

но удерживает зерна алмазов в процессе разрушения горной породы, что приводит к увеличению работоспособного периода алмазных зерен, а следовательно, и к увеличению ресурса коронки в целом.

Таким образом, облучение в реакторном пространстве остановленного промышленного уран-графитового реактора приводит к эффективному повышению проходки на коронку и механической скорости бурения скважин твердосплавным и алмазным породоразрушающим инструментом.

Литература

1. Рябчиков С.Я., Мамонтов А.П., Печугин А.В. //Изв. Вузов. Геология и разведка. 2000. № 5. С. 89-94.
2. Лившиц И.М., Каганов М.И., Танатаров Л.В. //Атомная энергия. 1959. Т.6. вып. 4. С. 391-402.
3. Мамонтов А.П., Рябчиков С.Я., Чахлов Б.В. //Изв. ТПУ. 2000. Т.303(3). С. 72-74.

УДК 001.891.573

МОДЕЛЬ ОБРАЗОВАНИЯ УГЛЕРОДНОЙ ИДЕАЛЬНОЙ НАНОТРУБКИ

К.О. Сабденов, Ю.В. Данейкин, Н.А. Шепотенко

Томский политехнический университет

Предложена модель образования углеродной нанотрубки из пластины, представляющей собой несколько атомарных слоев графита. Случайные тепловые колебания пластины приводят к ненулевой вероятности соединения ее краев, состоящих из атомов со свободными валентными связями. Показано, что с энергетической точки зрения предложенный механизм может быть реализован. Согласно этой модели, температура образования нанотрубки в третьей степени зависит от толщины ее стенки.

Новые фазовые состояния углерода, известные как фуллерены и нанотрубки, благодаря уникальным физико-химическим свойствам, являются перспективными материалами для высокого развития науки, техники и технологий. К настоящему времени найдены способы получения такого класса материалов в сочетании с металлами и другими веществами, придающими им свойства, полезные для нанoeлектроники, медицины и практически всех отраслей промышленности [1].

Несмотря на значительные успехи экспериментальной науки о фуллеренах и нанотрубках, построение теории образования данных материалов остается делом будущего. В литературе высказываются два мнения о возможных механизмах протекания такого процесса. Во-первых, считается, что нанотрубка (или фуллерен) растет последовательно из отдельных атомов углерода, во-вторых, – сворачиванием графитовой пластины (чешуек) толщиной в один или несколько атомарных слоев. Пока нет твердых аргументов в пользу того или иного механизмов. Большое число физических факторов, влияющих на процесс образования упомянутых фазовых состояний углерода, не позволяет быстро построить какие-либо ясные физические представления по данному вопросу. В первую очередь, сложность здесь определяется разнообразием известных способов и условий синтеза этих материалов. Известно, что нанотрубки и фуллерены получают распылением графита в электрической дуге, облучением лазером графитового образца, в результате электролиза солей некоторых металлов графитовыми электродами, крекинга ряда углеводородов [1]. Но несомненным фактором при образовании нанотрубок и фуллеренов является высокая температура среды, где происходит данный процесс. Поэтому при построении настоящей модели синтеза нанотрубки мы ориентировались на экспериментальный

факт влияния температуры как основного параметра. Также в модели предполагается, что:

- 1) сворачивание в трубку графитовой чешуйки нанометрового размера совершающей броуновское движение;
- 2) получающееся трубчатое образование служит зародышем, и дальнейший рост нанотрубки происходит на этом зародыше наращиванием ее длины.

