

УДК 620.18

**КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЙ ПОДХОД ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ  
МЕХАНИЧЕСКИХ И ДЕФОРМАЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК  
НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ОБЪЕКТОВ**

© 2011 г.

*Е.А. Никитина, Ю.Н. Карнет*

Институт прикладной механики РАН, Москва

nikitina.ekaterina@gmail.com

*Поступила в редакцию 24.08.2011*

Квантово-механический подход применялся для исследования структуры, механических и деформационных характеристик наноструктурированных объектов. С применением кластерного подхода были разработаны методы расчета микроскопических координат деформации и трения. В рамках этих приближений исследовались углеродные наноструктуры – графен и углеродные нанотрубки, а также композиты, состоящие из полимерных матриц и наполнителей различной химической природы. Рассчитывались параметры (сила сдвиговой деформации, энергия взаимодействия в зоне контакта, модуль Юнга), которые позволяют установить взаимосвязь между эффективными характеристиками деформирования на макроуровне и параметрами наноструктуры.

*Ключевые слова:* квантово-механический подход, углеродные наноструктуры, композиты, сдвиговая прочность, модуль Юнга.

Настоящая работа направлена на компьютерно-ориентированное исследование структурных и механических характеристик нанообъектов, таких как углеродные наноструктуры – графен и углеродные нанотрубки, а также композитов, состоящих из полимерных матриц и наполнителей с модифицированной поверхностью, определяющих их прочность и позволяющих управлять механическими свойствами новых видов наноматериалов.

Химическая структура компонентов, микроскопический аспект процессов деформации и трения на поверхности раздела фаз, вызванных как механическими деформациями, так и адсорбцией, рассматривались в механохимическом моделировании в рамках кластерного приближения, в котором были реализованы подходы микроскопических деформации и трения [1, 2]. Расчет проводился с использованием оригинального пакета программ (ИПРИМ РАН) NDDO/sp-spd в параллельном режиме счета [3].

*Микроскопическая координата деформации.* Для моделирования перестройки структуры кластера при увеличении деформации вычислительный эксперимент был построен по аналогии с механическими испытаниями в режиме активного нагружения. Вначале осуществлялось построение и минимизация в квантово-механическом расчете микроскопической модели компонентов, а затем модели их комплекса. Далее выбира-

лась микроскопическая координата деформации (МКД), изменение которой позволило описать требуемую последовательность деформационных состояний. Микроскопическая координата деформации задавалась двумя группами атомов, определяющими плоскости приложения «деформирующей» силы, направление и вид деформации. Вычислительный эксперимент состоял в последовательной пошаговой деформации молекулярной системы от стабильного исходного состояния до разрыва связей и разрушения вдоль МКД. Приложенная сила определялась как градиент полной энергии системы по МКД.

*Микроскопическая координата трения.* Связь микроскопической структуры поверхности раздела фаз в композите с характеристиками ее напряженного состояния исследовалась в рамках подхода микроскопической координаты трения (МКТ). При этом микроскопическая координата трения задавалась двумя группами атомов в системе из двух частиц, определяющими направление и плоскости приложения силы трения. Положение одной частицы фиксировалось. Вычислительный эксперимент состоял в последовательном пошаговом перемещении одной из частиц относительно другой из исходного состояния вдоль МКТ. Микроскопическая сила трения определялась как градиент энергии системы по МКТ.

Отличительной особенностью представленного моделирования является сочетание наноско-

пического и макроскопического подходов. Пространственное строение наноструктур, их энергии и силы деформации рассчитываются на наноскопическом уровне в рамках квантово-механического метода. Далее, используя эти силы, можно рассчитывать характеристики деформации нанообъектов в рамках традиционного макроскопического подхода на основе соотношений линейной теории упругости. Хотя силы деформации здесь явно имеют наноскопический характер, такой подход хорошо зарекомендовал себя при изучении широкого ряда нанообъектов. В частности, в рамках квантово-механического подхода определяются зависимости теплоты образования системы  $\Delta H$  и сил деформации  $F_i$  каждой выбранной МКД от удлинения  $\Delta L$ . Эти данные используются для расчета характеристик деформации и разрушения наносистемы с использованием макроскопического закона Гука  $F = (ES/L_0)\Delta L = k\Delta L$ . Рассчитывались следующие характеристики:

