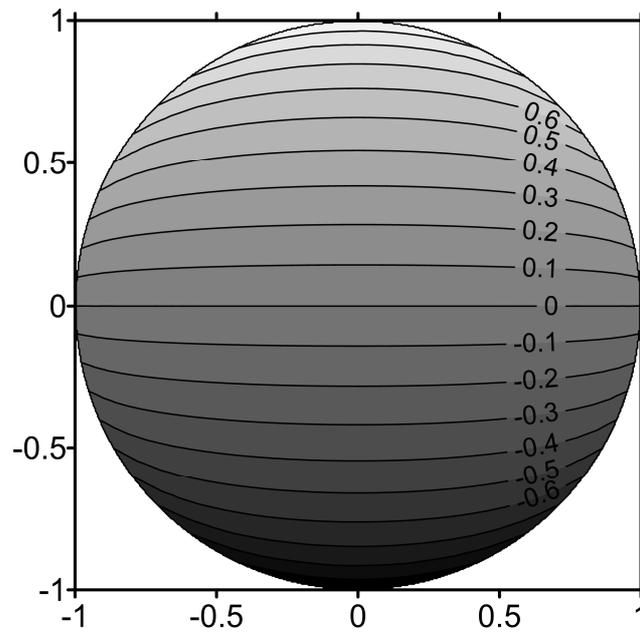


Рисунок 19 - Распределение $T(x)$ в круговой области при $\beta = 1.5$

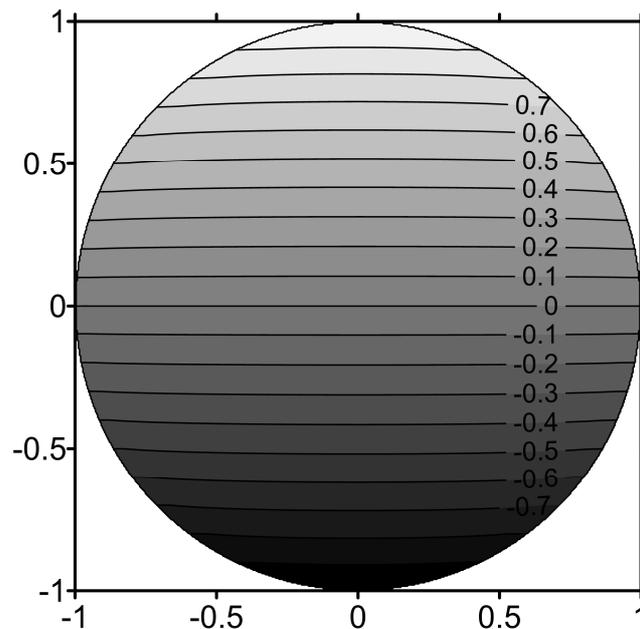


Рисунок 20 - Распределение $T(x)$ в круговой области при $\beta = 1.9$

На основании полученных численных результатов видим, что изменение функции в области более «равномерное» при $\beta \rightarrow 2$ (рис. 17 - 20). Если рассматривать дробный Лапласиан в связи со стационарным процессом аномальной теплопроводности (диффузии), то более «плавное» распределение температуры связано с тем, что температура в некоторой

точке определяется её эволюцией во всей рассматриваемой области (эффект больших пробегов, называемых полетами Леви) — наиболее четко это видно на рис. 15, 18.

4.3 Фундаментальные решения фрактального уравнения теплопроводности (диффузии) в R^2

Дробное исчисление получило широкое распространение ещё в IX веке, однако только в последние годы у исследователей возник значительный интерес к дробному дифференцированию благодаря его приложениям в моделях хаотической динамики, аномальной диффузии, аномальной теплопроводности, распространения волн в пористых средах.

Явление аномальной диффузии связано с устойчивым распределением Леви (в отличие от обычной диффузии, связанной с гауссовым распределением). В работе [60] устанавливается соответствие между аномальной диффузией и аномальной теплопроводностью. Эти процессы описываются уравнениями в частных производных с дробными операторами дифференцирования Рисса и Капуто [61, 62].