Приведем обоснования этих предпосылок. Если принять концепцию роста нанотрубки простым последовательным слиянием атомов углерода, то объяснение возникновения пространственной (объемной) структуры, свойственной нанотрубкам (и фуллеренам), становится затруднительным. Также известно, что нанотрубки имеют сильно различающиеся геометрические параметры: толщина стенок порядка нескольких единиц ангстрем, диаметр колеблется от единиц до десятков нанометров, длина достигает микрометра и более. Ясно, что нанотрубка не может образоваться напрямую из очень длинной и узкой пластины, так как возникновение такой экзотичной пластины является чрезвычайно маловероятным событием. Учитывая же специфическую трубчатую форму исследуемого материала и плоскую форму исходных элементов (чешуек), логичнее считать, что чешуйки нанометровых размеров совершают тепловые, в том числе изгибные колебательные движения. При определенной энергии такого движения, определяемой температурой среды, в которой происходит образование нанотрубок, края прочно «склеиваются» за счет свободных ковалентных связей краевых атомов.

Чешуйку графита, служащую исходным материалом зародыша, можно представить тонкой пластиной ввиду сильного различия толщины и диаметра нанотрубки. Нет сомнений в том, что графитовые чешуйки толщиной в один или несколько атомарных слоев и нанометрового размера проявляют упругие свойства; источниками таких свойств являются межатомные силы. При этом упругие свойства чешуйки на изгиб по порядку величин равны аналогичным свойствам графита как макроскопического тела, но насколько оправданы данные допущения, предстоит еще выяснить.

Тонкая упругая графитовая пластина совершает сильно нелинейные колебания, имеющие тепловую природу. Решение задачи о сильно нелинейных колебаниях тел представляет собой чрезвычайно сложную задачу. По имеющимся литературным данным, нет даже общих уравнений, описывающих такого рода колебания (изгибы). В связи с этим к решению задачи об образовании нанотрубки здесь будет применяться приближенный интегральный подход: представление сплошного тела в виде совокупности дискретных точек, взаимодействие между которыми заведомо считается известным. Применительно к колебаниям пластины, представляющей собой сплошное тело, это означает, что форма пластины в любой момент времени известна. В действительности, форма пластины должна находиться решением нелинейных уравнений в частных производных для тензоров деформации с заданными начальными и граничными условиями, но, как было сказано, в литературе нам не удалось найти такого рода уравнения.

Математическая формулировка модели

Предположим, что пластина в каждый момент времени является дугой окружности радиуса R . Это предположение частично оправдывается тем, что в состоянии покоя и в конечном состоянии, в форме трубки, пластина является дугой окружности:

- а) бесконечного радиуса в состоянии покоя;
- б) конечного радиуса, равного ширине пластины, делённой на 2π .

Поэтому в грубом приближении можно считать форму пластины близкой к дуге окружности, как показано на рис. 1, переменного радиуса $R(t)$, где t – время. Математически это означает принятие во внимание только главной моды колебаний пластины.

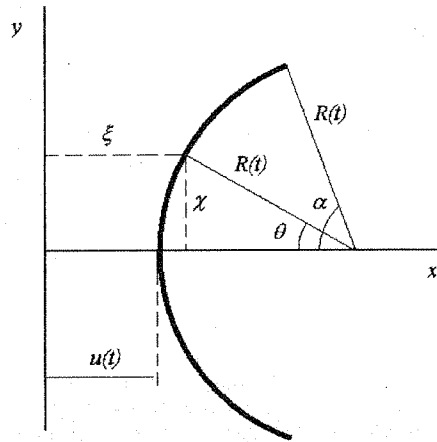


Рис. 1. Пластина в разрезе и схема ее свертывания в трубу

Колебания закрепленной пластины. Для пояснения сказанного и демонстрации удобства такого предположения рассмотрим задачу о колебании пластины бесконечной длины и ширины l с жестко закреплённой серединой. Согласно рис.1, положения точек пластины будем определять посредством переменных ξ – по координате x и χ – по координате y , тогда нетрудно видеть, что:

$$\xi = R(1 - \cos \theta), \quad \chi = R \sin \theta, \quad \theta = \theta(t).$$

Компоненты скорости бесконечно малого элемента (частицы) пластины на осях x и y соответственно равны

