



МЕХАНИКА

УДК 539.32

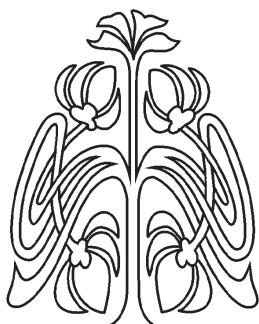
ВЛИЯНИЕ ТОПОЛОГИИ НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТОРОВ: ПРОГНОСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

О. Е. Глухова¹, А. С. Колесникова², М. М. Слепченков²,
Г. В. Савостьянов³

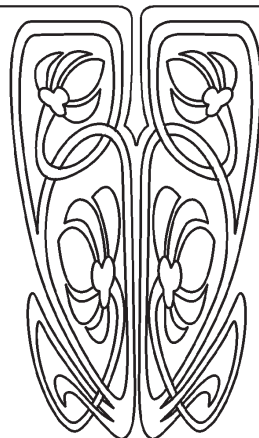
¹ Доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой радиотехники и электродинамики, Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, oeglukhova@yandex.ru

² Ведущий программист отдела математического моделирования, Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, kolesnikova.88@mail.ru; slepchenkovm@mail.ru

³ Аспирант кафедры радиотехники и электродинамики, Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, follow.a.white.rabbitt@gmail.com



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ



В работе представлены результаты теоретического исследования влияния топологических особенностей на механические свойства углеродных нанотроек. Численный анализ атомного строения и свойств исследуемых объектов проводился с использованием молекулярной динамики и квантового метода сильной связи. По результатам расчетов энтальпии реакции были сделаны выводы о стабильности исследуемых нанотроек. Впервые представлены расчеты модуля упругости углеродных нанотроек.

Ключевые слова: нанотроек, квантово-химический метод сильной связи, энтальпия реакции, прочностные свойства.

ВВЕДЕНИЕ

Многообразие структурных форм и широкий спектр физико-химических свойств обусловили развитие новой научной отрасли — электроники на углеродных наноструктурах. Среди семейства углеродных наноструктурированных материалов особое внимание привлекают тороидальные структуры, получившие название углеродных нанотроек [1]. Впервые теоретическая модель нового класса углеродных наноструктур с тороидальной формой была предложена в работе [2]. Геометрические характеристики и топология этих форм углерода определялись ненасыщенными связями углеродных нанотроек. Интерес к исследованию нанотроек обусловлен широкими перспективами их потенциального применения в различных нанотехнологических сферах. Одним из таких применений является использование углеродных нанотроек в качестве новых форм хранения водорода. Данная проблема является актуальной, поскольку водород является источником чистой энергии и будет играть важную роль для снижения мирового потребления углеводородов. В работе [3] представлены результаты теоретического исследования адсорбции молекул водорода на углеродном нанотроек C_{120} . Водород помещался внутрь нанотроек двумя различными способами: параллельно и перпендикулярно центральной оси нанотроек. В результате оптимизации было установлено, что все адсорбируемые молекулы водорода распределялись равномерным образом вдоль траектории, равноуда-



ленной для всех точек вблизи внутренней поверхности нанотростра. Результаты расчетов полной энергии и энергии связи для исследуемого нанотростра C_{120} показали, что углеродной наноструктуре выгодно накапливать водород, причем полная энергия системы уменьшается с ростом числа адсорбируемых молекул. Благодаря особенностям атомного строения углеродные нанотростры обладают рядом примечательных магнитных свойств. В частности, еще в 1997 году Хаддон теоретически прогнозировал, что нанотростр C_{576} имеет очень большую величину диамагнитной восприимчивости, которая может быть примерно в 130 раз выше, чем у бензольной молекулы [4]. Впоследствии значительный парамагнитный момент был обнаружен у металлических тороидальных углеродных нанотрострбок [5]. С помощью метода сильной связи было спрогнозировано существование в тороидальных углеродных нанотрострбках ферромагнитного момента при низких температурах [6]. Данный эффект был обусловлен наличием пентагонов и гептагонов в структуре нанотростра.

