

**МЕХАНИКА  
ТВЕРДОГО ТЕЛА**  
**№ 4 • 2005**

УДК 539.3

© 2005 г. В.А. ГОРОДЦОВ, Д.С. ЛИСОВЕНКО

**УПРУГИЕ СВОЙСТВА ГРАФИТОВЫХ СТЕРЖНЕЙ И МНОГОСЛОЙНЫХ  
УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК (КРУЧЕНИЕ И РАСТЯЖЕНИЕ)**

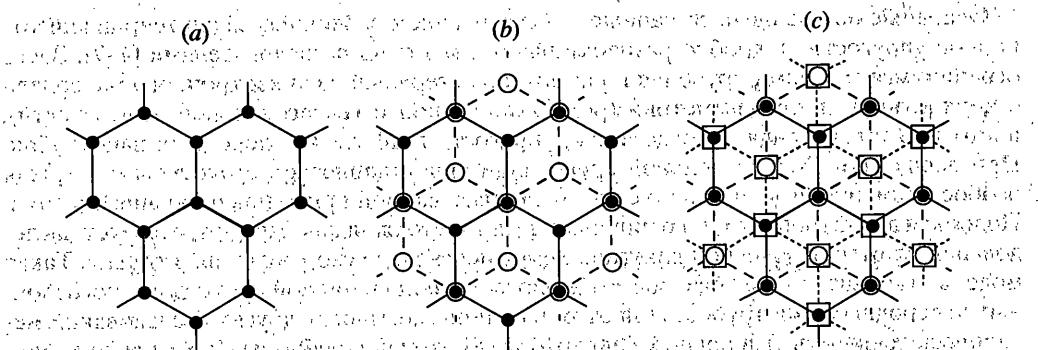
К двум классическим модификациям углерода (графиту и алмазу) в последние годы добавились новые виды молекулярного углерода с графитоподобной поверхностной структурой: фуллерены и нанотрубки. По анизотропии структуры и свойств графит наиболее часто относится к гексагональному типу симметрии. В природном графите наряду с основной модификацией десятки процентов составляет также ромбоэдрическая разновидность графита. В работе дана оценка возможной роли полиморфных превращений при деформировании в графитоподобных материалах типа углеродных нанотрубок в изменчивости их упругих свойств.

**1. Введение.** Такой химический элемент, как углерод, обладая относительно легко изменяемыми валентными связями, может образовывать многообразные твердотельные структуры. Наиболее давно известны две модификации с уникальными физическими и механическими свойствами: графит и алмаз. Однако в течение последних двух десятилетий были обнаружены и интенсивно исследуются такие новые углеродные образования как фуллерены, нанотрубки, карбон и др. [1]. При этом центр интереса переместился в область с нанометровыми ( $10^{-9}$  м) масштабами. Особое внимание уделяется исследованию углеродных нанотрубок в связи с большими перспективами их применения в электронике.

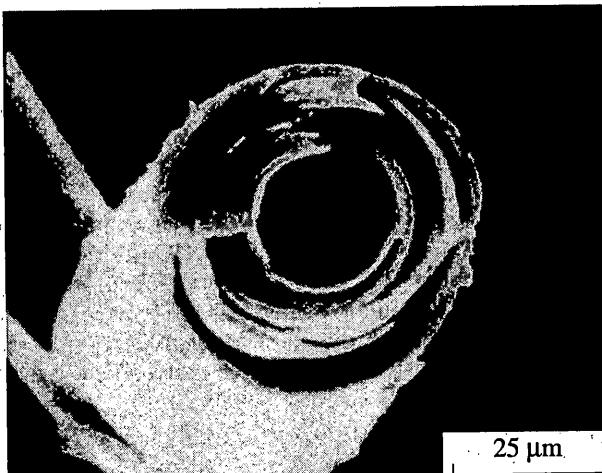
По своему молекулярному строению углеродные нанотрубки очень схожи с графитом, отличаясь от него в первую очередь своей закрученностью в цилиндрические, конусообразные и спиралевидные структуры. Монокристаллический графит относится к слоистым материалам, и молекулярной основой каждого отдельного слоя идеально-го кристалла ("графеновой плоскости" толщиной в один атом углерода) является шестиугольная сетка прочных ковалентных связей между атомами углерода. Связи между графеновыми плоскостями имеют гораздо более слабый ван-дер-ваальсов характер, и потому расстояние между плоскостями более, чем в два раза, превосходит межатомное расстояние в слоях. Подобная сильная анизотропия молекулярного строения находит отражение в сильной анизотропии макроскопических свойств монокристаллического графита.

Большая родственность строения графита и углеродных нанотрубок позволяет представлять цилиндрические нанотрубки как свернутые в цилиндры графитовые пластины. Опираясь на такое представление для теоретической оценки упругих свойств, по крайней мере, многослойных нанотрубок можно воспользоваться законом Гука с параметрами, установленными для графита.

По анизотропии структуры и свойств графит наиболее часто относится к гексагональному типу симметрии, к гексагональной системе (сингонии). Гексагональный графит именуют также  $\alpha$ -графитом. В природном графите наряду с такой основной модификацией десятки процентов составляет также  $\beta$ -графит с несколько другой симметрией, относящейся к ромбоэдрической (тригональной) системе. Различие между двумя такими модификациями графита по молекулярному строению сводится к раз-



Фиг. 1



Фиг. 2

ной периодичности укладки графеновых плоскостей с практически одинаковой структурой. Наглядно это иллюстрирует фиг. 1. На фигуре схематично передан вид “сверху” отдельной графеновой плоскости (фиг. 1, а), пары сдвинутых относительно друг друга на межатомное расстояние графеновых плоскостей, периодическое повторение которой в укладке типа АВАВ... соответствует строению  $\alpha$ -графита (фиг. 1, б), тройки сдвинутых графеновых плоскостей при периодической укладке типа АВСАВС..., характерной для  $\beta$ -графита (фиг. 1, в).

Как правило, различие между поперечными и продольными масштабами для углеродных нанотрубок очень велико. Типичной является ситуация трубок нанометрового диаметра с относительно тонкими стенками и микронными длинами. Однако здесь нет принципиальных ограничений только такими масштабами. Гораздо ранее изучавшиеся квазидномерные углеродные образования типа “углеродных усов” часто также имели аналогичное трубчатое строение. В [2, 3] наблюдалось образование углеродных усов в виде цилиндрических трубок микронных диаметров и миллиметровых длин, при получении их с участием металлических катализаторов (фиг. 2).

В связи с вышеизложенным становится понятным современное усиление интереса к классическим задачам теории анизотропной упругости квазидномерных объектов типа стержней, пластин и оболочек.