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{dR}{dt}(1 - \cos \theta) + R \sin \theta \frac{d\theta}{dt}; \quad \frac{d\chi}{dt} = \frac{dR}{dt} \sin \theta + R \cos \theta \frac{d\theta}{dt}.$$

Произведение $\theta R = \text{const}$ вдоль траектории частицы, так как равно длине дуги окружности, образованной радиусом R и углом θ , поэтому $\theta' R = -R'\theta$, откуда

$$\frac{d\theta}{dt} = -\frac{\theta}{R} \frac{dR}{dt}. \quad (1)$$

Здесь и далее из соображений удобства мы применяем явные записи формул, содержащих производные по времени, через дифференциалы или штрихи над символами. Кинетическая энергия элемента пластины пропорциональна сумме квадратов проекции скоростей по координатам x и y :

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\xi}{dt}\right)^2 + \left(\frac{d\chi}{dt}\right)^2 &= R^2(1 - \cos \theta)^2 + 2RR'\theta' \sin \theta(1 - \cos \theta) + R^2\theta'^2 \sin^2 \theta + \\ &+ R'^2 \sin^2 \theta + 2RR'\theta' \sin \theta \cos \theta + R^2\theta'^2 \cos^2 \theta = R'^2(1 - 2\cos \theta + \cos^2 \theta) + \\ &+ 2RR'\theta' \sin \theta + R^2\theta'^2 + R'^2 \sin^2 \theta = 2R'^2(1 - \cos \theta) + 2RR'\theta' \sin \theta + R^2\theta'^2. \end{aligned}$$

Собирая члены при одинаковых сомножителях и используя (1), далее имеем

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\xi}{dt}\right)^2 + \left(\frac{d\chi}{dt}\right)^2 &= 2(1 - \cos \theta)R'^2 - 2\sin \theta \cdot RR' \frac{\theta}{R} R' + R^2 \frac{\theta^2}{R^2} R'^2 = \\ &= 2(1 - \cos \theta)R'^2 - 2\theta \sin \theta R'^2 + \theta^2 R'^2 = \left[2(1 - \cos \theta) - 2\theta \sin \theta + \theta^2\right] R'^2 \end{aligned} \quad (2)$$

Из полученного выражения видно, что энергия частицы пластины зависит от её положения (угла θ). Кинетическая энергия dT бесконечно малого элемента пластины дается выражением

$$dT = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{d\xi}{dt} \right)^2 + \left(\frac{d\chi}{dt} \right)^2 \right] dm,$$

где $dm = \rho_s L ds$, ds – элемент дуги окружности; ρ_s , L – поверхностная плотность материала и длина пластины.

Используя формулу (2), в выражении для dT далее имеем

$$\begin{aligned} dT &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{d\xi}{dt} \right)^2 + \left(\frac{d\chi}{dt} \right)^2 \right] \rho_s L R d\theta = \frac{1}{2} \rho_s L R R'^2 [2(1 - \cos\theta) - 2\theta \sin\theta + \theta^2] d\theta = \\ &= \frac{1}{2} \rho_s L R R'^2 \cdot f(\theta) d\theta, \quad f(\theta) = 2(1 - \cos\theta) - 2\theta \sin\theta + \theta^2. \end{aligned} \quad (3)$$

Чтобы найти полную кинетическую энергию пластины T , необходимо проинтегрировать (3) по θ от 0 до $\alpha(t)$ и умножить результат на 2 для учёта нижней половины пластины:

$$T = \rho_s L R R'^2 \int_0^\alpha f(\theta) d\theta. \quad (4)$$

Вычислим значение интеграла в последнем выражении:

$$\begin{aligned} \int_0^\alpha f(\theta) d\theta &= \int_0^\alpha [2(1 - \cos\theta) - 2\theta \sin\theta + \theta^2] \cdot d\theta = 2(\alpha - \sin\alpha) + 2(\alpha \cos\alpha - \sin\alpha) + \frac{1}{3} \alpha^3 = \\ &= 2 \left[\alpha(1 + \cos\alpha) - 2\sin\alpha + \frac{1}{6} \alpha^3 \right]. \end{aligned}$$