- 1) сила деформации (суммарная)  $F = \sum F_i$ ;
- 2) коэффициент жесткости

$$k = F/\Delta L,$$

где  $\Delta L = (L - L_0)$  – удлинение;

- 3) приложенное напряжение

$$\sigma = F/S = \sum F_i/S,$$

где  $S$  – площадь нагружения;

- 4) модуль упругости (модуль Юнга)

$$E = (\sum F_i/S)(L_0/\Delta L) = \sigma/\epsilon,$$

где  $\epsilon = \Delta L/L_0$  – относительная деформация.

В качестве примера приведем результаты исследования деформации на границе раздела фаз в композитах, состоящих из каучуковых матриц (полиэтилена, полибутадиена и полиизопрена) и углеродного наполнителя. Для каждого модельного адсорбционного комплекса рассчитывалась зависимость силы деформации полимерной цепи, находящейся в контакте с частицей наполнителя от величины сдвига, а также зависимость силы трения от взаимного расположения частиц. Рассчитанные зависимости сил деформации и сил трения от удлинения и перемещения представлены на рис. 1. На рисунке обозначено: I – зависимость силы деформации от удлинения полимерной цепи в контакте с углеродной частицей, (*a* – полиэтилен, *б* – полибутадиен, *в* – полиизопрен); II – зависимость микроскопической силы трения от перемещения молекул олигомера вдоль поверхности частицы углерода (*г* – полиэтилен, *д* – полибутадиен, *е* – полиизопрен).

Из полученных данных видно, что кривые растяжения молекул полиэтилена, полибутадиена и изопрена в основном имеют общие закономерности. Первая часть, соответствующая малым