В данном разделе определим фундаментальное решение следующего дробно-дифференциального уравнения теплопроводности

$$a^2 (-\Delta)^{\beta/2} T + \frac{\partial^\alpha T}{\partial t^\alpha} = \delta(x, t), \quad 0 < \alpha \leq 2, \quad 1 < \beta \leq 2, \quad (23)$$

где T – температура, a^2 – коэффициент температуропроводности, $t > 0$, $x = (x_1, x_2)$, $\partial^\alpha / \partial t^\alpha$ – дробная производная Капуто [63], $(-\Delta)^{\beta/2}$ – дробная производная Рисса [48], $\delta(x, t)$ – дельта-функция Дирака.

Применяя преобразование Фурье по пространственной координате $x = (x_1, x_2)$ и преобразование Лапласа по времени, получим следующее уравнение

$$\left(|\xi|^\beta + \frac{s^\alpha}{a^2} \right) \bar{T} = \frac{1}{a^2}, \quad \bar{T}(\xi, s) = \int_0^\infty e^{-st} \int_{-\infty}^{+\infty} T(x, t) e^{-i\xi x} dx dt. \quad (24)$$

Введем в рассмотрение полярные координаты $\xi = (\xi_1, \xi_2)$, $\xi_1 = \rho \cos \varphi$, $\xi_2 = \rho \sin \varphi$. Принимая во внимание уравнение (24) и формулы (14), представим решение уравнения (23) в виде

$$T(x, t) = \frac{1}{2a^2 \pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{\rho J_0(\rho|x|)}{\rho^\beta + \frac{s^\alpha}{a^2}} d\rho \right\} ds, \quad (25)$$

где $J_0(x)$ – функция Бесселя.

Рассмотрим несколько частных случаев.

Пусть $\alpha = \beta = 2$. Уравнение (23) является волновым уравнением

$$\frac{\partial^2 T}{\partial t^2} - a^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) T = \delta(x, t). \quad (26)$$

Решение уравнения (26) хорошо известно и определяется следующим выражением [57]

$$T(x, t) = \frac{H(at - |x|)}{2\pi a \sqrt{a^2 t^2 - |x|^2}}, \quad (27)$$

где $H(x)$ – функция Хевисайда.

Интеграл в правой части (25) преобразуется следующим образом

$$T(x, t) = -\frac{i}{4a^2 \pi^2} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} K_0 \left(\frac{|x|s}{a} \right) ds. \quad (28)$$

При $\alpha = 1$, $\beta = 2$ в левой части уравнения (23) получаем оператор теплопроводности, фундаментальное решение которого имеет вид [57]

$$T(x, t) = \frac{H(t)}{4a^2 \pi t} e^{-\frac{|x|^2}{4a^2 t}}. \quad (29)$$

Представление (25) в этом случае запишется так

$$T(x,t) = -\frac{i}{4\pi^2 a^2} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} K_0\left(\frac{|x|\sqrt{s}}{a}\right) ds. \quad (30)$$

На рис. 21 - 22 представлены графики зависимости температуры от времени при различных α и β для следующих значений параметров: $|x|=1$ м, $a=1$ м²/с. Результаты расчетов проводились согласно полученным соотношениям (25), (27) – (30). Обращение преобразования Лапласа выполнялось численно при помощи метода, описанного в работе [64].