Согласно рис. 1, справедливы равенства

$$R = \frac{l}{2\alpha}; \quad R' = -\frac{l}{2\alpha^2} \frac{d\alpha}{dt},$$

которые подставим в (4) с вычисленным интегралом:

$$\begin{aligned} T &= \rho_s L \frac{l}{2\alpha} \frac{l^2}{4\alpha^4} \left(\frac{d\alpha}{dt} \right)^2 \cdot 2 \left[\alpha(1 + \cos\alpha) - 2\sin\alpha + \frac{\alpha^3}{6} \right] = \\ &= \frac{1}{4} \rho_s S_n l^2 \left(\frac{d\alpha}{dt} \right)^2 \cdot F_1(\alpha), \quad S_n = Ll, \quad F_1(\alpha) = \left[\alpha(1 + \cos\alpha) - 2\sin\alpha + \frac{\alpha^3}{6} \right], \end{aligned}$$

где введено обозначение S_n для площади пластины.

Посмотрим, насколько существен вклад в кинетическую энергию множителя $F_1(\alpha)$, зависящего в явном виде только от угла α . При малых углах α имеем разложения:

$$\begin{aligned} \cos\alpha &\approx 1 - \frac{\alpha^2}{2} + \frac{\alpha^4}{4!} - \frac{\alpha^6}{6!}; \quad \sin\alpha \approx \alpha - \frac{\alpha^3}{3!} + \frac{\alpha^5}{5!} - \frac{\alpha^7}{7!}; \\ \alpha(1 + \cos\alpha) - 2\sin\alpha + \frac{\alpha^3}{6} &\approx \alpha \left(2 - \frac{\alpha^2}{2} + \frac{\alpha^4}{4!} + \frac{\alpha^6}{6!} \right) - 2 \left(\alpha - \frac{\alpha^3}{3!} + \frac{\alpha^5}{5!} + \frac{\alpha^7}{7!} \right) + \frac{\alpha^3}{6} = \\ &= \frac{\alpha^5}{4!} - \frac{\alpha^7}{6!} - \frac{2\alpha^5}{5!} + \frac{2\alpha^7}{7!} = \frac{3}{5!} \alpha^5 - \frac{5}{7!} \alpha^7. \end{aligned}$$

Тогда для указанных α

$$F_1(\alpha) = \frac{1}{\alpha^5} \left[\alpha(1 + \cos \alpha) - 2 \sin \alpha + \frac{\alpha^3}{6} \right] \approx \frac{3}{5!} - \frac{5}{7!} \alpha^2 \approx \frac{1}{40}.$$

Максимально допустимое значение α равно π , поэтому вычислим значение $F_1(\alpha)$ при этом угле:

$$\alpha = \pi : F(\alpha) \approx \frac{1}{6\alpha^2} = \frac{1}{6\pi^2} \approx \frac{1}{60}.$$

Сравнивая оба полученных значения при $\alpha \ll 1$ и $\alpha = \pi$, видим, что $F_1(\alpha)$ меняется в полтора раза.

Энергия упругой деформации сильно изогнутой не растягивающейся пластины вычисляется по формуле [2]

$$U = \frac{Eh^3}{24(1-\sigma^2)} \int_0^l \int_0^{L_z} \left[\frac{d^2 y / dx^2}{(1 + (dy/dx)^2)^{3/2}} \right]^2 dl_x dl_z,$$

где E – модуль Юнга; h – толщина пластины; σ – коэффициент Пуассона; l_x, l_z – элементы длины пластины по направлениям x, z .