Другим важным магнитным явлением, обнаруженным в тороидальных углеродных нанотрострбках, является эффект Аронова – Бома [7]. Несмотря на целый ряд работ, посвященных исследованию стабильности углеродных нанотростров [8–10], оценка прочностных свойств структур данного класса ранее не проводилась. В то же время для успешного применения нанотростров при конструировании электронных нанострострств необходимо, чтобы используемый материал отвечал всем эксплуатационным требованиям. Целью данной работы является теоретическое изучение прочностных характеристик углеродных с помощью квантового метода сильной связи и метода классической молекулярной динамики.

2. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ ИЗУЧЕНИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРОСТРОВ

2.1. Квантово-химический метод сильной связи

В данном исследовании использовалась модификация метода сильной связи, разработанная в работе [11]. В рамках используемой модели полная энергия системы представляется суммой двух слагаемых:

$$E_{tot} = E_{bond} + E_{rep},$$

где E_{bond} — энергия заполненных электронных уровней, E_{rep} — энергия отталкивания, которая является результатом электронного взаимодействия между атомами углерода. Геометрические и энергетические параметры углеродного нанотростра определялись минимизацией его полной энергии по характерным линейным параметрам каркаса.

Энергия отталкивания, учитывающая межэлектронное и межъядерное взаимодействия, представляется в виде суммы парных потенциалов:

$$E_{rep} = \sum_{i < j} V_{rep}(|r_i - r_j|),$$

где i, j — номера взаимодействующих атомов, r_i, r_j — декартовы координаты, V_{rep} определяется выражением

$$V_{rep}(r) = p_5 \left(\frac{p_3}{r}\right)^{p_6} \exp\left(p_6 \left[-\left(\frac{r}{p_2}\right)^{p_4} + \left(\frac{p_3}{p_2}\right)^{p_4}\right]\right).$$

Энергия заполненных уровней определяется формулой

$$E_{bond} = 2 \sum_{n=0} \varepsilon_n,$$

где ε_n — энергия заполненного электронного состояния с номером n (собственное значение гамильтониана). Цифра «2» учитывает спин электрона. Межатомные матричные элементы гамильтониана вычисляются по следующей формуле:

$$V_{ij\alpha}(r) = V_0^{ij\alpha} \left(\frac{p_3}{r}\right)^{p_1} \exp\left(p_1 \left[-\left(\frac{r}{p_2}\right)^{p_4} + \left(\frac{p_3}{p_2}\right)^{p_4}\right]\right),$$

где r — расстояние между атомами, i, j — орбитальные моменты волновых функций; n — индекс, указывающий тип связи (σ или π). Параметры n ($n = 1, 2, 3, 4, 5$), равновесные интегралы перекрытия $V_{0sss}, V_{0sps}, V_{0pps}, V_{0ppp}$ и атомные термы $\varepsilon_s, \varepsilon_p$ вычислены и приведены в табл. 1 [12].



2.2. Метод молекулярной динамики

С помощью молекулярной динамики нами исследовалось динамическое сжатие углеродных нанотрубок. В рамках этого метода решаются уравнения движения Ньютона для системы взаимодействующих частиц:

$$m_i \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} = F_i(t),$$

где r_i — радиус-вектор i -го атома, m_i — его масса, F_i — суммарная сила, действующая на i -й атом со стороны остальных частиц:

$$F_i = -\frac{\partial U(r)}{\partial r_i},$$

где $U(r)$ — потенциальная энергия, зависящая от взаимного расположения всех атомов; n — число атомов.

Таблица 1

Значения параметров для метода сильной связи

p_1	p_2 , нм	p_3 , нм	p_4	p_5 , эВ	p_6
2.796	0.232	0.154	22	10.92	4.455
ϵ_s	ϵ_p	$V_{ss\sigma}^0$	$V_{sp\sigma}^0$, эВ	$V_{pp\sigma}^0$	$V_{pp\pi}^0$, эВ
-10.932	-5.991	-4.344	3.969	5.457	-1.938

Решение уравнений движения проводилось с помощью схемы предиктор-корректор третьего порядка [13]. Моделирование процесса сжатия осуществлялось с шагом 1 фс. Силы, действующие на атомы исследуемой системы, рассчитывались квантовым методом сильной связи.

3. ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ НАНОТОРОВ

В данной работе рассматриваются несколько моделей нанотрубок, отвечающих равновесной конфигурации. Геометрия топологических моделей описывается группой точечной симметрии D_{5d} .