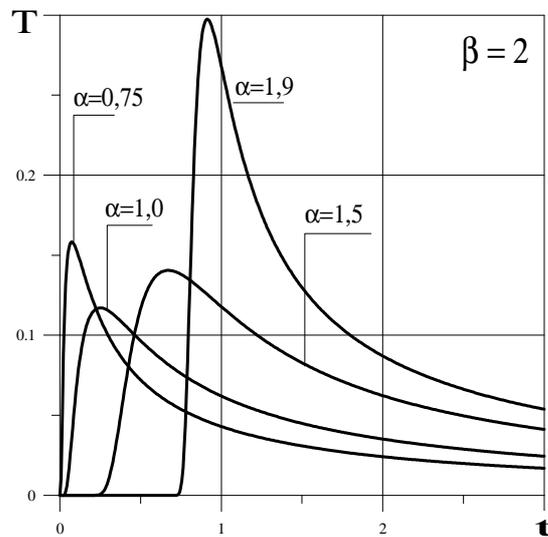


Рисунок 21 - Зависимость температуры от времени при различных значениях α

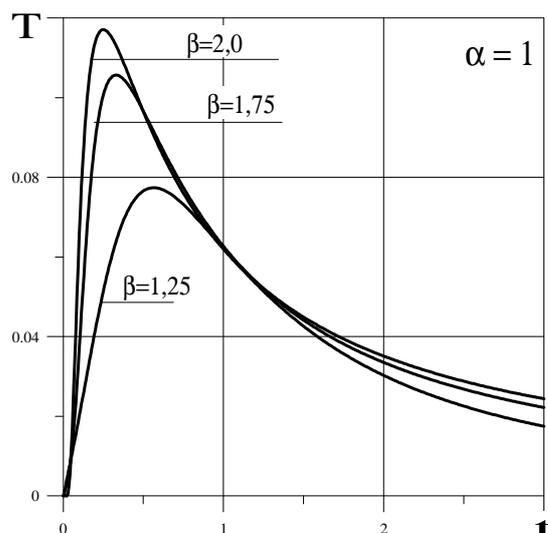


Рисунок 22 - Зависимость температуры от времени при различных значениях β

Достоверность полученных результатов подтверждается совпадением фундаментального решения (25) с известными частными решениями (27) и (29) (рис. 21 - 22).

4.4 Фрактальная теплопроводность в тонкой пластинке, нагреваемой по краю

Рассмотрим тонкую пластинку на границе которой задан температурный нагрев. Пластинка занимает область $D \in R^2$ с достаточно гладкой границей Γ . Предположим, что процесс теплопроводности описывается обобщенным законом Фика [65].

Математическую формулировку задачи запишем следующим образом

$$a^2 (-\Delta)^{\beta/2} T(x, t) + \frac{\partial^\alpha T(x, t)}{\partial t^\alpha} = 0, \quad t > 0, \quad x = (x_1, x_2) \in D, \quad (31)$$

$$T(\zeta_0, t) = f(\zeta_0, t), \quad \zeta_0 \in \Gamma, \quad 0 < \alpha \leq 2, \quad 1 < \beta < 2. \quad (32)$$

Предположим, что температура $T(x, t)$ и заданная функция $f(\zeta_0, t)$ гармонически изменяются во времени. Тогда граничная задача (31) – (32) будет иметь вид

$$a^2 (-\Delta)^{\beta/2} \bar{T} = (-i\omega)^\alpha \bar{T}, \quad (33)$$

$$\bar{T}(\zeta_0, \omega) = \bar{f}(\zeta_0, \omega), \quad (34)$$

где $T(x, t) = \text{Re}(e^{-i\omega t} \bar{T}(x, \omega))$, $f(\zeta_0, t) = \text{Re}(e^{-i\omega t} \bar{f}(\zeta_0, \omega))$.

Согласно п. 1.3, фундаментальное решение уравнения (33) будет иметь вид

$$G(r, \omega) = \frac{1}{2\pi a^2} \int_0^\infty \frac{\rho J_0(\rho r)}{\rho^\beta + \frac{(-i\omega)^\alpha}{a^2}} d\rho, \quad r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}. \quad (35)$$

На основании (35) построим интегральное представление температурной функции в виде свертки

$$\bar{T}(x, \omega) = \int_{\Gamma} p(\zeta) G(r_1, \omega) dg, \quad r_1 = \sqrt{(\zeta_1 - x_1)^2 + (\zeta_2 - x_2)^2}, \quad \zeta = (\zeta_1, \zeta_2), \quad (36)$$

где $p(\zeta)$ – функция, подлежащая определению на Γ , dg – элемент контура Γ .