Основные общие идеи, связанные с исследованием различных задач теории анизотропной упругости, подробно разрабатывались многими исследователями [4–7]. Здесь ограничимся задачами кручения и растяжения стержней из анизотропного материала с конкретным типом симметрии (ромбоэдрической и гексагональной, в частности), постоянно имея в виду, прежде всего, упругость графита и углеродных нанотрубок. При оценке роли относительной ориентации кристаллической структуры и стержня особое внимание будет уделено случаю так называемой криволинейной анизотропии. Подобная анизотропия полого цилиндрического стержня как раз соответствует наследованию упругости плоской пластины, имевшейся до ее сворачивания в трубку. Такая модель становится здесь базовой моделью механики сплошной среды для многослойных углеродных нанотрубок. При этом в отличие от многих других исследований механических свойств углеродных нанотрубок [8] здесь подробно разбирается роль анизотропии (в том числе возможная роль ромбоэдрической симметрии).

**2. Линейный закон Гука для ромбоэдрических и гексагональных кристаллов.** Для анизотропного кристаллического материала закон Гука при малых деформациях представляется линейными взаимно обратными однородными связями между тензором напряжений и тензором деформации вида [9]  $\sigma^{ij} = \lambda^{ijkl} u^{kl}$ ,  $u^{ij} = s^{ijkl} \sigma^{kl}$ . При этом тензорные коэффициенты жесткости  $\lambda^{ijkl}$  и податливости  $s^{ijkl}$  обладают общими свойствами симметрии  $\lambda^{ijkl} = \lambda^{jikl} = \lambda^{klij} = \lambda^{klji}$ ,  $s^{ijkl} = s^{ijlk} = s^{jilk} = s^{klji}$ . Верхними индексами здесь отмечены компоненты тензоров в кристаллографической системе координат, в которой плоскость (1, 2) является базисной, а нормальная к ней ось оказывается с-осью кристалла.

Для рассматриваемых кристаллов с симметрией, относящейся к ромбоэдрической (тригональной) системе, тензорные коэффициенты жесткости (податливости) сводятся к шести независимым модулям упругости (податливости). Это хорошо видно при часто используемом наглядном матричном представлении всей совокупности коэффициентов [10]. В случае ромбоэдрической симметрии имеем симметричные матрицы жесткости и податливости (индексы матричных элементов будем писать снизу):

$$\begin{array}{|c c c c c c|} \hline & c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & 0 & 0 \\ \hline & c_{12} & c_{11} & c_{13} & -c_{14} & 0 & 0 \\ \hline & c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ \hline & c_{14} & -c_{14} & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ \hline & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & c_{14} \\ \hline & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{14} & c_{66} \\ \hline \end{array}, \quad \begin{array}{|c c c c c c|} \hline & s_{11} & s_{12} & s_{13} & s_{14} & 0 & 0 \\ \hline & s_{12} & s_{11} & s_{13} & -s_{14} & 0 & 0 \\ \hline & s_{13} & s_{13} & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ \hline & s_{14} & -s_{14} & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ \hline & 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 2s_{14} \\ \hline & 0 & 0 & 0 & 0 & 2s_{14} & s_{66} \\ \hline \end{array}$$

причём  $2c_{66} = c_{11} - c_{12}$ ,  $s_{66} = 2(s_{11} - s_{12})$ . Соответствие между матричными коэффициентами и компонентами тензоров жесткости и податливости в кристаллографической системе координат устанавливается следующими формулами:

$$\lambda^{1111} = \lambda^{2222} = c_{11}, \quad \lambda^{3333} = c_{33}, \quad \lambda^{1122} = c_{12}, \quad \lambda^{1133} = \lambda^{2233} = c_{13}$$

$$\lambda^{1123} = \lambda^{1213} = -\lambda^{2223} = c_{14}, \quad \lambda^{1313} = \lambda^{2323} = c_{44}, \quad 2\lambda^{1212} = c_{11} - c_{12}$$

$$\lambda^{1112} = \lambda^{1113} = \lambda^{1222} = \lambda^{1333} = \lambda^{1322} = \lambda^{1233} = \lambda^{1223} = \lambda^{1323} = \lambda^{2333} = 0$$

$$s^{1111} = s^{2222} = s_{11}, \quad s^{3333} = s_{33}, \quad s^{1122} = s_{12}, \quad s^{1133} = s^{2233} = s_{13}$$

$$s^{1123} = 2s^{1213} = -s^{2223} = s_{14}/2, \quad s^{1313} = s^{2323} = s_{44}/4, \quad 2s^{1212} = s_{11} - s_{12}$$

$$s^{1112} = s^{1113} = s^{1222} = s^{1333} = s^{1322} = s^{1233} = s^{1223} = s^{1323} = s^{2333} = 0$$

Не упомянутые здесь коэффициенты приводятся к перечисленным с использованием свойств симметрии тензоров. Податливости можно выразить через жесткости (и обратно)

$$2s_{11} = \frac{c_{33}}{c} + \frac{c_{44}}{d}, \quad 2s_{12} = \frac{c_{33}}{c} - \frac{c_{44}}{d}, \quad s_{13} = -\frac{c_{13}}{c}, \quad s_{14} = -\frac{c_{14}}{d}$$

$$s_{33} = \frac{c_{11} + c_{12}}{c}, \quad s_{44} = \frac{c_{11} - c_{12}}{d}$$

$$c \equiv (c_{11} + c_{12})c_{33} - 2c_{13}^2, \quad d \equiv c_{44}(c_{11} - c_{12}) - 2c_{14}^2$$

Благодаря положительной определенности упругой энергии имеются общие ограничения на модули упругости (соответственно и на модули податливости)  $c_{11} > |c_{12}|$ ,  $c_{44} > 0$ ,  $c > 0$ ,  $d > 0$ .

Указанные соотношения для ромбоэдрической симметрии переходят в соотношения для гексагональной симметрии в частном случае  $c_{14} = 0$  ( $s_{14} = 0$ ). При этом число независимых модулей того или иного рода уменьшается до пяти, а симметрия в базисной плоскости становится непрерывной изотропной, т.е. приходим к трансверсально-изотропному случаю. Поэтому основные результаты в дальнейшем будем часто получать сначала для общего случая ромбоэдрической симметрии, соответствующей, в частности,  $\beta$ -графиту, и лишь затем переходить к гексагональной симметрии, имеющей место в  $\alpha$ -графите.

Для монокристаллов  $\alpha$ -графита согласно [11]  $c_{11} = 1060$  ГПа,  $c_{66} = 440$  ГПа,  $c_{12} = 180$  ГПа,  $c_{33} = 36.5$  ГПа,  $c_{13} = 15$  ГПа,  $c_{44} \approx 0.18 - 0.35$  ГПа. Для  $\beta$ -графита подобные данные в литературе отсутствуют. Здесь обращает на себя внимание очень большая величина жесткости  $c_{11}$  для гексагонального графита, далеко превосходящая значения жесткостей большинства других материалов, в том числе материалов с гексагональной структурой.