Нанотор C_{120} . Наименьшим тором этой группы является C_{120} , базисный сегмент которого представлен на рис. 1, а. Координаты атомов каркаса нанотора генерировались действием операции симметрии C_5 на координаты атомов сегмента тора в результате четырех преобразований над атомами сегмента. Координаты атомов сегмента задаются в начальном приближении. Атомный каркас молекулы C_{120} показан на рис. 1, б. Из рис. 1, б видно, что внешний круг образуют десять пентагонов (светло-серая заливка), а внутренний — десять гептагонов (темно-серая заливка). Координаты атомов нанотора, соответствующие основному состоянию, определялись минимизацией полной энергии по координатам атомов в рамках метода сильной связи. На рис. 1, а цифрами указаны различные длины связей, нм: 1 — 0.138, 2 — 0.146, 3 — 0.146, 4 — 0.147, 5 — 0.146, 6 — 0.147, 7 — 0.146, 8 — 0.143, 9 — 0.146, 10 — 0.140, 12 — 0.146. Как видно, самая короткая длина связи — в гептагоне на внутреннем круге, где каркас испытывает наибольшую деформацию. Радиус внутреннего круга равен 0.203 нм. Наибольшие длины связей расположены в пентагонах внешнего круга, радиус которого равен 0.586 нм.

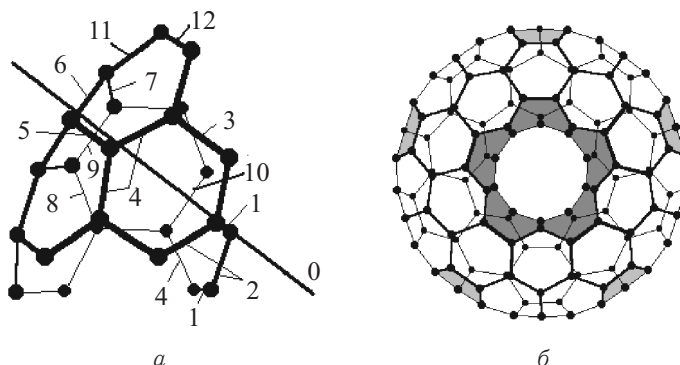


Рис. 1. Нанотор C_{120} : а — базисный сегмент каркаса; б — атомный каркас



Нанотор C_{340} . Следующим из класса наноторов симметрии D_{5d} является C_{340} . Его отличие заключается не только в увеличении радиусов внутреннего и внешнего кругов, но и в позиционировании гептагонов и пентагонов. Базисный сегмент нанотора C_{340} изображен на рис. 2, а, а сама атомная клетка в целом — на рис. 2, б. Различие каркасов наноторов C_{120} и C_{340} явно проявляется в способе формирования клетки внутреннего круга гептагонами: если у нанотора C_{120} гептагоны имеют смежное расположение, то у C_{340} они разделены одним гексагоном. Естественно, напряжение внутреннего круга каркаса в этом случае заметно снижается.

Техника генерирования координат каркаса остается прежней — преобразованием координат базисного сегмента (см. рис. 1, а). Рассмотрим подробнее атомное строение нанотора C_{340} . Длины связей базисного сегмента имеют определенную длину, нм: 1 — 0.138, 2 — 0.140, 3 — 0.140, 4 — 0.140, 5 — 0.140, 6 — 0.140, 7 — 0.141, 8 — 0.144, 9 — 0.141, 10 — 0.140, 11 — 0.144, 12 — 0.146, 13 — 0.143, 14 — 0.143, 15 — 0.142, 16 — 0.147, 17 — 0.145. Номера различных длин связей указаны цифрами на рис. 2, а. Как и у нанотора C_{120} , самая короткая длина связи тора C_{340} находится в гептагоне на внутреннем круге. Радиус внутреннего круга равен 0.609 нм. Наибольшие длины связей расположены в пентагонах внешнего круга, радиус которого равен 1.068 нм.