Подставим представление (36) в граничное условие (34), будем иметь

$$\int_{\Gamma} p(\zeta) G(r_{10}, \omega) dg = \bar{f}(\zeta_0, \omega), \quad r_{10} = \sqrt{(\zeta_1 - \zeta_{01})^2 + (\zeta_2 - \zeta_{02})^2}.$$

После параметризации контура Γ : $\zeta = \zeta(t) = \zeta_1(t) + i\zeta_2(t)$, $\zeta_0 = \zeta_0(t_0)$, получаем следующее уравнение

$$\int_0^{2\pi} p(t) G(r_{10}, \omega) \sqrt{\zeta_1'^2(t) + \zeta_2'^2(t)} dt = \bar{f}(t_0, \omega). \quad (37)$$

Поскольку порядок особенности фундаментального решения уравнения (33) определяется оператором Лапласа, уравнение (37) является интегральным уравнением I рода со слабой особенностью (п. 1.2). Оно может быть решено методом последовательных приближений для любого значения параметра ω .

На рис. 23 - 25 представлены результаты расчетов функции $|\bar{T}|$ в круговой области радиуса $R = 1$ мм при $\bar{f}(t_0, \omega) = \sin t_0$, $\omega = 10 \text{ с}^{-1}$, $a = 1 \text{ м/с}^2$ для различных значений α и β .

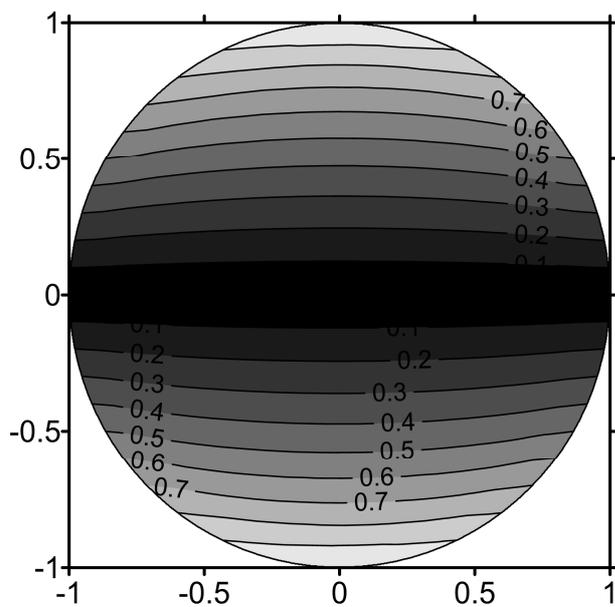


Рисунок 23 - Распределение амплитуды колебаний температуры в круговой области при $\alpha = 0.1$, $\beta = 1.9$

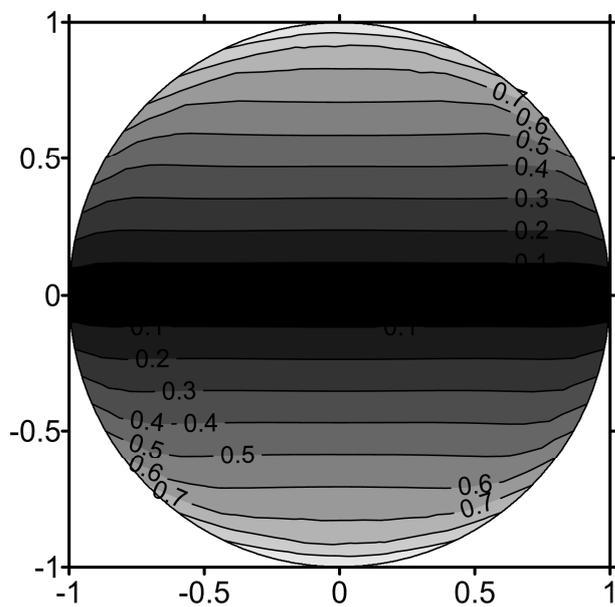


Рисунок 24 - Распределение амплитуды колебаний температуры в круговой области при $\alpha = 1$, $\beta = 1.5$