**3. Однородное кручение цилиндрического стержня, вырезанного из ромбоэдрического кристалла.** Поле смещений в длинном тонком анизотропном стержне, вызванных внешней силовой нагрузкой, сводящейся к продольному моменту на торцах стержня, будем искать в том же виде, что и в классической задаче кручения изотропного стержня [9, 12]:

$$u_x = -\tau zy, \quad u_y = \tau zx, \quad u_z = \tau \Psi(x, y) \quad (3.1)$$

Здесь ось  $z$  прямоугольной системы координат  $x, y, z$  принята за ось стержня,  $\tau$  – угол закручивания стержня на единицу его длины, функцией  $\Psi(x, y)$  характеризуется искривление первоначально плоского поперечного сечения.

Таким перемещениям соответствует чисто сдвиговая деформация вида

$$u_{xz} = \frac{\tau}{2} \left( \frac{\partial \Psi}{\partial x} - y \right), \quad u_{yz} = \frac{\tau}{2} \left( \frac{\partial \Psi}{\partial y} + x \right)$$

$$u_{xx} = u_{yy} = u_{zz} = u_{xy} = 0$$

независимого от анизотропии материала. Однако анизотропия существенно сказывается на напряженном состоянии, причем не только в связи с изменением вида закона Гука при изменении симметрии кристаллических решеток, но и за счет различий в ориентации кристаллографических осей и осей координат, связанных со стержнем.

Предположим сначала, что стержень вырезан так, что кристаллографическая система координат  $(1, 2, 3)$  совпадает с ортогональной системой координат стержня  $(x, y, z)$ . При этом  $c$ -ось кристалла направлена вдоль оси стержня, а графеновые плоскости гра-

фита ортогональны ей. Тогда закон Гука для ромбоэдрического кристалла ( $\beta$ -графита, в частности) дает следующее многокомпонентное поле напряжений

$$\sigma_{xx} = -\sigma_{yy} = \frac{c_{14}}{c_{44}}\sigma_{yz} = \tau c_{14}\left(\frac{\partial\Psi}{\partial y} + x\right)$$

$$\sigma_{xy} = \frac{c_{14}}{c_{44}}\sigma_{xz} = \tau c_{14}\left(\frac{\partial\Psi}{\partial x} - y\right), \quad \sigma_{zz} = 0$$

При учете уравнений равновесия в отсутствие объемных сил получаем

$$\frac{\partial\sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial\sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial\sigma_{xz}}{\partial z} = 2\tau c_{14}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x\partial y} = 0$$

$$\frac{\partial\sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial\sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial\sigma_{yz}}{\partial z} = \tau c_{14}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}\right) = 0$$

$$\frac{\partial\sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial\sigma_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial\sigma_{zz}}{\partial z} = \tau c_{44}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}\right) = 0$$

Эта система уравнений дает для функции кручения  $\Psi(x, y)$  линейную зависимость. Выбором начала координат она приводится к постоянной, что интерпретируется как несущественное перемещение стержня вдоль своей оси. Таким образом, в случае ромбоэдрического материала нет нетривиального решения задачи об однородном чистом кручении стержня, вырезанного вдоль  $c$ -оси. Однако в более частном случае гексагональной симметрии (при  $c_{14} = 0$ ) подобное кручение становится возможным.

Для стержня из гексагонального материала, вырезанного вдоль  $c$ -оси, закон Гука при чистом кручении делает нетривиальными только две сдвиговые компоненты напряжений (в силу этого последующие соотношения здесь с точностью до измененных коэффициентов повторяют соотношения теории изотропной среды)

$$\sigma_{xz} = 2c_{44}u_{xz} = \tau c_{44}\left(\frac{\partial\Psi}{\partial x} - y\right), \quad \sigma_{yz} = 2c_{44}u_{yz} = \tau c_{44}\left(\frac{\partial\Psi}{\partial y} + x\right)$$

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \sigma_{xy} = 0$$

Тогда два уравнения равновесия выполняются автоматически, а третье сводится к гармоническому уравнению для функции кручения  $\Psi(x, y)$ :

$$\frac{\partial\sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial\sigma_{zy}}{\partial y} = \tau c_{44}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}\right) = 0$$

Последнее условие соленоидальности напряжений будет удовлетворяться автоматически при использовании функции напряжений  $\chi(x, y)$ , которая в свою очередь будет удовлетворять уравнению Пуассона

$$\sigma_{xz} = 2\tau c_{44}\partial\chi/\partial y, \quad \sigma_{yz} = -2\tau c_{44}\partial\chi/\partial x$$

$$\Delta\chi = -1$$

На контуре сечения стержня функция  $\chi$  в соответствии с условием  $\sigma_{i\alpha}n_\alpha = 0$  должна принимать постоянное значение. ( $\sigma_{zx}n_x + \sigma_{zy}n_y = 0 \rightarrow -n_y\partial\chi/\partial x + n_x\partial\chi/\partial y = d\chi = 0$ ).

Для односвязного контура ее без ограничения общности можно считать равной нулю, поскольку напряжения определяются через производные этой функции. Для многосвязных контуров с учетом однозначности смещения  $u_z$  как функции координат должны выполняться условия

$$\oint (\mathbf{n} \nabla \chi) dl = -S$$

на каждом из внутренних контуров, охватывающих соответствующую площадь  $S$ . Они обходятся по часовой стрелке, а производная берется по направлению внешней нормали к ним.

В итоге как само уравнение для функции  $\chi$ , так и краевые условия на боковых поверхностях стержня в рассматриваемом случае не зависят от материальных констант, а обе отличные от нуля компоненты напряжений зависят здесь только от одного модуля упругости графита, соответствующего модулю  $\mu$  в случае изотропного материала ( $c_{44} \rightarrow \mu$ ). От этого модуля зависит энергия деформации кручения. Свободная энергия единицы длины закручиваемого тонкого стержня оказывается пропорциональной квадрату угла кручения  $\tau$  и крутильной жесткости  $C$ , пропорциональной модулю  $c_{44}$ :

$$F = \frac{1}{2} \int \sigma_{\alpha\beta} u_{\alpha\beta} df = \frac{1}{2c_{44}} \int (\sigma_{xz}^2 + \sigma_{yz}^2) df = \frac{1}{2} C \tau^2$$

$$C = 4c_{44} \int (\nabla \chi)^2 df = 4c_{44} \int \chi dx dy + 4c_{44} \left( -\chi_0 S_0 + \sum_k \chi_k S_k \right)$$

Последняя сумма присутствует в случае многосвязных контуров сечения стержня с охватываемыми ими площадями  $S_k$  и краевыми постоянными на них  $\chi_k$ , а  $\chi_0$  можно полагать равным нулю. Для гексагонального графита модуль упругости  $c_{44}$  мал и соответственно этому малой будет и крутильная жесткость при рассматриваемой ориентации гексагонального кристалла в стержне.