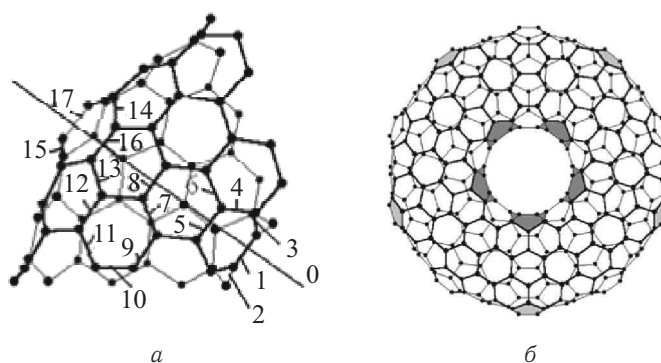


Рис. 2. Нанотор C_{340} : а — базисный сегмент каркаса; б — атомный каркас

Нанотор C_{460} . Особенность атомного каркаса углеродного нанотора C_{460} заключается в том, что радиус внутреннего круга 4.97 и внутренняя часть каркаса образована гептагонами, разделенными шестиугольниками (как и у нанотора C_{340}), а внешний круг значительно превышает по радиусу нанотор C_{340} : 1.488 нм. Такое увеличение тора по величине внешнего круга обеспечено значительным удалением друг от друга пентагонов. На рис. 3, а изображен базисный сегмент нанотора C_{460} , а на рис. 3, б — структура всего каркаса. За счет увеличения числа атомов базисного сегмента число различных длин связей также увеличивается. Приведем лишь некоторые из них: наименьшая длина связи 0.140 нм наблюдается у гексагонов, образующих поверхность тора, наибольшая — 0.155 нм — в пентагонах внешнего круга.

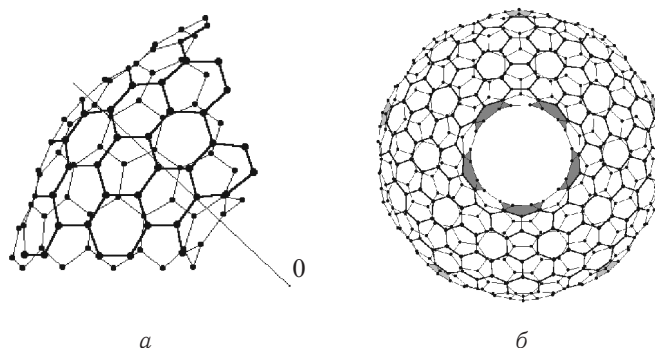


Рис. 3. Нанотор C_{460} : а — базисный сегмент каркаса; б — атомный каркас

Для количественной оценки стабильности образованных тороидальных структур нами была рассчитана энтальпия реакции их формирования. В табл. 2 представлены результаты расчетов.

Таблица 2

Некоторые энергетические характеристики наноторов

Кол-во атомов в структуре	120	340	460
Энтальпия, ккал-моль/атом	13.38	10.22	34.63

Из данных табл. 2 видно, что наиболее стабильной структурой будет нанотор C_{340} , у которого энтальпия и энергия на атом практически совпадают с аналогичными параметрами фуллерена C_{60} .

4. ПРОЧНОСТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТОРОВ

Прочностные характеристики углеродных наноторов изучались на примере поведения исследуемых объектов при деформации в режиме реального времени. Предметом нашего изучения являлся процесс осевого сжатия. Деформация исследуемых наноторов осуществлялась со скоростью 20 м/с вдоль оси Z (рис. 4). В качестве прикладываемой нагрузки в работе рассматривалось давление, оказываемое графеновой пластиной, приближающейся к нанотору со скоростью 20 м/с.

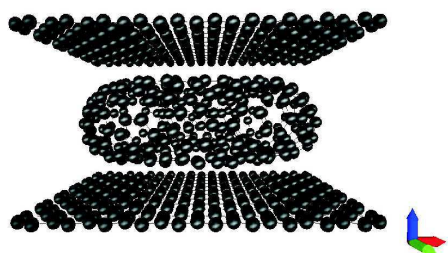


Рис. 4. Схема сжатия углеродного нанотора

В ходе исследования углеродные наноторы подвергались продольному сжатию на 1–5%. На каждом этапе сжатия фиксировалось значение прикладываемой к объекту сжимающей силы. На рис. 5 представлены результаты расчетов для случаев деформации нанотора C_{120} (рис. 5, а), C_{340} (рис. 5, б), C_{460} (рис. 5, в).