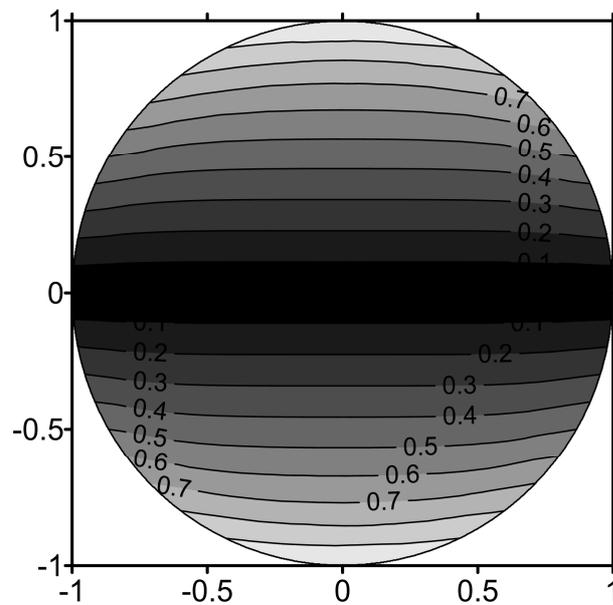


Рисунок 25 - Распределение амплитуды колебаний температуры в круговой области при $\alpha = 1$, $\beta = 1.9$

На рис. 25 представлен случай, наиболее близкий к классической теплопроводности. На рис. 23 - 24 приведены примеры аномальной теплопроводности – здесь процесс более медленный.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Потенциалы взаимодействия.

Пусть частицы взаимодействуют посредством парного потенциала $\Pi(r)$, где r - расстояние между частицами. Тогда сила взаимодействия между частицами вычисляется согласно формуле $f(r) \stackrel{\text{def}}{=} -\Pi'(r)$. Обозначим символом a - равновесное состояние между двумя частицами: $f(a) \equiv 0$, символом C - жесткость межатомной связи в положении равновесия, T_0 - период колебаний массы m под действием линейной силы с жесткостью C :

$$C \stackrel{\text{def}}{=} \Pi''(a) \equiv -f'(a), \quad T_0 \stackrel{\text{def}}{=} 2\pi\sqrt{m/C}.$$

Величины a и T_0 удобно использовать в качестве микроскопических масштабов расстояния и времени.

Минимальная скорость, которую надо сообщить частице массы m , находящейся в равновесии в потенциальном поле $\Pi(r)$, чтобы она могла уйти на бесконечность (скорость диссоциации), такова:

$$v_d = \sqrt{2D/m},$$

где $D \stackrel{\text{def}}{=} \Pi(a)$ - энергия связи.

Скорость распространения длинных волн в бесконечной цепочке определяется формулой

$$v_0 = \sqrt{a^2 C/m}.$$

В случае если упаковка частиц представляет собой идеальную двумерную треугольную кристаллическую решетку, то скорость v_l распространения длинных продольных волн

$$v_l = \sqrt{\frac{9}{8}}v_0 \approx 1.06v_0.$$

Рассмотрим несколько наиболее часто встречающихся в литературе потенциалов.

Потенциал Леннарда – Джонса.

Простейшим потенциалом, описывающим межатомное взаимодействие, является потенциал Леннарда – Джонса

$$P(r) = D \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right],$$

где D и a - введенные ранее энергия связи и равновесное межатомное расстояние.

Соответствующая сила взаимодействия $f(r) = -P'(r)$ имеет вид

$$f(r) = \frac{12D}{a} \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{13} - \left(\frac{a}{r} \right)^7 \right].$$

Жесткость связи C и энергия связи D для потенциала Леннарда – Джонса связаны соотношением

$$C = 72D/a^2,$$

а, следовательно, скорость распространения длинных волн и скорость диссоциации – простым соотношением $v_0 = 6v_d$. Потенциал Леннарда – Джонса является простейшим потенциалом, позволяющим учесть наиболее общие свойства межатомного взаимодействия – отталкивание при сближении частиц, притяжение при их удалении и практическое отсутствие взаимодействия на больших расстояниях. Потенциал Леннарда – Джонса двухпараметрический, поэтому он имеет очень ограниченные возможности для вариации макроскопических параметров моделируемого материала. Фактически он позволяет удовлетворить значению только одного макроскопического параметра – это, например, модуль упругости или предел прочности в статике, скорость распространения продольных волн или откольная скорость в динамике. Отношение между указанными параметрами остается неизменным. С другой стороны, данный потенциал весьма точно

описывает свойства ряда веществ (прежде всего, кристаллических инертных газов), а также силы взаимодействия Ван-дер-Ваальса, играющие важную роль в твердых телах. К несомненному достоинству потенциала Леннарда – Джонса относится также его вычислительная простота, не требующая вычисления иррациональных и трансцендентных функций. Потенциал Леннарда – Джонса широко применяется в качестве классического модельного потенциала, особенно в работах, в которых основной задачей является исследование общих физических закономерностей, а не получение точных количественных результатов.