Подынтегральное выражение не зависит от z . Тогда, проинтегрировав по z , получим:

$$U = \frac{Eh^3 L}{24(1-\sigma^2)} \int_0^l \left[\frac{d^2 y / dx^2}{(1 + (dy/dx)^2)^{3/2}} \right]^2 dl_x.$$

Выражение в квадратной скобке под интегралом есть кривизна $1/R$. Поэтому

$$U = \frac{Eh^3 L}{24(1-\sigma^2)} \frac{l}{R^2} = \frac{Eh^3 S}{24(1-\sigma^2)} \frac{1}{R^2}. \quad (5)$$

Половина длины пластины равна $l/2 = R\alpha$. Учитывая это равенство, имеем

$$\frac{1}{R^2} = \frac{4\alpha^2}{l^2},$$

используя которое далее, получаем:

$$U = \frac{Eh^3 L}{24(1-\sigma^2)} \frac{4\alpha^2}{l^2} = \frac{Eh^3 S}{6(1-\sigma^2)l^2} \alpha^2(t).$$

Тогда функция Лагранжа $Z = T - U$ колебания пластины в рассматриваемом здесь приближении будет иметь вид:

$$Z = \frac{1}{4} \rho_s S_n l^2 F(a) \left(\frac{d\alpha}{dt} \right)^2 - \frac{Eh^3 S_n}{6(1-\sigma^2)l^2} \alpha^2(t).$$

При известном виде функции Лагранжа уравнение движения для механической системы легко находится из соотношения Эйлера–Лагранжа:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial Z}{\partial \alpha'} - \frac{\partial Z}{\partial \alpha} = 0.$$

Колебание незакрепленной пластины. Предыдущее рассмотрение колебания закреплённой по центру пластины являлось вспомогательной процедурой. Колебательные движения незакреплённой пластины являются более сложным случаем движения из-за появления ещё одной степени свободы: точка закрепления теперь сама участвует в движении. Оставляя прежнюю систему координат, введём для

смещения точки «крепления» обозначение $u = u(t)$. Тогда произвольный малый элемент пластины будет иметь координаты:

$$\xi = u + R(1 - \cos \theta); \quad \chi = R \cdot \sin \theta.$$

Теперь выражение скорости смещения по X определяется по формуле

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{du}{dt} + \frac{dR}{dt}(1 - \cos \theta) + R \sin \theta \frac{d\theta}{dt},$$

а квадрат этой скорости равен

$$\left(\frac{d\xi}{dt}\right)^2 = \left(\frac{du}{dt}\right)^2 + 2\frac{du}{dt}\left[\frac{dR}{dt}(1 - \cos \theta) + R \sin \theta \frac{d\theta}{dt}\right] + \left[\frac{dR}{dt}(1 - \cos \theta) + R \sin \theta \frac{d\theta}{dt}\right]^2.$$

Вид скорости смещения по Y остается прежним, поэтому

$$\left(\frac{d\xi}{dt}\right)^2 + \left(\frac{d\chi}{dt}\right)^2 = \left(\frac{du}{dt}\right)^2 + 2\frac{du}{dt}\left[\frac{dR}{dt}(1 - \cos \theta) + R \sin \theta \frac{d\theta}{dt}\right] + \left[2(1 - \cos \theta) - 2\theta \sin \theta + \theta^2\right]R'^2. \quad (6)$$

Из последнего выражения видно, что теперь кинетическая энергия пластины состоит из двух частей: кинетической энергии закреплённой пластины T , которая была найдена ранее, и кинетической энергии точки «крепления» T_1 . Поэтому для простоты изложения нам достаточно сейчас рассматривать в сумме квадратов скоростей (6) часть, дающую вклад в T_1 :

$$\left(\frac{du}{dt}\right)^2 + 2\frac{du}{dt}\left[\frac{dR}{dt}(1 - \cos \theta) + R \sin \theta \frac{d\theta}{dt}\right],$$