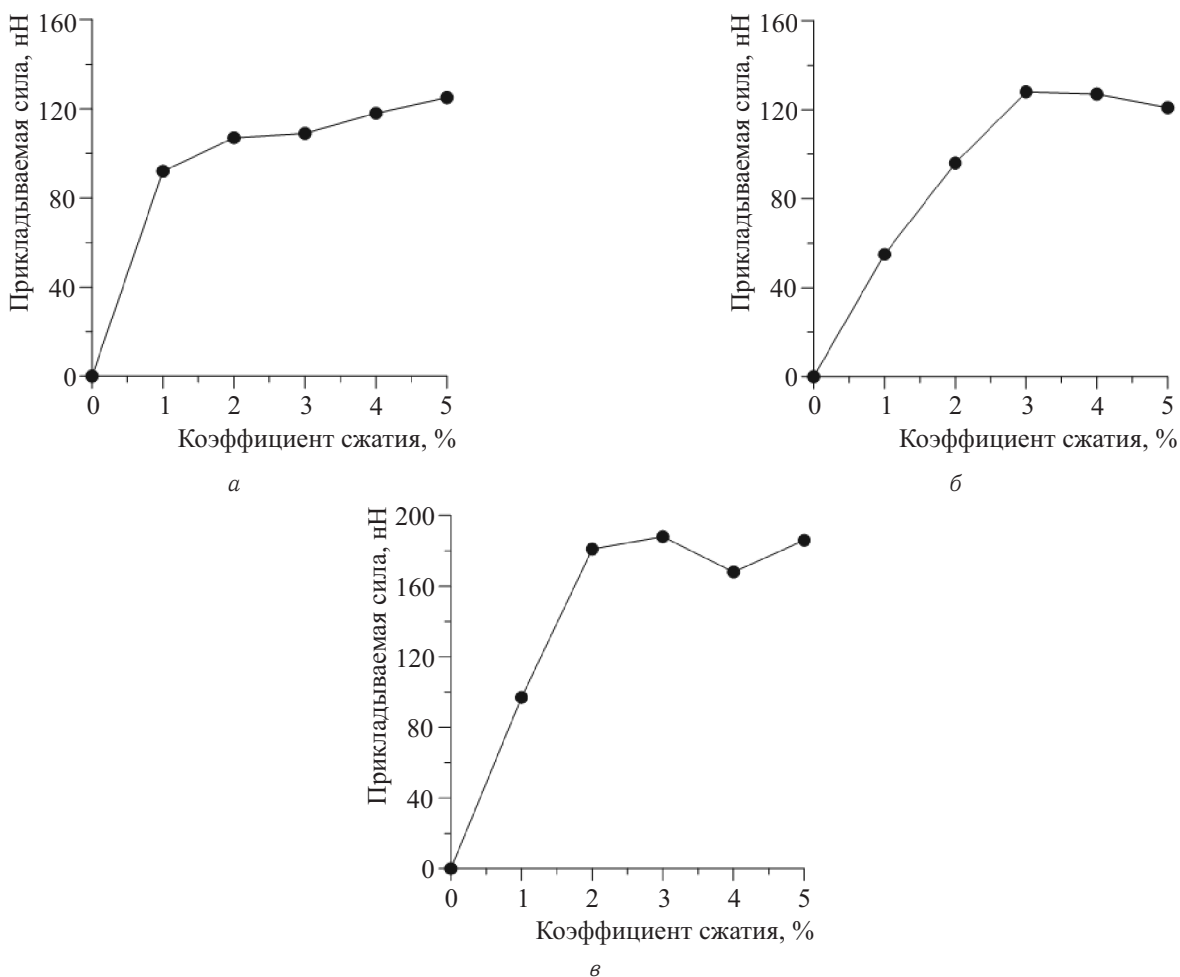


Рис. 5. Зависимость деформирующей силы от величины осевого сжатия нанотора C_{120} (а), C_{340} (б), C_{460} (в)



Из рис. 5, а видно, что по мере сжатия C_{120} деформирующая тор сила монотонно увеличивается, приближаясь к насыщению вблизи значения 120 нН. При деформации углеродных наноторов C_{340} (рис. 5, б) и C_{460} (рис. 5, в) наблюдается схожая картина. Для нанотора C_{340} деформирующая сила с ростом величины сжатия нанотора возрастает по линейному закону, а при сжатии структуры на 3% наблюдается небольшой спад величины, далее практически не меняющейся. Сила, деформирующая нанотор C_{460} , стремительно растет при сжатии объекта на 1–2%, а при последующей деформации (3–5%) меняется в незначительных пределах (160–180 нН).