Потенциал Морзе.

Потенциал взаимодействия Морзе имеет вид

$$П(r) = D \left[e^{-2\alpha(r-a)} - 2e^{-\alpha(r-a)} \right].$$

Жесткость связи C для потенциала Морзе вычисляется по формуле

$$C = 2\alpha^2 D.$$

Потенциал Морзе является трехпараметрическим, что позволяет удовлетворять значению двух независимых макроскопических параметров, таких как, например, модуль упругости и предел прочности в статике, скорость распространения продольных волн и откольная скорость в динамике. Дополнительный параметр α дает возможность варьировать ширину потенциальной ямы, что приводит к тому, что соответствующий материал становится более или менее хрупким. Простота и наглядность вычисления параметров потенциала делает его весьма удобным для использования. Данный потенциал широко применяется в литературе. Еще одним его достоинством по сравнению с потенциалом Леннарда – Джонса является более быстрое (экспоненциальное) затухание на расстоянии, что удобно, если желательно учитывать взаимодействие только ближайших частиц. Недостатком потенциала Морзе по сравнению с потенциалом Леннарда – Джонса является необходимость вычисления экспоненты и

квадратного корня (для $r = \sqrt{\underline{r} \cdot \bar{r}}$), что может приводить к замедлению расчетов.

При значении параметров $\alpha a = 6$ потенциал Морзе оказывается наиболее близок к потенциалу Леннарда – Джонса. Выражается это в том, что при $\alpha a = 6$ для этих потенциалов можно добиться равенства трех важнейших размерных параметров: равновесного расстояния a , жесткости связи C и энергии связи D .

Потенциал Ми.

Потенциал Ми выглядит так:

$$\Pi(r) = \frac{D}{n-m} \left[m \left(\frac{a}{r} \right)^n - n \left(\frac{a}{r} \right)^m \right].$$

Жесткость связи

$$C = mnD/a^2.$$

Потенциал Ми является четырехпараметрическим, что дает значительно большую, чем для потенциала Леннарда – Джонса, свободу в подборе параметров. Однако относительная сложность зависимости свойств потенциала от параметров m, n может затруднить его использование на практике.

ПЕРЕЧЕНЬ ССЫЛОК

1. Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. О механических характеристиках наноразмерных объектов // Физика твердого тела. 2002. Т. 44. № 12. С. 2158-2163.
2. Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. Аномалии механических характеристик наноразмерных объектов // Докл. АН. 2001. Т. 381. № 3. С. 825-827.
3. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н. Ф. Особенности расчета изгибной жесткости нанокристаллов // Докл. АН. 2002. Т. 385. № 4. С. 494-496.
4. Кривцов А.М. К теории сред с микроструктурой // Труды СПбГТУ. 1992. №443. С. 9-17.
5. Кривцов А. М. Растяжение системы из четырех взаимодействующих атомов // Труды СПбГТУ. 1994. № 448. С. 176-178.
6. Krivtsov A.M. Constitutive Equations of the Nonlinear Crystal Lattice // ZAMM · Z. angew. Math. Mech. 1999. V. 79. №S2. P. 419–420.
7. Кривцов А. М. Компьютерное исследование взаимосвязи между откольной прочностью и дисперсией скоростей мезочастиц. // Труды XXV – XXVI летних школ. Анализ и синтез нелинейных механических колебательных систем. С. – Пб. 1998. Т.2. С. 258-267.
8. Григолюк Э. И., Фильштинский Л. А. Перфорированные пластины и оболочки. – М.: Наука, 1970. – 556 с.
9. Григолюк Э. И., Фильштинский Л. А. Периодические кусочно-однородные структуры. – М.: Наука, 1992. – 288 с.
10. Григолюк Э. И., Фильштинский Л. А. Регулярные кусочно-однородные структуры с дефектами. – М.: Физматгиз, 1994. – 335 с.
11. K.T. Lau, D. Hui: Composites: Part B 33, 263 (2002)
12. B.I. Yakobson, P.H. Avour, in: Carbon nanotubes, Chapt. 9, ed. by M.S. Dresselhaus, P.H. Avouris, (Springer Verlag, Berlin-Heidelberg 2001) p. 287