При кручении стержня с нижним закрепленным концом, к другому концу которого приложена закручивающая пара сил с моментом  $M$ , имеет место постоянный вдоль стержня угол кручения  $\tau = M/C$ . Верхнее основание стержня длины  $L$  тогда поворачивается на угол  $ML/C$ .

Рассмотрим далее задачу кручения стержня при взаимно ортогональной ориентации оси стержня и кристаллографической  $c$ -оси. Пусть система координат стержня  $(x, y, z)$  получается поворотом кристаллографической системы координат  $(1, 2, 3)$  вокруг оси  $2 = y$  на  $\pi/2$ . Пользуясь стандартным законом преобразования компонент тензоров деформации и напряжений при повороте, в силу закона Гука для ромбоэдрического материала при однородном чистом кручении предполагаемого вида (3.1) получаем чисто сдвиговое напряженное состояние

$$\sigma_{xz} = 2c_{44}u_{xz} - 2c_{14}u_{yz} = \tau \left( c_{44} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - c_{14} \frac{\partial \Psi}{\partial y} \right) - \tau(c_{44}y + c_{14}x)$$

$$\sigma_{yz} = 2c_{66}u_{yz} - 2c_{14}u_{xz} = \tau \left( c_{66} \frac{\partial \Psi}{\partial y} - c_{14} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + \tau(c_{66}x + c_{14}y)$$

Уравнения равновесия при этом приводятся к однородному дифференциальному уравнению второго порядка для функции кручения вида

$$c_{44} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + c_{66} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} - 2c_{14} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial y} = 0$$

При использовании потенциала напряжений, вводимого следующим образом:

$$\sigma_{xz} = 2a\tau \partial\chi/\partial y, \quad \sigma_{yz} = -2a\tau \partial\chi/\partial x$$

получим эквивалентное неоднородное уравнение для потенциала

$$c_{44} \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} + c_{66} \frac{\partial^2 \chi}{\partial y^2} - 2c_{14} \frac{\partial^2 \chi}{\partial x \partial y} = -\frac{c_{44}c_{66} - c_{14}^2}{a} \quad (3.2)$$

Пользуясь приведенным представлением напряжений через потенциал и связью деформации с напряжениями, находим общие выражения для энергии деформации закручиваемого стержня на единицу длины и крутильной жесткости

$$F = \frac{1}{2} \int \sigma_{\alpha\beta} u_{\alpha\beta} df = \frac{1}{2} \int \frac{c_{66}\sigma_{xz}^2 + 2c_{14}\sigma_{xz}\sigma_{yz} + c_{44}\sigma_{yz}^2}{c_{44}c_{66} - c_{14}^2} df = \frac{1}{2} C \tau^2$$

$$C = \frac{4a^2}{c_{44}c_{66} - c_{14}^2} \int \left[ c_{44} \left( \frac{\partial \chi}{\partial x} \right)^2 - 2c_{14} \frac{\partial \chi}{\partial x} \frac{\partial \chi}{\partial y} + c_{66} \left( \frac{\partial \chi}{\partial y} \right)^2 \right] df$$

Границочное условие постоянства потенциала на боковой поверхности круглого цилиндрического стержня в случае сплошного (односвязного) стержня при выборе постоянной равной нулю позволяет получить для потенциала, удовлетворяющего уравнению (3.2), следующее выражение

$$\chi = \frac{c_{44}c_{66} - c_{14}^2}{2a(c_{66} + c_{44})} (R^2 - x^2 - y^2)$$

Тогда подсчет крутильной жесткости сплошного круглого стержня, вырезанного в направлении базисных плоскостей ромбоэдрического кристалла, приводит к результату

$$C = c_{44}\pi R^4 \left( 1 + \frac{c_{44}}{c_{66}} \right)^{-1} \left( 1 - \frac{c_{14}^2}{c_{44}c_{66}} \right)$$

Единственное формальное изменение, которое происходит здесь в случае гексагонального кристалла, связано с обращением в нуль коэффициента  $c_{14}$ .

Для  $\alpha$ -графита с процентной точностью указанный результат упрощается до формулы  $C = c_{44}\pi R^4$ . Для бездефектного графита модуль упругости  $c_{44}$  является наименьшим из пяти модулей и очень малым, так что пропорциональная ему крутильная жесткость цилиндрических стержней с обсуждаемой кристаллической ориентацией также мала. Такие стержни тем самым легко закручиваются. В конечном счете это является отражением легкости относительного скольжения слоев слоистых материалов, подобных графиту.

Небольшие плавные изменения формы поперечного сечения стержня мало скаживаются на результате. В этом можно убедиться обобщая предыдущий случай на стержень эллиптического сечения. Для функции напряжений, обращающейся в нуль на боковой поверхности с уравнением  $x^2/p^2 + y^2/q^2 = 1$ , получаем аналогично примеру с круговым цилиндром следующий результат:

$$\chi = \frac{(c_{44}c_{66} - c_{14}^2)p^2 q^2}{2a(c_{44}q^2 + c_{66}p^2)} \left( 1 - \frac{x^2}{p^2} - \frac{y^2}{q^2} \right)$$

Для крутильной жесткости находим

$$C = c_{44} \pi p q^3 \left( 1 + \frac{c_{44} q^2}{c_{66} p^2} \right)^{-1} \left( 1 - \frac{c_{14}^2}{c_{44} c_{66}} \right)$$

**4. Однородное растяжение стержня из ромбоэдрического материала.** При однородном растяжении стержня (вдоль оси  $z$ ) силами, приложенными к его концам, постоянные напряжения определяются из граничных условий. В отсутствии воздействий сбоку ненулевой оказывается лишь одна компонента напряжений, равная силе  $p$ , действующей на единицу площади концевого сечения

$$\sigma_{ij} = p \delta_{iz} \delta_{jz} \quad (4.1)$$

Отношение растягивающей силы к соответствующей деформации растяжения определяет модуль Юнга (модуль растяжения)  $E \equiv p/u_{zz}$ . С учетом закона Гука в форме  $u_{ij} = s_{ijkl} \sigma_{kl}$  получаем выражение модуля Юнга через один из коэффициентов податливости  $1/E = s_{zzzz}$ . Величина модуля Юнга сильно меняется при изменении ориентации кристаллографической системы координат материала относительно оси стержня, т.е. при изменении направления "вырезки" стержня из кристалла.

