УДК 539.375, 539.32, 539.422.52

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИТА ГРАФЕН – УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ В РАМКАХ ДИСКРЕТНО-КОНТИНУАЛЬНОГО ПОДХОДА

© 2011 г.

А.В. Ченцов

Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва

chentsov@ipmnet.ru

Поступила в редакцию 16.06.2011

Выполнено моделирование механического поведения класса систем, содержащих одновременно углеродные нанотрубки и графеновые плоскости. Такой класс нанокомпозитов расширяет применения нанокомпозитов и иерархических систем на базе нанотрубок, комбинируя их с различными аллотропными формами углерода. В рамках дискретно-континуального подхода построена модель слоистой системы, представляющей собой набор массивов одностенных углеродных нанотрубок, разделенных графеновыми слоями. В ходе численных экспериментов энергетическим методом получены оценки эффективных упругих модулей для разработанной модели.

Ключевые слова: механические свойства, графен, нанотрубка, моделирование.

Механизм накопления энергии деформации с точки зрения атомной структуры материала зависит от типа определяющих потенциалов. Свой вклад дают ковалентные, ван-дер-ваальсовы, кулоновские, пи-электронные взаимодействия. Для построения приемлемых механических моделей можно воспользоваться определенными приближениями и ограничить учитываемые вклады. Описание поведения системы атомов возможно с помощью группы потенциалов, соответствующих разным видам взаимодействий. В основе моделирования механического поведения исследуемых нанообъектов лежит дискретно-континуальный подход [1, 2] с учетом условий связи между отдельными молекулами. В качестве нанообъектов используются углеродные нанотрубки, фрагменты графеновых плоскостей и их системы, деформационные и прочностные свойства которых требуется определять.

Введение в модель материала с нелинейной диаграммой деформирования вместе с алгоритмом построения пространственной сети связей позволили расширить методы дискретно-континуальной модели на молекулярные системы. В работе рассматриваются системы, содержащие одновременно массивы углеродных нанотрубок и графеновые плоскости, – так называемые этажерки.

Прототип модели

Прототипом модели стали исследования [3] и более поздние работы [4]. Разработанные группой В.А. Лабунова экспериментальные методики показали возможность создания наноструктур, состоящих из массива вертикально ориентированных углеродных нанотрубок и плоского графитового слоя, расположенного на нем сверху. Структура была получена высокотемпературным каталитическим пиролизом ацетилена при пониженном давлении (1000 Па) с использованием локализованного биметаллического катализатора кобальт – нитрид титана, нанесенного на подложку из кремния. Контролируя процесс производства, удается создавать упорядоченные системы углеродных нанотрубок и графеновых слоев.

Построение расчетных моделей

Каждая межатомная связь моделируется упругим стержнем с радиусом поперечного сечения 0.1 Å, соединяющим атомы молекулы. Коэффициент жесткости связи определяется видом описываемого взаимодействия нанотрубки с матрицей (ковалентного либо ван-дер-ваальсова) и рассчитывается из условия равенства энергии деформации связи и моделирующего ее стержня. Отметим, что значение жесткости стержня, представленной в виде эффективного модуля упругости, намного превосходит модуль упругости обычных конструкционных материалов, так как соответствует отдельным парным взаимодействиям атомов.

Силы ван-дер-ваальсова взаимодействия в системе молекул существенно ниже действую-

щих в системе ковалентных сил. Эта особенность позволяет рассмотреть отдельно систему молекул, в которой элементы связаны друг с другом ковалентными взаимодействиями, опуская при этом нековалентные взаимодействия между молекулами. Ранее для массива нанотрубок строилась модель, учитывающая нековалентные взаимодействия между нанотрубками, однако в отличие от системы, рассматриваемой в настоящем исследовании, отсутствие графеновых слоев не позволяло тогда ввести какое-либо ковалентное взаимодействие между молекулами системы.

В системе, содержащей одновременно массивы углеродных нанотрубок и графеновые плоскости, – этажерке – для связывания молекул системы между собой вводятся следующие условия. Связываемые атомы объединяются по пространственным степеням свободы и деформируются как единое целое. Связывание попарно осуществляется между атомами, расположенными в пределах 0.8 Å друг от друга. Так как при построении массива нанотрубок и графеновых плоскостей, граничащих с ним, соответствующие плоскости строятся совпадающими с границами открытых концов нанотрубок, принятые условия связывания приводят к тому, что только атомы одного кольца, составляющие конец нанотрубки, участвуют в связывании с графеновой плоскостью. Такой способ связывания представляется альтернативным по сравнению с выделением отдельных ковалентных взаимодействий между нанотрубками и графеновым слоем, при котором могут возникать дефекты решетки и качество связывания сильно зависит от совпадения положений связываемых атомов.