13. E.T. Thostenson, Z. Ren, T.W. Chou: *Comp. Sci. Tech.* 61, 1899 (2001)
14. L. Vaccarini, C. Goze, L. Henrard, E. Hernandez, P. Bernier, A. Rubio: *Carbon* 38, 1681 (2000)
15. J.P. Salvetat, J.M. Bonard, N.H. Thomson, A.J. Kulik, L. Forro, W. Benoit, L. Zuppiroli: *Appl. Phys. A* 69, 255 (1999)
16. L.S. Schadler, S.C. Giannaris, P.M. Ajayan: *Appl. Phys. Lett.* 73, 3842 (1998)
17. D. Qian, E.C. Dickey, R. Andrews, T. Rantell: *Appl. Phys. Lett.* 76, 2868 (2000)
18. M.M.J. Treacy, T.W. Ebbesen, J.M. Gibson: *Nature* 381, 678 (1996)
19. E.W. Wong, P.E. Sheehan, C.M. Lieber: *Sci.* 277, 1971 (1997)
20. M.F. Yu, O. Lourie, M.J. Dyer, K. Moloni, T.F. Kelly, R.S. Ruoff: *Sci.* 287, 637 (2000)
21. A. Krishnan, E. Dujardin, T.W. Ebbesen, P.N. Yianilos, M.M.J. Treacy: *Phys. Rev. B* 58, 14 013 (1998)
22. M.F. Yu, B.S. Files, S. Arepalli, R.S. Ruoff: *Phys. Rev. Lett.* 84, 5552 (2000)
23. B.I. Yakobson, C.J. Brabec, J. Bernholc: *Phys. Rev. Lett.* 76, 2511 (1996)
24. B.I. Yakobson: *Appl. Phys. Lett.* 72, 918 (1998)
25. M.B. Nardelli, B.I. Yakobson, J. Bernholc: *Phys. Rev. B* 57, R4277 (1998)
26. K.N. Kudin, G.E. Scuseria, B.I. Yakobson: *Phys. Rev. B* 64, 235 406 (2001)
27. E. Hernandez, C. Goze, P. Bernier, A. Rubio: *Phys. Rev. Lett.* 80, 4502 (1998)
28. E. Hernandez, C. Goze, P. Bernier, A. Rubio: *Appl. Phys. A.* 68, 287 (1999)
29. G.V. Lier, C.V. Alsenoy, V.V. Doren, P. Geerlings: *Chem. Phys. Lett.* 326, 181 (2000)
30. J.P. Lu: *J. Phys. Chem. Solids.* 58, 1649 (1997)
31. J.P. Lu: *Phys. Rev. Lett.* 79, 1297 (1997)