Если стержень из ромбоэдрического кристалла вырезан так, что кристаллографическая  $c$ -ось параллельна оси стержня и, следовательно, оси растяжения  $z$  (базисные плоскости ортогональны этой оси), то с учетом простых связей модулей податливости с модулями упругости из п. 2 для модуля Юнга находим

$$E = \frac{1}{s_{33}} = c_{33} - \frac{2c_{13}^2}{c_{11} + c_{12}} \quad (4.2)$$

Формально этот же результат сохранится и для гексагонального материала, поскольку в этой формуле не содержится жесткость  $c_{14}$ .

Деформация растягиваемых кристаллов при такой ориентации имеет бесследственный характер (при других ориентациях это может быть не так)  $u_{xx} = s_{13}p$ ,  $u_{yy} = s_{13}p$ ,  $u_{zz} = s_{33}p$ ,  $u_{xy} = u_{xz} = u_{yz} = 0$ .

Относительные величины поперечных деформаций определяют коэффициенты Пуассона для двух ортогональных направлений

$$\nu_{(xz)} = -\frac{u_{xx}}{u_{zz}} = -\frac{s_{13}}{s_{33}} = \frac{c_{13}}{c_{11} + c_{12}} = \nu_{(yz)} = -\frac{u_{yy}}{u_{zz}}$$

Коэффициент Пуассона оказывается в обсуждаемом примере не зависящим от направления, и в случае графита (гексагонального графита) согласно экспериментальным значениям модулей упругости близким к нулю ( $\nu \approx 0.01$ ).

Если стержень вырезан из ромбоэдрического кристалла вдоль базисных плоскостей (т.е.  $c$ -ось ортогональна оси растягиваемого стержня), то с учетом поворота кристаллографической системы координат на угол  $\pi/2$  вокруг оси  $2(y)$  для компонент деформации вследствие закона Гука будем иметь

$$u_{xx} = s_{13}p, \quad u_{yy} = s_{12}p, \quad u_{zz} = s_{11}p, \quad u_{xy} = -s_{14}p/2, \quad u_{xz} = u_{yz} = 0$$

Здесь уже наряду с нормальными деформациями имеется и сдвиговая деформация в плоскости поперечного сечения стержня, исчезающая в частном случае гексагонального кристалла. Выражение для модуля Юнга

$$\frac{1}{E} = s_{11} = \frac{1}{2} \left[ \left( c_{11} + c_{12} - 2 \frac{c_{13}^2}{c_{33}} \right)^{-1} + \left( c_{11} - c_{12} - 2 \frac{c_{14}^2}{c_{44}} \right)^{-1} \right]$$

теперь оказывается зависящим от отличительного модуля жесткости ромбоэдрического кристалла  $c_{14}$ . В случае гексагонального кристалла (в отсутствие этого модуля) имеем

$$E = \frac{c(c_{11} - c_{12})}{c_{11}c_{33} - c_{13}^2}$$

что, в частности, для  $\alpha$ -графита дает  $E \approx c_{11} - c_{12}^2/c_{11} \approx c_{11}$ .

Поперечное сжатие растягиваемого стержня с обсуждаемой продольной вырезкой из ромбоэдрического материала характеризуется коэффициентами Пуассона

$$\nu_{(xz)} = -\frac{u_{xx}}{u_{zz}} = -\frac{s_{13}}{s_{11}} = \frac{c_{13}}{c_{33}} \frac{c_{11} - c_{12} - 2c_{14}^2/c_{44}}{c_{11} - c_{13}^2/c_{33} - c_{14}^2/c_{44}}$$

$$\nu_{(yz)} = -\frac{u_{yy}}{u_{zz}} = -\frac{s_{12}}{s_{11}} = \frac{c_{12} - c_{13}^2/c_{33} + c_{14}^2/c_{44}}{c_{11} - c_{13}^2/c_{33} - c_{14}^2/c_{44}}$$

При реальных значениях упругих констант гексагонального графита отсюда получаем следующие оценки коэффициентов Пуассона:  $\nu_{(xz)} \approx 0.35$ ,  $\nu_{(yz)} \approx 0.16$ . Они отражают большее сжатие стержня в направлении, перпендикулярном графеновым (базисным) плоскостям  $\alpha$ -графита.

Из сравнения с предыдущими результатами для поперечно вырезанного стержня из  $\alpha$ -графита можно также видеть, что модуль Юнга для стержня, вырезанного вдоль графеновых плоскостей, превосходит в тридцать раз модуль Юнга стержня, вырезанного в ортогональном направлении.

Из приведенных здесь формул видно, что безразмерное отношение

$$\gamma \equiv \frac{2c_{14}^2}{c_{44}(c_{11} - c_{12})} < 1$$

является удобной мерой для характеристики различия ромбоэдрического и гексагонального материалов. Например таких родственных кристаллов, как  $\alpha$ -графит и  $\beta$ -графит.

**5. Кручение круговых цилиндрических стержней с криволинейной анизотропией (модель многослойной нанотрубки).** Многослойные углеродные нанотрубки в первом приближении (пренебрегая некоторой перестройкой молекулярного строения) можно наглядно представлять себе как свернутые в цилиндре графитовые пластинки. В соответствии с этим можно ожидать и некоторого наследования ими упругих свойств исходного материала. Можно предполагать, что локально в цилиндрической системе координат будет сохраняться тот же закон Гука с постоянными модулями упругости. Такое приближение в теории упругости именуют криволинейной анизотропией.

Задача о кручении кругового цилиндрического стержня с криволинейной анизотропией допускает довольно простое решение в случае локально ромбоэдрического материала. Рассмотрим случай полой цилиндрической трубы со свободными боковыми поверхностями, с закрепленным нижним основанием и силовой нагрузкой на верхнее основание, сводящейся к продольному моменту  $M$ .