Численные эксперименты

Расчеты проводились на моделях отдельных нанотрубок и моделях массивов нанотрубок различного размера и длины. Эффективные модули рассчитывались энергетическим методом. Полная энергия деформации модели суммировалась из вкладов отдельных конечных элементов. Принятая номенклатура позволяет определять нанотрубку тремя числами – двумя индексами хиральности, определяющими вектор хиральности в плоскости гексагональной графеновой решетки, и третьим – длиной (в межатомных расстояниях) вектора оси нанотрубки, нормального к вектору хиральности.

В заключение приведем результаты численного эксперимента по определению модуля Юнга для этажерки – массива 4 на 5 трубок (20,20):10, четыре слоя и 20 трубок в слое (рис. 1).

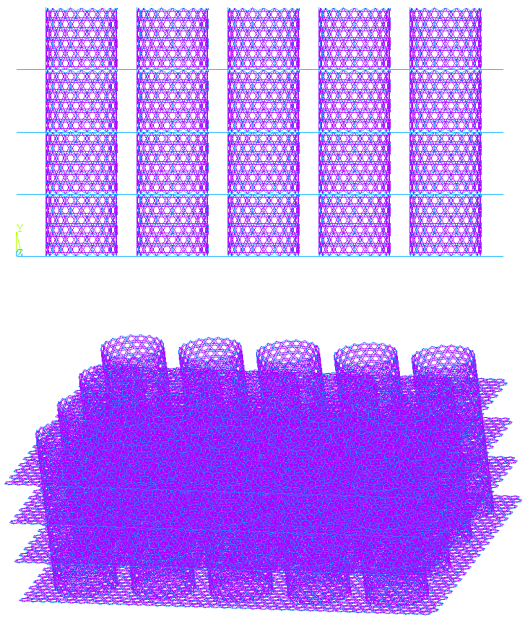

Рис. 1

Высота нагружаемой области $L = 53.96$ Å, радиус трубок $r = 7.869$ Å, расчетная толщина стенки $t = 3.4$ Å; перемещение верхнего края модели и деформация: $\Delta l = 0.05$ Å, $\varepsilon = \Delta l / L$; поперечное сечение нагружаемой области $L_x = 95.46$ Å, $L_z = 75.66$ Å. Количество трубок в слое n. Площадь сечения для модели эффективной трубки $S_t = 2\pi rtn$, площадь сечения для модели сплошного параллелепипеда $S_v = L_x L_z$. Энергия деформации равна W, тогда модуль Юнга для модели эффективной трубки $Y_t = = W/(S_t L\varepsilon^2)$, что составляет 947 ГПа, а модуль Юнга для модели сплошного параллелепипеда равен $Y_t = W/(S_v L\varepsilon^2) = 438$ ГПа.

Список литературы

1. Гольдштейн Р.В., Ченцов А.В., Кадушников Р.М., Штуркин Н.А. // Российские нанотехнологии. 2008. Т. 3, №1-2. С. 114–124.

2. Гольдштейн Р.В., Ченцов А.В. // Изв. РАН. МТТ. 2005. №4 С. 57–74.

3. Kondo D., Sato S., Awano Y. // Applied Physics Express. 2008. V. 1. P. 074003.

4. Labunov V.A. et al. // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. 2010. V. 13, No2. P. 137–141.

MODELING THE MECHANICAL PROPERTIES OF A COMPOSITE GRAPHENE–CARBON NANOTUBES IN THE FRAMEWORK OF A DISCRETE-CONTINUUM APPROACH

A.V. Chentsov

The mechanical behavior of a class of systems containing both carbon nanotubes and graphene planes is modeled. Such a class of composites expands the scope of application of nanocomposites and hierarchical systems based on nanotubes by combining them with various allotropic forms of carbon. Within the framework of a discrete-continuum approach a model of a layered system as a set of arrays of single-walled carbon nanotubes separated by graphene planes is constructed. In numerical experiments the estimates of effective elastic moduli for the constructed model are obtained.

Keywords: mechanical properties, graphene, nanotube, modeling.