Для количественной оценки прочностных свойств исследуемых наноторов был рассчитан модуль Юнга сжатия. Алгоритм вычисления псевдомодуля Юнга заключался в следующем.

1. На начальном этапе происходила оптимизация структуры путем минимизации полной энергии структуры по координатам квантовым методом сильной связи.

2. Далее оптимизированная структура сжималась на 1%. После этого концы структуры жестко фиксировались и структура снова оптимизировалась.

3. Модуль Юнга сжатия углеродного нанотора вычислялся по формуле

$$Y_p = \frac{F}{S} \frac{L}{\Delta L},$$

где S — поперечного сечения нанотора; сила, необходимая для сжатия тора, определяемая формулой

$$F = \frac{2 \Delta E}{\Delta L},$$

где ΔE — энергия упругого растяжения, ΔL — величина сокращения структуры. По описанному выше алгоритму был рассчитан модуль Юнга сжатия для всех исследуемых в данной работе наноторов. Результаты расчетов представлены в табл. 3.

Таблица 3

Рассчитанные значения модуля Юнга сжатия для наноторов

Структура нанотора	C_{120}	C_{340}	C_{460}
Модуль Юнга сжатия, ТПа	0.54	0.59	0.65

4. ВЫВОДЫ

В ходе теоретического изучения электронно-энергетических и прочностных характеристик углеродных наноторов нами были установлены следующие закономерности.

Наиболее стабильной структурой среди исследуемых объектов обладает нанотор C_{340} , подтверждением чему служат результаты расчетов энтальпии реакции образования структуры (10.22 ккал·моль/атом) и энергия на атом (–43.02 эВ). Полученные значения величин практически совпадают с аналогичными параметрами фуллерена C_{60} , являющегося одним из самых стабильных представителей семейства углеродных нанокластеров.

Показано, что процесс динамического сжатия наноторов сопровождается неизменным ростом деформирующей силы. Численная оценка модуля Юнга сжатия углеродных наноторов позволила установить, что наибольшим модулем упругости характеризуется углеродный нанотор C_{460} (0.65 ТПа). С увеличением геометрических размеров нанотора наблюдается рост модуля упругости. Полученные в работе результаты свидетельствуют о том, что углеродные тороидальные структуры, характеризующиеся стабильностью, высокими прочностными характеристиками, могут быть использованы в качестве материала элементной базы современной наноэлектроники. В частности, перспективным представляется их использование в качестве материала для создания холодных катодов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 14-01-31429, 14-01-31508, 12-02-00807), Минобрнауки России в рамках проектной части государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 3.1155.2014/К) и Президентской стипендии 2013–2016 гг. (проект № СП–2302.2013.1).



Библиографический список

1. Sano M., Kamino A., Okamura J., Shinkai S. Ring Closure of Carbon Nanotubes // *Science*. 2001. Vol. 293, № 5533. P. 1299–1301.
2. Avron J. E., Berger J. Tiling rules for toroidal molecules // *Phys. Rev. A*. 1995. Vol. 51, iss. 2. P. 1146–1159.
3. Cruz-Torres A., Castillo-Alvarado F. DE L., Ortiz-Lopez J., Arellano J. S. Arellano Hydrogen Storage Inside a Toroidal Carbon Nanostructure C120: Density Functional Theory Computer Simulation // *Intern. J. Quantum Chemistry*. 2010. Vol. 110. P. 2495–2508.
4. Haddon R. C. Electronic properties of carbon toroids // *Nature*. 1997. Vol. 388, № 6637. P. 31–32.
5. Liu L., Guo G. Y., Jayanthi C. S., Wu S. Y. Colossal Paramagnetic Moments in Metallic Carbon Nanotori // *Phys. Rev. Lett.* 2002. Vol. 88, iss. 21. P. 217206.
6. Rodriguez-Manzo J. A., Lopez-Urias F., Terrones M., Terrones H. Magnetism in Corrugated Carbon Nanotori : The Importance of Symmetry, Defects, and Negative Curvature // *Nano Lett.* 2004. Vol. 4, iss. 11. P. 2179–2183.
7. Lin M. F., Chuu D. S. Persistent currents in toroidal carbon nanotubes // *Phys. Rev. B*. 1998. Vol. 57, № 11. P. 6731–6737.
8. Liu C. P., Chen H. B., Ding J. W. Magnetic response of carbon nanotori : the importance of curvature and disorder // *J. Physics : Condensed Matter*. 2008. Vol. 20, № 1. P. 015206.
9. Liu C. P., Xu N. Magnetic response of chiral carbon nanotori : The dependence of torus radius // *Physica B : Condensed Matter*. 2008. Vol. 403, № 17. P. 2884–2887.
10. Wang X., Wang Z., Liu Yq., Wang C., Bai C., Zhu D. Ring formation and fracture of a carbon nanotube // *Chemical Physics Letters*. 2001. Vol. 339, № 1. P. 36–40.
11. Глухова О. Е., Терентьев О. А. Теоретическое изучение зависимостей модулей Юнга и кручения тонких однослойных углеродных нанотрубок zigzag и armchair от геометрических параметров // *Физика твердого тела*. 2006. Т. 48, вып. 7. С. 1329–1335.
12. Glukhova O. E. Dimerization of miniature C20 and C28 fullerenes in nanoautoclave // *J. Molecular Modeling*. 2011. Vol. 17, № 3. P. 573–576.
13. Wang Y., Tomanek D., Bertsh G. F. Stiffness of a solid composed of C60 clusters // *Phys. Rev. B*. 1991. Vol. 44, № 12. P. 6562–6665.