Начнем поиск предполагаемого решения в цилиндрических координатах с задания аксиально симметричного распределения смещений вида

$$u_r = 0, \quad u_\phi = \tau r z, \quad u_z = \tau \Psi(r) \quad (5.1)$$

Такому распределению смещений с неизвестной функцией кручения  $\Psi(r)$  соответствует тензор деформации с отличными от нуля чисто сдвиговыми компонентами

$$u_{\varphi z} = \frac{\tau}{2}r, \quad u_{rz} = \frac{\tau}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial r}, \quad u_{rr} = u_{\varphi\varphi} = u_{zz} = u_{r\varphi} = 0$$

и в соответствии с обычным законом Гука локально ромбоэдрического материала в рассматриваемой цилиндрической системе координат находим компоненты напряжений, также имеющих чисто сдвиговой характер

$$\sigma_{rz} = \tau c_{44} \frac{\partial \Psi}{\partial r} - \tau c_{14} r, \quad \sigma_{\varphi z} = -\tau c_{14} \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \tau c_{66} r$$

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\varphi\varphi} = \sigma_{zz} = \sigma_{r\varphi} = 0$$

Учет уравнения равновесия приводит к интегрируемому уравнению для функции кручения

$$\frac{d\sigma_{rz}}{dr} + \frac{\sigma_{rz}}{r} = 0, \quad \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( r \frac{d\Psi}{dr} \right) = 2 \frac{c_{14}}{c_{44}}$$

Его решение содержит две произвольных постоянных.

$$\Psi = \frac{c_{14}}{2c_{44}} r^2 + C_1 \ln r + C_2$$

В силу отсутствия компоненты напряжений  $\sigma_{rz}$  на боковой поверхности стержня постоянная  $C_1$  должна обращаться в нуль, и эта компонента напряжений исчезает изнутри стержня. Тогда для единственной ненулевой компоненты напряжений получим

$$\sigma_{\varphi z} = \tau \frac{c_{44} c_{66} - c_{14}^2}{c_{44}} r > 0$$

Простой подсчет свободной энергии чистого кручения единицы длины полого стержня с внешним радиусом  $R$  и внутренним радиусом  $R_0$ :

$$F = \frac{1}{2} \int \sigma_{\alpha\beta} u_{\alpha\beta} df = \int \sigma_{\varphi z} u_{\varphi z} df = \frac{1}{2} C \tau^2$$

приводит к результату для крутильной жесткости вида

$$C = \left( c_{11} - c_{12} - \frac{2c_{14}^2}{c_{44}} \right) \frac{\pi}{4} (R^4 - R_0^4) \quad (5.2)$$

Согласно этой формуле при сравнении трубок с ромбоэдрической и гексагональной симметрией при одинаковых коэффициентах упругости  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  и  $c_{44}$  крутильная жесткость трубок первого типа должна быть несколько ниже.

Полученная здесь формула позволяет акцентировать внимание на большом различии крутильной жесткости трубок с цилиндрической анизотропией и трубок, вырезанных из кристалла, для графитоподобных материалов. Для гексагонального графита формула (5.2) принимает вид  $C = \pi(c_{11} - c_{12})(R_4 - R_0^4)/4$ . Крутильная жесткость пропорциональна большой разности двух модулей упругости  $c_{11} - c_{12}$ , в то время как согласно оценкам жесткости кручения трубок с продольной анизотропией из

п. 3 она пропорциональна гораздо меньшему модулю упругости  $c_{44}$ . Из данных, воспроизведенных в п. 2 видно, что количественно это различие может достигать несколько сотен раз. Это является отражением особенностей поведения слоистых материалов, подобных графиту, и больших различий в силе межатомных связей в графеновых слоях и между ними. В одном случае (при продольной ориентации кристалла) кручение стержней сопровождается легким относительным скольжением слоев, а в другом (при криволинейной анизотропии) необходимо деформирование самих графеновых слоев с жесткой структурой.

**6. Неоднородное растяжение стержня в случае криволинейной анизотропии.** При продольном растяжении анизотропных стержней с криволинейной анизотропией однородная деформация становится невозможной, и это несколько усложняет решение задачи, которая является чрезвычайно простой в случае изотропной среды.

Будем считать, что при растяжении стержня силой  $p$ , действующей на единицу поверхности концевого сечения в направлении оси, при свободных боковых поверхностях неоднородное напряженное состояние в криволинейно анизотропном стержне с локально ромбoidalеской симметрией остается аксиально симметричным. Начнем с предположения, что имеются четыре отличных от нуля компоненты напряжений, зависящие от радиальной координаты,  $\sigma_r(r)$ ,  $\sigma_{\phi\phi}(r)$ ,  $\sigma_{zz}(r)$ ,  $\sigma_{rr}(r)$ ,  $\sigma_{\phi z} = \sigma_{rz} = 0$ . Нетрудно убедиться, что на самом деле здесь могут быть отличными от нуля только нормальные компоненты. Действительно, одно из уравнений равновесия  $\partial\sigma_{r\phi}/\partial r + (2/r)\sigma_{r\phi} = 0$  дает простой результат  $\sigma_{r\phi} = Q/r^2$ , а отсутствие такого напряжения на боковой поверхности стержня требует  $Q = 0$ , т.е. такая сдвиговая компонента напряжений также отсутствует.

По закону Гука для материала с рассматриваемой симметрией в цилиндрическом стержне имеется неоднородная деформация с компонентами в цилиндрической системе координат

$$u_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z} = s_{11}\sigma_{zz} + s_{12}\sigma_{\phi\phi} + s_{13}\sigma_{rr} \equiv D_1(r) \quad (6.1)$$

$$u_{\phi\phi} = \frac{1}{r} \frac{\partial u_\phi}{\partial \phi} + \frac{u_r}{r} = s_{12}\sigma_{zz} + s_{11}\sigma_{\phi\phi} + s_{13}\sigma_{rr} \equiv D_2(r) \quad (6.2)$$

$$u_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r} = s_{13}(\sigma_{zz} + \sigma_{\phi\phi}) + s_{33}\sigma_{rr} \equiv D_3(r) \quad (6.3)$$

$$u_{r\phi} = \frac{1}{2r} \frac{\partial u_r}{\partial \phi} + \frac{r}{2} \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u_\phi}{r} \right) = \frac{1}{2}s_{14}(\sigma_{\phi\phi} - \sigma_{zz}) \equiv D_4(r) \quad (6.4)$$

$$u_{rz} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) = 0 \quad (6.5)$$

$$u_{\phi z} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_\phi}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \phi} \right) = 0 \quad (6.6)$$

Интегрируя сначала три уравнения (6.1), (6.5), (6.6), найдем следующие представления для трех компонент смещений

$$u_z = zD_1(r) + W(r, \phi)$$

$$u_r = -\frac{z^2}{2} \frac{\partial D_1(r)}{\partial r} - z \frac{\partial W(r, \phi)}{\partial r} + U(r, \phi)$$

$$u_\phi = -\frac{z}{r} \frac{\partial W(r, \phi)}{\partial \phi} + V(r, \phi)$$

В итоге здесь три функции цилиндрических координат свелись к трем функциям двух переменных.