которой с использованием (1) придадим форму

$$\frac{1}{2}(u')^2 + R'u'[1 - \cos \theta - \theta \sin \theta].$$

Аналогичные приведенным выше расчеты дают равенство

$$T_1 = \frac{1}{2}(u')^2 \rho_s S_n + \rho_s R R' u' L \int_0^\alpha 2(1 - \cos \theta - \theta \sin \theta) d\theta,$$

где учтен вклад от нижней половины пластины. После вычисления интеграла

$$\int_0^\alpha (1 - \cos \theta - \theta \sin \theta) d\theta = \alpha - 2 \sin \alpha + \alpha \cos \alpha,$$

получим

$$T_1 = \frac{1}{2}(u')^2 \rho_s S_n + 2\rho_s L R R' u' (\alpha - 2 \sin \alpha + \alpha \cos \alpha),$$

а после использования уже известной формулы $R\alpha = l/2 -$

$$T_1 = \frac{1}{2}(u')^2 \rho_s S_n + \rho_s S_n R' u' \frac{\alpha - 2 \sin \alpha + \alpha \cos \alpha}{\alpha}.$$

Заменив здесь R' , согласно равенству,

$$R' = -\frac{l}{2\alpha^2} \alpha',$$

окончательно имеем

$$T_1 = \frac{1}{2}(u')^2 \rho_s S_n - \frac{1}{2} \rho_s S_n l u' \alpha' \cdot F_2(\alpha),$$

$$F_2(\alpha) = \frac{1}{\alpha^3} (\alpha - 2 \sin \alpha + \alpha \cos \alpha).$$

Выражение (5) для энергии упругой деформации пластины остаётся неизменным. Теперь функция Лагранжа $Z = T_1 + T - U$ свободно колеблющейся пластины имеет вид

$$Z = \frac{1}{2}(u')^2 \rho_s S_n - \frac{1}{2} \rho_s S_n l u' \alpha' F_2(\alpha) + \frac{1}{4} \rho_s S_n l^2 F_1(\alpha) \alpha'^2 - \frac{Eh^3 S}{6(1-\sigma^2)l^2} \alpha^2.$$

Вычислим необходимые в дальнейшем производные

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z}{\partial \alpha'} &= -\frac{1}{2} \rho_s S_n l u' F_2(\alpha) + \frac{1}{2} \rho_s S_n l^2 F_1(\alpha) \alpha', \\ \frac{\partial Z}{\partial u'} &= \rho_s S_n u' - \frac{1}{2} \rho_s S_n l \alpha' F_2(\alpha), \\ \frac{\partial Z}{\partial \alpha} &= -\frac{1}{2} \rho_s S_n l u' \alpha' \frac{dF_2}{d\alpha} + \frac{1}{4} \rho_s S_n l^2 \alpha'^2 \frac{dF_1}{d\alpha} - \frac{Eh^3 S_n}{3(1-\sigma^2) \cdot l^2} \alpha, \\ \frac{\partial Z}{\partial u} &= 0, \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial Z}{\partial \alpha'} &= -\frac{1}{2} \rho_s S_n l \left(u'' F_2 + \frac{dF_2}{d\alpha} \alpha' u' \right) + \frac{1}{2} \rho_s S_n l^2 \left(\alpha'' F_1 + \frac{dF_1}{d\alpha} \alpha'^2 \right), \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial Z}{\partial u'} &= \rho_s S_n u'' - \frac{1}{2} \rho_s S_n l \left(\alpha'' F_2 + \frac{dF_2}{d\alpha} \alpha'^2 \right). \end{aligned}$$