Influence Topology on Mechanical Properties of Carbon Nanotorov: Predictive Modeling

O. E. Glukhova, A. S. Kolesnikova, M. M. Slepchenkov, G. V. Savostianov

Saratov State University, 83, Astrakhanskaya str., Saratov, 410012, Russia, oeglukhova@yandex.ru, kolesnikova.88@mail.ru, slepchenkovm@mail.ru, follow.a.white.rabbitt@gmail.com

In this paper the results of theoretical studies of the effect of topological features of the mechanical properties of carbon nanotori are presented. Numerical analysis of the atomic structure and properties of the objects was carried out by the molecular dynamics and quantum tight-binding method. Conclusions about the stability of the investigated nanotori were made on the base of the results of calculations of the enthalpy of the reaction. The first calculations of the elastic modulus carbon nanotori are presented.

Key words: nanotori, tight-binding quantum chemical method, enthalpy of reaction, mechanical properties.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (projects no. 14-01-31429, 14-01-31508, 12-02-00807), Ministry of Education and Science of the Russian Federation in the framework of the project of the national tasks in the field of scientific activity (project no. 3.1155.2014/K) and the Presidential scholarship 2013–2016 (project no. СП–2302.2013.1).

References

1. Sano M., Kamino A., Okamura J., Shinkai S. Ring Closure of Carbon Nanotubes. *Science*, 2001, vol. 293, no. 5533, pp. 1299–1301.
2. Avron J. E., Berger J. Tiling rules for toroidal molecules. *Phys. Rev. A*, 1995, vol. 51, iss. 2, pp. 1146–1159.
3. Cruz-Torres A., Castillo-Alvarado F. DE L., Ortiz-Lopez J., Arellano J. S. Arellano Hydrogen Storage Inside a Toroidal Carbon Nanostructure C120 : Density Functional Theory Computer Simulation *Intern. J. Quantum Chemistry*, 2010, vol. 110, pp. 2495–2508.
4. Haddon R. C. Electronic properties of carbon toroids. *Nature*, 1997, vol. 388, no. 6637, pp. 31–32.
5. Liu L., Guo G. Y., Jayanthi C. S., Wu S. Y. Colossal Paramagnetic Moments in Metallic Carbon Nanotori. *Phys. Rev. Lett.*, 2002, vol. 88, iss. 21, pp. 217206.
6. Rodriguez-Manzo J. A., Lopez-Urias F., Terrones M., Terrones H. Magnetism in Corrugated Carbon Nanotori : The Importance of Symmetry, Defects, and Negative Curvature. *Nano Letters* 2004, vol. 4, iss. 11, pp. 2179–2183.
7. Lin M. F., Chuu D. S. Persistent currents in toroidal carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, 1998, vol. 57, no. 11, pp. 6731–6737.
8. Liu C. P., Chen H. B., Ding J. W. Magnetic response of carbon nanotori: the importance of curvature and disorder. *J. Physics : Condensed Matter*, 2008, vol. 20, no. 1, pp. 015206.