Интегрирование остальных трех из шести уравнений (6.1)–(6.6) с учетом найденных выражений для смещений позволяет установить: постоянство одной из линейных комбинаций напряжений  $D_1(r)$  ( $D_1(r) = D_0 = \text{const}$ ), вид функции  $W(r, \phi)$  с точностью до трех постоянных  $W(r, \phi) = \text{arcos}\phi + b\text{rsin}\phi + c$ ; и три соотношения для введенных выше функций  $U(r, \phi)$ ,  $V(r, \phi)$ :

$$\partial U(r, \phi)/\partial r = D_3(r) \quad (6.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial \phi} \left( \frac{V(r, \phi)}{r} \right) + \frac{U(r, \phi)}{r} = D_2(r) \quad (6.8)$$

$$r^2 \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{V(r, \phi)}{r} \right) + \frac{\partial U(r, \phi)}{\partial \phi} = 2rD_4(r) \quad (6.9)$$

Интегрирование (6.7) ведет к аддитивному представлению первой из этой пары функций

$$U(r, \phi) = \int D_3(r) dr + F(\phi)$$

Тогда оставшиеся два соотношения (6.8), (6.9) для функции  $V(r, \phi)$  дают аналогичное аддитивное представление

$$V(r, \phi) = 2r \int \frac{D_4(r)}{r} dr - \int F(\phi) d\phi, \quad F(\phi) = A \cos\phi + B \sin\phi$$

при условии совместности

$$rD_2(r) = \int D_3(r) dr \quad (6.10)$$

Если теперь воспользоваться тем, что следствием условий равновесия при радиальной неоднородности напряженного состояния является связь между двумя компонентами напряжений

$$\sigma_{\phi\phi}(r) = d(r\sigma_{rr}(r))/dr$$

и найденным выше постоянством линейной комбинации напряжений  $D_1$ , то можно все четыре линейные комбинации напряжений  $D_i(r)$  выразить через одну из компонент напряжений, например,  $\sigma_{rr}(r)$ . После этого из условия совместности следует уравнение для этого напряжения

$$\frac{d}{dr} \left[ r \frac{d}{dr} (r\sigma_{rr}) \right] - \frac{s_{11}s_{33} - s_{13}^2}{s_{11}^2 - s_{12}^2} \sigma_{rr} = - \frac{s_{12} - s_{13}}{s_{11}^2 - s_{12}^2} D_0$$

Такое уравнение имеет решение степенного типа

$$\sigma_{rr} = \frac{s_{12} - s_{13}}{s_{11}s_{33} - s_{13}^2 + s_{12}^2 - s_{11}^2} D_0 + C_1 r^{\lambda_1} + C_2 r^{\lambda_2}$$

$$\lambda_{1,2} = -1 \pm k, \quad k = \sqrt{\frac{s_{11}s_{33} - s_{13}^2}{s_{11}^2 - s_{12}^2}}$$

При этом для других нормальных компонент напряжений получим

$$\sigma_{\phi\phi} = \frac{s_{12} - s_{13}}{s_{11}s_{33} - s_{13}^2 + s_{12}^2 - s_{11}^2} D_0 + kC_1 r^{\lambda_1} - kC_2 r^{\lambda_2}$$

$$\sigma_{zz} = \frac{s_{33} - s_{11}}{s_{11}s_{33} - s_{13}^2 + s_{12}^2 - s_{11}^2} D_0 - \frac{s_{13} + ks_{12}}{s_{11}} C_1 r^{\lambda_1} - \frac{s_{13} - ks_{12}}{s_{11}} C_2 r^{\lambda_2}$$

Входящие в ответ две постоянные находятся из условий обращения в нуль радиальной компоненты напряжений на внутренней (при  $r = R_0$ ) и внешней (при  $r = R = \rho R_0$ ) цилиндрических поверхностях

$$C_1 = -R_0^{-\lambda_1} \frac{\rho^{\lambda_2} - 1}{\rho^{\lambda_2} - \rho^{\lambda_1}} \frac{s_{12} - s_{13}}{s_{11}s_{33} - s_{13}^2 + s_{12}^2 - s_{11}^2} D_0$$

$$C_2 = -R_0^{-\lambda_2} \frac{\rho^{\lambda_1} - 1}{\rho^{\lambda_2} - \rho^{\lambda_1}} \frac{s_{12} - s_{13}}{s_{11}s_{33} - s_{13}^2 + s_{12}^2 - s_{11}^2} D_0$$

Наконец, учтем краевое условие на торцах полого цилиндрического стержня, а именно, равенство полного растягивающего усилия  $pS$  сумме локальных напряжений  $\sigma_{zz}(r)$  на площади торца  $S$ :

$$pS = p\pi(R^2 - R_0^2) = \int \sigma_{zz}(r) df$$

После использования предыдущих результатов и выполнения интегрирования находим вид линейной связи между удельным растягивающим усилием  $p$  и относительным удлинением стержня, равным однородной компоненте деформации  $u_{zz} = D_0 = \text{const}$ . Их отношением  $p/D_0$  определяется зависимость модуля Юнга от модулей податливости материала трубы и отношения внешнего и внутреннего радиусов полого цилиндрического стержня

$$E = \frac{s_{12} - s_{13}}{s_{11}s_{33} - s_{13}^2 + s_{12}^2 - s_{11}^2} \left[ \frac{s_{33} - s_{11}}{s_{12} - s_{13}} + 2 \frac{s_{13} + ks_{12}}{s_{11}(1+k)} \frac{(\rho^{k+1} - 1)^2}{(\rho^{2k} - 1)(\rho^2 - 1)} - \right. \\ \left. - 2 \frac{s_{13} - ks_{12}}{s_{11}(1-k)} \frac{(\rho^{k-1} - 1)^2 \rho^2}{(\rho^{2k} - 1)(\rho^2 - 1)} \right]$$

В пределе тонкостенной цилиндрической трубы ( $\rho \rightarrow 1$ ) результат принимает более простой вид

$$E = \frac{1}{s_{11}} = \frac{(c_{11} + c_{12} - 2c_{13}^2/c_{33})(c_{11} - c_{12} - 2c_{14}^2/c_{44})}{c_{11} - c_{13}^2/c_{33} - c_{14}^2/c_{44}}$$

В случае гексагонального материала со значениями модулей упругости  $\alpha$ -графита для модуля Юнга полого цилиндрического стержня получаем оценку  $E = 1/s_{11} \approx c_{11} - c_{12}^2/c_{11} \approx 1030 \text{ ГПа}$ .

**7. Заключение.** Выполненный выше анализ решений задач растяжения и кручения стержней из анизотропного материала с ромбоэдрической и гексагональной симметрией

рией позволяет сделать ряд заключений об упругих свойствах углеродных нанотрубок. Для использования подхода механики сплошных сред к нанотрубкам наиболее подходящими являются многослойные нанотрубки (с числом графеновых слоев более десятка), для которых длины, диаметры и толщины существенно превосходят межатомные расстояния.