Представляет интерес сравнение малых (линейных) колебаний пластины в двух рассматриваемых случаях: закреплённой и незакреплённой. Для свободной пластины при $\alpha \ll 1$ имеем

$$\begin{aligned} F_1 &\approx \frac{1}{40}; & F_2 &\approx -\frac{1}{6}; \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial Z}{\partial \alpha'} - \frac{\partial Z}{\partial \alpha} &\approx \frac{1}{2} \rho_s S_n l \cdot \frac{1}{6} u'' + \frac{1}{2} \rho_s S_n l^2 \cdot \frac{1}{40} \alpha'' + \frac{Eh^3 S_n}{3(1-\sigma^2) \cdot l^2} \alpha = 0, \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial Z}{\partial u'} - \frac{\partial Z}{\partial u} &\approx \rho_s S_n l \cdot \frac{1}{6} \alpha'' + \rho_s S_n l u'' = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Из последнего соотношения получаем уравнение $u'' = -\frac{l}{12} \alpha''$, которое подставим в (6):

$$-\frac{1}{12^2} \rho_s S_n l^2 \alpha'' + \frac{1}{80} \rho_s S_n l^2 \alpha'' + \frac{Eh^3 S_n}{3(1-\sigma^2)l^2} \alpha = 0$$

или

$$\frac{1}{4 \cdot 45} \rho_s l^2 \alpha'' + \frac{Eh^3}{3(1-\sigma^2)l^2} \alpha = 0.$$

После элементарных преобразований получим уравнение $\alpha'' + \frac{60Eh^3}{(1-\sigma^2)\rho_s l^4} \alpha = 0$,

которое перепишем в стандартной форме

$$\alpha'' + \omega_2^2 \alpha = 0, \quad \omega_2^2 = \frac{60Eh^3}{(1-\sigma^2)\rho_s l^4}.$$

Для жёстко закреплённого центра ($u = 0$) получается такое же уравнение, но с другой собственной частотой ω_1

$$\alpha'' + \omega_1^2 \alpha = 0, \quad \omega_1^2 = \frac{80Eh^3}{3(1-\sigma^2)\rho_s l^4}.$$

Тогда

$$\frac{\omega_2}{\omega_1} = \sqrt{\frac{3 \cdot 6}{8}} = \frac{3}{2}.$$

Найдём теперь уравнение движения свободной пластины для произвольных значений угла α . Интегрируем уравнение

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial Z}{\partial u'} = 0:$$

$$u' = \frac{l}{2} F_2 \alpha' + u_1.$$

Так как

$$\frac{d}{da} \frac{d - \sin a}{a^2} = -F_2,$$

то последнее уравнение можно записать в виде

$$u' = -\frac{l}{2} \frac{d}{dt} \frac{\alpha - \sin \alpha}{\alpha^2} + u_1 \quad \text{или} \quad u = -\frac{l}{2} \frac{\alpha - \sin \alpha}{\alpha^2} + u_1 t + u_0,$$

где u_1 и u_0 – постоянные интегрирования.

Получим теперь уравнение для угла α изгиба пластины. Возьмем u' в форме

$$u' = \frac{l}{2} F_2(a) \alpha',$$

где константа u_1 положена равной нулю. Это значение u' и

$$u'' = \frac{l}{2} \frac{d}{dt} (F_2 \alpha')$$

подставим в уравнение движения

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial Z}{\partial \alpha'} - \frac{\partial Z}{\partial \alpha} = 0$$

для угла α :

$$-\frac{1}{2} \rho_s S_n l \frac{d}{dt} \left(\frac{l}{2} F_2^2 \alpha' \right) + \frac{1}{2} \rho_s S_n l^2 \frac{d}{dt} (F_1 \alpha') + \frac{1}{2} \rho_s S_n l \left(\frac{d}{dt} F_2 \right) \frac{l}{2} F_2 \alpha' -$$

$$-\frac{1}{4} \rho_s S_n l^2 \alpha'^2 \frac{\partial F_1}{\partial \alpha} + \frac{Eh^3 S_n}{3(1-\sigma^2)l^2} \alpha = 0$$

или после сокращения на комплекс $\rho_s S_n l^2$:

$$-\frac{1}{4} \frac{d}{dt} (F_2^2 \alpha') + \frac{1}{2} \frac{d}{dt} (F_1 \alpha') + \frac{1}{4} F_2 \alpha' \frac{dF_2}{dt} - \frac{1}{4} \frac{dF_1}{d\alpha} \alpha'^2 + \frac{4Eh^3 S_n}{3(1-\sigma^2)l^4} \alpha = 0.$$