9. Liu C. P., Xu N. Magnetic response of chiral carbon nanotubes: The dependence of torus radius. *Physica B: Condensed Matter*, 2008, vol. 403, no. 17, pp. 2884–2887.
10. Wang X., Wang Z., Liu Yq., Wang C., Bai C., Zhu D. Ring formation and fracture of a carbon nanotube. *Chemical Physics Letters*, 2001, vol. 339, no. 1, pp. 36–40.
11. Glukhova O. E., Terentev O. A. Theoretical study of the dependence of Young's modulus and the torsion of thin single-wall carbon nanotubes zigzag and armchair on the geometrical parameters. *Solid State Phys.*, 2006, vol. 48, no. 7, pp. 1329–1335 (in Russian).
12. Glukhova O. E. Dimerization of miniature C₂₀ and C₂₈ fullerenes in nanoautoclave. *J. Molecular Modeling*, 2011, vol. 17, no. 3, pp. 573–576.
13. Wang Y., Tomanek D., Bertsh G. F. Stiffness of a solid composed of C₆₀ clusters. *Phys. Rev. B*, 1991, vol. 44, no. 12, pp. 6562–6565.

УДК 539.3

НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ ЭЛАСТОМЕРНЫХ КОНСТРУКЦИЙ ПРИ АБРАЗИВНО-УСТАЛОСТНОМ ИЗНОСЕ

С. Н. Гребенюк¹, А. А. Бова², В. З. Юречко²

¹Кандидат технических наук, доцент кафедры математического анализа, Запорожский национальный университет, Украина, gsm1212@ukr.net

²Аспирант кафедры математического анализа, Запорожский национальный университет, Украина, bova-anna@mail.ru; iurichko@i.ua

Предложена математическая модель процесса деформации эластомерных элементов конструкций с учетом абразивно-усталостного износа на основе метода конечных элементов. Ввиду специфических свойств материала построена матрица жесткости конечного элемента на основе моментной схемы конечного элемента для слабосжимаемых материалов. Для уточнения решений предусматривалось получение выражений для деформаций на базе дополнения исходного линейного аппроксимирующего полинома до полного кубического. Численная сходимость предложенной модели исследована на примере решения задачи Ляме для полого упругого цилиндра. Проведен расчет резиновой футеровки барабанно-шаровых рудоразмольных мельниц с учетом специфических свойств материала и условий деформирования.

Ключевые слова: эластомеры, резиновая футеровка, абразивно-усталостный износ, моментная схема конечного элемента.

ВВЕДЕНИЕ

Эластомеры получили широкое применение в качестве защитных футеровок в барабанно-шаровых рудоразмольных мельницах. Футеровка предназначена для предохранения внутренних поверхностей барабана мельницы от износа дробящей средой и размалываемым материалом. От морфометрических параметров футеровки зависит эффективность и производительность работы мельниц в целом.

Одним из важнейших вопросов является изучение деформирования резиновой футеровки с учетом абразивно-усталостного износа рабочих поверхностей.

Аналитические методы решения задач механики эластомеров [1–3] являются весьма громоздкими, поэтому их целесообразно применять лишь для конструкций относительно простой формы.

Применение численных методов позволяет получать решение задач для эластомерных элементов сложной геометрической формы. Универсальным численным методом является метод конечных элементов (МКЭ), который позволяет получать полную картину напряженно-деформированного состояния (НДС) рассматриваемой конструкции.

Исследованию методики применения МКЭ к расчету эластомерных конструкций посвящено большое количество работ. Так, в работах [4, 5] предлагается введение различных выражений упругой энергии деформации, которые учитывают слабую сжимаемость эластомера.

В работе [6] предложены вариационные формулировки, наиболее приемлемые для задач исследования слабосжимаемых эластомеров. Однако применение смешанных вариационных принципов связано с увеличением порядка разрешающей системы уравнений, с нарушением положительной определенности матрицы уравнений.

В работах [7, 8] для учета слабой сжимаемости эластомеров предложен способ сокращенного интегрирования, состоящий в том, что поля перемещений и величины, ответственные за слабую сжимаемость, аппроксимируются различными функциями.