Углеродные нанотрубки наследуют упругие свойства монокристаллического графита благодаря большой общности атомной структуры. Однако плоский характер графеновых слоев в одном случае и сворачивание их в цилиндры в другом приводят и к некоторым различиям в механическом поведении. Это хорошо иллюстрируется результатами задач о кручении стержней из пп. 3, 5.

Стержни, вырезанные вдоль графеновых плоскостей из монокристалла графита, легко закручиваются. Крутильная жесткость оказывается пропорциональной самому малому из модулей упругости графитового материала  $c_{44}$ . Это является отражением легкого относительного скольжения соседних плоскостей в стопке параллельных графеновых слоев при закручивании стержня.

Совсем иная картина кручения имеет место для стержней, полученных сворачиванием исходных плоских графеновых слоев в цилиндрические трубы. При закручивании таких стержней сдвиговую деформацию принимает на себя каждый цилиндрический графеновый слой, обладающий высокой жесткостью. Крутильная жесткость в этом случае оказывается пропорциональной большой разности модулей упругости  $c_{11} - c_{12}$  при локально гексагональной симметрии материала трубы (при локально ромбоэдрической симметрии имеем несколько другую разность  $c_{11} - c_{12} - 2c_{14}^2/c_{44}$ ). Именно такой стержень с криволинейной анизотропией может быть подходящей моделью многослойной углеродной нанотрубки в приближении сплошной среды.

В задаче растяжения стержней сталкиваемся с другой ситуацией. При растяжении обоих обсуждаемых типов стержней деформация растяжения должна в равной мере затрагивать сами графеновые слои (плоские и цилиндрические). Поэтому такие характеристики, как модули Юнга, отличаются в обоих ситуациях слабо (близки по величине жесткости графита  $c_{11}$ ). При этом характер деформирования различен (деформация однородна в одном случае и неоднородна в другом).

При экспериментальном исследовании торсионных колебаний многослойных углеродных нанотрубок [13] наблюдалась большая изменчивость их упругих свойств. Крутильная жесткость трубок сильно возрастала по мере повторения закруток. В работе [13] это приписывалось росту сцепления первоначально проскальзывавших цилиндрических слоев трубок из-за искажения их формы и образования структурных дефектов при деформировании.

Опираясь на результаты предыдущего анализа задачи кручения в п. 5, обсудим здесь альтернативный механизм изменчивости упругих свойств при кручении. Слабая связь между графеновыми плоскостями в графите и графеновыми цилиндрическими слоями в нанотрубках отражается в чрезвычайно низком трении между слоями [14, 15]. Поэтому при кручении, сопровождающем сдвиговыми деформациями материала, вероятны структурные изменения политипного сорта, связанные с относительным сдвигом соседних графеновых слоев. В частности, это может быть изменение укладок слоев типа ABCABC... на укладки типа ABAB... с изменением симметрии ромбоэдрической на гексагональную. Согласно результату п. 5 жесткость кручения в ходе подобной перестройки будет меняться (модуль упругости  $c_{14}$  в гексагональной фазе исчезает).

Не менее вероятным представляется возникновение нарушения периодического порядка укладки графеновых слоев при сдвиговом деформировании, вызванном кручением. Это может проявляться сначала в виде одиночного нарушения, именуемого "де-

фектом упаковки". Далее по мере накопления таких сбоев периодичности может возникнуть неупорядоченная структура, известная в случае графита под именем "турбостратический графит". По упругим свойствам такой материал будет в среднем трансверсально изотропным. Поэтому отличие от гексагональной модификации может состоять только в величине пяти модулей упругости (наибольшего изменения можно ожидать в модуле  $c_{44}$ ).

На основании аналогии в молекулярном строении политипным модификациям графита должны соответствовать политипные модификации нанотрубок, например, "гексагональные, ромбоэдрические и турбостратические многослойные углеродные нанотрубки". Таким образом, углеродные нанотрубки можно классифицировать не только по величине их спиральности, как это сделано для однослойных трубок, но и по характеру упорядочивания графеновых нанослоев в многослойных углеродных трубках.

Выведенные выше формулы оценивались с точки зрения графитоподобных материалов. Однако представляют интерес их приложения и к другим материалам с гексагональной и ромбоэдрической симметрией, в том числе к неуглеродным нанотрубкам. Количественные результаты могут получаться совсем иными, поскольку графит является в значительной мере аномальным материалом.

Работа выполнена в рамках программы фундаментальных исследований ОЭММ-ПУ РАН № 13<sup>1</sup>.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Харрис П. Углеродные нанотрубки и родственные структуры. Новые материалы XXI века. М.: Техносфера, 2003. 336 с.
- Tibbetts G.G. Carbon fibers produced by pyrolysis of natural gas in stainless steel tubes // Appl. Phys. Lett. 1983. V. 42. № 8. P. 666–668.
- Tibbetts G.G. Why are carbon filaments tubular? // J. Crystal Growth. 1984. V. 66. № 3. P. 632–638.
- Лехницкий С.Г. Теория упругости анизотропного тела. М.: Гостехиздат, 1950. 301 с.
- Амбарцумян С.А. Теория анизотропных оболочек. М.: Физматлит, 1961. 386 с.
- Черных К.Ф. Введение в анизотропную упругость. М.: Наука, 1988. 190 с.
- Саркисян В.С. Некоторые задачи математической теории упругости анизотропного тела. Ереван: Изд-во Ереван. ун-та, 1976. 534 с.
- Qian D., Wagner G.J., Liu W.K. et al. Mechanics of carbon nanotubes // Appl. Mech. Rev. 2002. V. 55. № 6. P. 495–533.
- Ландай Л.Д., Лишиц Е.М. Теория упругости. М.: Наука, 1987. 248 с.
- Най Дж. Физические свойства кристаллов. М.: Мир, 1967. 388 с.
- Blakslee O.L., Proctor D.G., Seldin E.J. et al. Elastic constants of compression – annealed pyrolytic graphite // J. Appl. Phys. 1970. V. 41. № 8. P. 3373–3389.
- Новожилов Б.В. Теория упругости. М.: Судпромгиз, 1958. 388 с.
- Williams P.A., Papadakis S.J., Patel A.M. et al. Torsional response and stiffening of individual multiwalled carbon nanotubes // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 89. № 25. P. 255502(4).
- Cumings J., Zettl A. Low-friction nanoscale linear bearing realized from multiwall carbon nanotubes // Science. 2000. V. 289. № 5479. P. 602–604.
- Servantie J., Gaspard P. Methods of calculation of a friction coefficient: application to nanotubes // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 91. № 18. P. 185503(4).

Москва

Поступила в редакцию  
24.02.2005

<sup>1</sup> См. стр. 188.