32. G.M. Odegard, T.S. Gates, L.M. Nicholson, K.E. Wise: NASA Langley Res. Center, NASA-2002-TM211454
33. G.M. Odegard, V.M. Harik, K.E. Wise, T.S. Gates: NASA Langley Res. Center, NASA-2001-TM211044
34. R.S. Ruoff, D.C. Lorents: Carbon 33, 925 (1995)
35. S. Govindjee, J.L. Sackman: Solid State Commun. 110, 227 (1999)
36. Z.H. Tu, Z.C. Ou-Yang: Phys. Rev. B 65, 233 407 (2002)
37. M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, R. Saito: Carbon 33, 883 (1995)
38. C.F. Cornwell, L.T. Wille: Solid State Commun. 101, 555 (1997)
39. S.B. Sinnott, O.A. Shenderova, C.T. White, D.W. Brenner: Carbon 36,1 (1998)
40. T. Vodenitcharova, L.C. Zhang: Phys. Rev. B 68, 165 401 (2003)
41. W.D. Cornell, P. Cieplak, C.I. Bayly, I.R. Gould, K.M. Merz, D.M. Ferguson, D.C. Spellmeyer, T. Fox, J.W. Caldwell, P.A. Kollman: J. Am. Chem. Soc. 117, 5179 (1995)
42. V.N. Popov, V.E. Van Doren, M. Balkanski: Phys. Rev. B 61, 3078 (2000)
43. D. Srivastava, M. Menon, K. Cho: Phys. Rev. Lett. 83, 2973 (1999)
44. T. Natsuki, K. Tantzakarn, M. Endo. Effects of carbon nanotube structures on mechanical properties. Appl. Phys. A.79. 117-124 (2004)/
45. Gorenflo R., Mainardi F. Fractional diffusion processes: probability distributions and continuous time random walk. Processes with long range correlations. In: Rangarajian G., Ding M. (eds.) Lecture notes in physics, vol. 621, pp. 148-166, 2003.
46. Sokolov I., Klafter J., Blumen A. Fractional kinetics. Physics Today 55: 48-54, 2002.
47. Applebaum D. Levy processes – from probability to finance and quantum groups. Notices Amer. Math. Soc. 51(11): 1336-1347, 2004.
48. Uchaikin V.V. Evolution equations for Levy stable processes, International Journal of Theoretical Physics, vol. 38, no. 9, 1999, pp. 2377-2388.

49. Roop J.P. Computational aspects of FEM approximation of fractional advection dispersion equations on bounded domains in R^2 . J. Comput. Appl. Math. 193, pp. 243-268, 2006.
50. Shen S., Liu F. Error analysis of an explicit finite difference approximation for the space fractional diffusion with insulated ends. ANZIAM J. 46 (E), pp. 871-887, 2005.
51. Yang Q., Liu F., Turner I. Numerical methods for fractional partial differential equations with Riesz space fractional derivatives. Appl. Math. Model, 34, pp. 200-218, 2010.
52. Haubold H.J., Mathai A.M., Saxena R.K. Further solutions of fractional reaction-diffusion equations in terms of the H-functions. Journal of Computational and Applied Mathematics, 235, pp. 1311-1316, 2011.
53. Miller L. On the controllability of anomalous diffusions generated by the fractional Laplacian, Math. Control Signals Systems, 18: 260-271, 2006.
54. Справочник по специальным функциям, под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. — М.: Наука, 1979, 831 с.
55. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. Специальные функции. — М.: Наука, 1983. — 752 с.
56. Sami I. Muslih, Om P. Agrawal. Riesz Fractional Derivatives and Fractional Dimensional Space, Int J. Theor Phys, 49: 270-275, 2010.
57. Владимиров В.С. Уравнения математической физики. — М.: Наука, 1971. — 512 с.
58. Самко С.Г., Килбас А.А., Маричев О.И. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. — Минск: Наука и техника, 1987, 688 с.
59. Гельфанд И.М., Шиллов Г.Е. Обобщенные функции и действия над ними. — М.: Наука, 1958. — 440 с.
60. Li B., Wang J. Anomalous heat conduction and anomalous diffusion in one dimensional systems. // Phys. Rev. Lett. — 2003. — 91(4). — p. 044301.

61. Povstenko Y.Z. Theory of thermoelasticity based on the space-time-fractional heat conduction equation. // *Phys. Scr.* — 2009. – T 136. – p. 014017-014023.
62. Povstenko Y.Z. Fundamental solutions to central symmetric problems for fractional heat conduction equation and associated thermal stresses. // *Journal of thermal stresses.* — 2008. – vol. 31, issue 2. – p. 127-148.
63. Gorenflo R., Mainardi F. Fractional calculus: integral and differential equations of fractional order in A. Carpinteri, F. Mainardi (Editors): *Fractals and fractional calculus in continuum mechanics*, Springer Verlag, Wien and New York. — 1997. – p. 223-276.
64. Jaemin Ahn, Sungkwon Kang, Yong Hoon Kwon. A flexible inverse laplace transform algorithm and its application// *Computing-* 2003.- Volume 71, Issue 2. - pp. 115-131.
65. Paradisi P., Cesari R., Mainardi F., Tampieri F. The fractional Fick's law for non-local transport processes // *Physica A.* — 2001. – 293 (1-2). – p. 130.