

**В. Л. Леонтьев, И. С. Михайлов** (Ульяновск, УлГУ). **Математическое моделирование нанобъектов, основанное на теории анизотропных многослойных оболочек.**

Геометрия многих нанобъектов и число атомов в них позволяют проводить аналогии между ними и оболочками. Например, углеродные нанотрубки представляют собой полые цилиндры, стенки которых состоят из многих атомов углерода. Предлагается проведение математического моделирования нанобъектов на основе теории многослойных анизотропных оболочек и использование моделей в CALS-технологиях. Уравнения равновесия [1] анизотропной многослойной оболочки

$$\begin{aligned} \frac{\partial(BT_1)}{\partial\alpha} - \frac{\partial B}{\partial\alpha}T_2 + \frac{\partial(AS_{21})}{\partial\beta} + \frac{\partial A}{\partial\beta}S_{12} + ABk_1N_1 &= -ABX, \\ \frac{\partial(AT_2)}{\partial\beta} - \frac{\partial A}{\partial\beta}T_1 + \frac{\partial(BS_{12})}{\partial\alpha} + \frac{\partial B}{\partial\alpha}S_{21} + ABk_2N_2 &= -ABY, \\ -(k_1T_1 + k_2T_2) + \frac{1}{AB} \left( \frac{\partial(BN_1)}{\partial\alpha} + \frac{\partial(AN_2)}{\partial\beta} \right) &= -Z, \\ \frac{\partial(BM_1)}{\partial\alpha} + \frac{\partial(AM_{21})}{\partial\beta} + \frac{\partial A}{\partial\beta}M_{12} - \frac{\partial B}{\partial\alpha}M_2 &= ABN_1, \\ \frac{\partial(AM_2)}{\partial\beta} + \frac{\partial(BM_{12})}{\partial\alpha} + \frac{\partial B}{\partial\alpha}M_{21} - \frac{\partial A}{\partial\beta}M_1 &= ABN_2, \\ S_{12} - S_{21} + M_{12}/R_1 - M_{21}/R_2 & \end{aligned}$$

и соотношения упругости [1]

$$T_1 = C_{11}\varepsilon_1 + C_{12}\varepsilon_2 + K_{11}\xi_1 + K_{12}\xi_2, \quad T_2 = C_{12}\varepsilon_1 + C_{22}\varepsilon_2 + K_{12}\xi_1 + K_{22}\xi_2,$$

$$S = S_{12} = S_{21} = C_{66}\omega + K_{66}\tau, \quad M = M_{12} = M_{21} = K_{66}\omega + D_{66}\tau,$$

$$M_1 = D_{11}\xi_1 + D_{12}\xi_2 + K_{11}\varepsilon_1 + K_{12}\varepsilon_2, \quad M_2 = D_{12}\xi_1 + D_{22}\xi_2 + K_{12}\varepsilon_1 + K_{22}\varepsilon_2,$$

позволяют учесть наличие многих слоев в нанотрубке, их взаимодействие и то, что нанотрубка является анизотропным объектом, обладающим в каждой своей точке различными свойствами упругости в различных направлениях. Здесь  $T_i$ ,  $S_{ij}$ ,  $N_i$  — внутренние силы;  $M_i$ ,  $M_{ij}$  — изгибающие и крутящие моменты;  $\varepsilon_i$ ,  $\xi_i$ ,  $\omega$ ,  $\tau$  — деформации;  $C_{ij}$ ,  $K_{ij}$ ,  $D_{ij}$  — коэффициенты жесткости [1], учитывающие многослойность и свойства анизотропии оболочки;  $A$ ,  $B$  — коэффициенты Ляме криволинейной системы координат  $\alpha$ ,  $\beta$ ;  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$  — компоненты вектора внешней нагрузки;  $k_1$ ,  $k_2$  — главные кривизны, а  $R_1$ ,  $R_2$  — радиусы линий главных кривизн срединной поверхности оболочки. Использование теории анизотропных многослойных оболочек, учитывающей различие свойств нанотрубки по разным направлениям в каждой точке ее срединной поверхности, а также наличие слоев и их взаимодействие, создает дополнительные возможности повышения точности математических моделей нанотрубок. Модификация уравнений равновесия и соотношений упругости анизотропных оболочек связывается в этом случае с дополнительным учетом сил межатомного взаимодействия атомов соседних слоев многослойного нанобъекта, который проводится в интегральных выражениях, связывающих компоненты тензора напряжений с внутренними силами  $T_i$ ,  $S_{ij}$ ,  $N_i$  и изгибающими, крутящими моментами  $M_i$ ,  $M_{ij}$ .

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Амбарцумян С. А. Теория анизотропных оболочек. М.: Физматлит, 1961, 384 с.