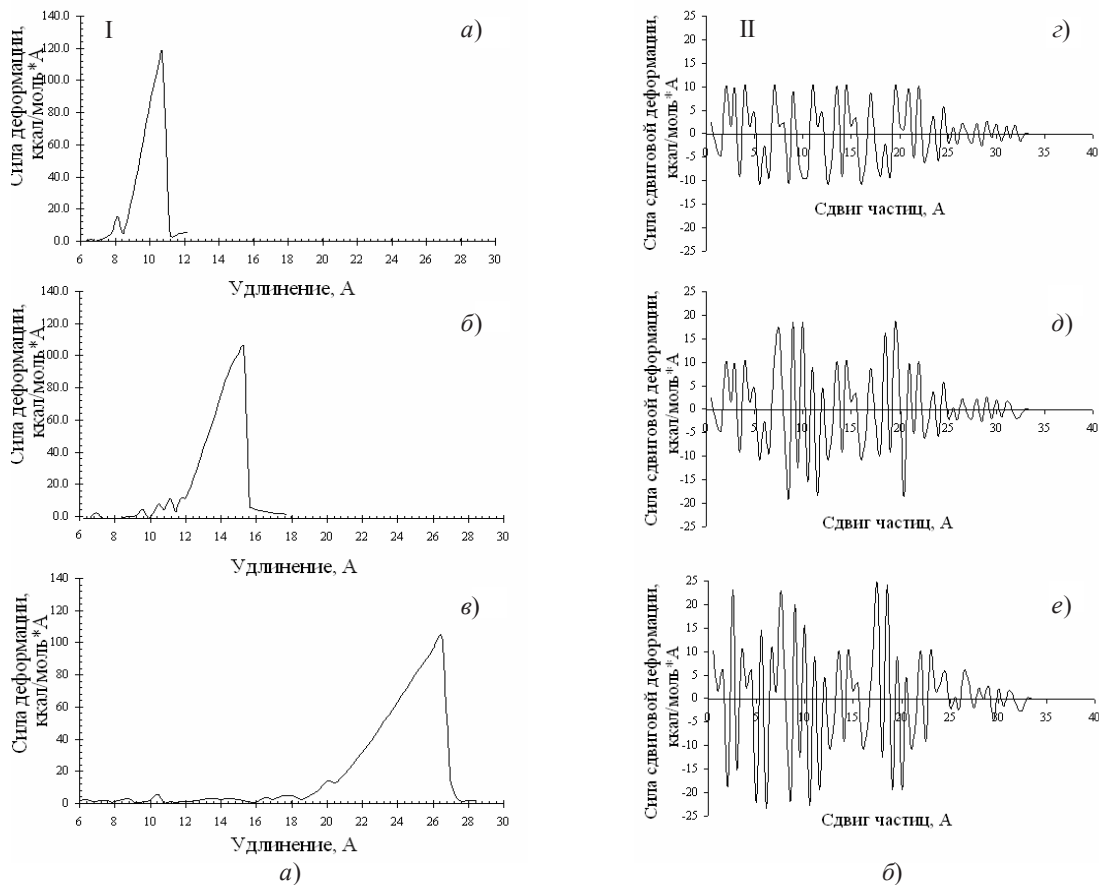


Рис. 1

растяжениям, является энтропийной областью торсионных конформационных изменений цепи полимеров и соответствует малым силам деформации. Затем следует гуковская или энтальпийная область, в которой в основном происходит деформация (удлинение) валентных связей. Эта область характеризуется резким возрастанием деформационных сил.

Максимум на кривой соответствует критической силе разрыва полимерной цепи. От полиэтилена, полибутадиена к изопрену удлиняется энтропийная область одноосной деформации и уменьшается критическая сила разрыва цепи. Это свидетельствует о растущих в рассматриваемом ряду эластических свойствах полимерных молекул, которые ярко выражены у полиизопрена.

Наилучшее сцепление с поверхностью частицы углеродного наполнителя наблюдается в случае разветвленной и гибкой молекулы изопрена и наихудшее – в случае полиэтилена. Таким образом, усиливающий эффект наиболее сильно

проявляется в комбинации изопрен-углеродный наполнитель и хуже – в комбинации полиэтилен-углеродный наполнитель.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 11-01-00932а).*

#### *Список литературы*

1. Яновский Ю.Г., Власов А.Н., Никитина Е.А., Карнет Ю.Н. Анализ теоретической прочности межфазных слоев адсорбционных комплексов полимерных композитных сред // Механика композиционных материалов и конструкций. 2007. Т. 13, №1. С. 33.

2. Yanovsky Yu.G., Nikitina E.A., Karnet Yu.N. Atomic-scale modeling of the chemical composition and surface modification impact on the structural, energy and strength properties of nanocomposites // Intern. J. of Nanomechanics Science and Technology. 2010. V. 1, No. 2. P. 127.

3. Оригинальный пакет квантово-механических программ NDDO/sp-sp<sub>d</sub> в параллельном режиме счета (ИПРИМ РАН, Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №209614949, 2009 г.).

### **QUANTUM-MECHANICAL APPROACH TO THE STUDY OF MECHANICAL AND DEFORMATION CHARACTERISTICS OF NANOSTRUCTURED OBJECTS**

*E.A. Nikitina, Yu.N. Karnet*

The quantum-mechanical approach was applied to the study of the structure, mechanical and deformation characteristics of nanostructured objects. Using the cluster approach, methods for calculating the microscopic origin of deformation and friction are developed. Within these approximations, carbon nanostructures were studied, namely, carbon nanotubes and graphene, as well as composites consisting of polymer matrix and fillers of different chemical nature. We calculated the parameters (shear strength, the interaction energy in the contact area, Young's modulus), which allow establishing the relationship between the effective deformation characteristics at the macro level and the parameters of the nanostructures.

*Keywords:* quantum-mechanical approach, carbon nanostructures, composites, shear strength, Young's modulus.