Раскроем скобки и объединим члены при α'' , α'^2 :

$$\left(2F_1 - F_2^2 \right) \alpha'' + \frac{d}{d\alpha} \left(F_1 - \frac{1}{2} F_2^2 \right) \alpha'^2 + \frac{4Eh^3}{3\rho_s (1-\sigma^2)l^4} \alpha = 0. \quad (7)$$

Это и есть искомое уравнение.

Температура образования нанотрубок

Следующим нашим шагом является оценка температуры, при которой происходит образование трубчатого зародыша, из которого вырастает нанотрубка. По физическому содержанию настоящей модели это происходит не при строго определен-

ной температуре, как в фазовых переходах. Возникновение зародыша, согласно настоящей модели, походит больше на химическое превращение: случайно колеблющаяся пластина должна преодолеть энергетический барьер, обусловленный силами упругости. Силы, действующие между атомами углерода, расположенными на краях чешуйки, относительно велики, но имеют малый радиус действия $\sim 1\text{\AA}$. Иными словами, потенциальная яма межатомных сил существенно уже и глубже, по сравнению с потенциалом упругой силы U . Поэтому образование трубчатого зародыша приближенно можно определить условием: минимальная энергия теплового колебания пластины-чешуйки такова, что $\alpha = \pi$.

Силы трения в настоящей модели не учитываются. Система, описываемая уравнением (7), является гамильтоновой с интегралом энергии E_H , являющейся полной энергией системы

$$\frac{\rho_s l^2 S_n}{4} \left(F_1 - \frac{1}{2} F_2^2 \right) \alpha'^2 + \frac{Eh^3 S_n}{6(1-\sigma^2)l^2} \alpha^2 = E_H = \text{const}. \quad (8)$$

Приведенный первый интеграл непосредственно можно получить из приведенных выше физических соображений, заменив в функции Лагранжа $U \rightarrow -U$, $Z \rightarrow E_H$ (по существу такая замена не что иное, как переход к функции Гамильтона), или же однократным интегрированием уравнения (7).

Минимальному значению энергии $E_H \sim k_B T_*$ с температурой T_* и постоянной Больцмана k_B отвечает $\alpha' = 0$, $\alpha = \pi$. Тогда из (8) получаем оценку

$$T_* \sim \frac{Eh^3 L}{lk_B} \sim \frac{Eh^3}{k_B}.$$

Для графита $E = 5 \text{ ГПа} \sim 10^9 \text{ Па}$. Полагая $h \sim 10^{-10} \text{ м}$, $k_B \sim 10^{-23} \text{ Дж/К}$, получаем $T_* \sim 10^2 \text{ К}$, что находится в согласии с экспериментальными данными, приведенными в [1]. Обращает на себя внимание сильная зависимость температуры T_* от толщины стенки нанотрубки, что делает маловероятным образование толстостенных нанотрубок при умеренных температурах, реализующихся в экспериментальных установках.

Литература

1. Елецкий А.В. Углеродные нанотрубки // УФН. 1997. Т.167. №9. С. 945-972.
2. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Теоретическая физика. Теория упругости. Т. 7. – М.: Наука, 1987.

MODEL OF FORMATION CARBON IDEAL NANOTUBE

K.O. Sabdenov, Yu. V. Daneikin, N.A. Shepotenko

Tomsk Polytechnics University

The model of formation carbon nanotube from a plate representing a little bit of atomic layers of graphite is offered. Casual thermal fluctuations of a plate result in nonzero probability of communication of its edges, consisting of atoms with free valent communications. It is shown, that from the power point of view the offered mechanism can be realized. According to model the temperature of formation nanotube depends in the third degree on thickness of its wall.