

# 10, октябрь 2015

УДК 539.3

## **Установление связи упругих характеристик однослойной углеродной нанотрубки и графена**

*Сергеева Е.С., студент*

*Россия, 105005, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана,  
кафедра «Прикладная математика»*

*Научный руководитель: Зарубин В.С., д.т.н., профессор  
кафедра «Прикладная математика»,*

*Россия, 105005, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана  
[fn@bmstu.ru](mailto:fn@bmstu.ru)*

В настоящее время в качестве армирующего материала в композитах широкое применение получили углеродные нанотрубки (УНТ). Существуют различные математические модели, позволяющие на основе механических свойств нанотрубок определить механические свойства армированного ими композита. Даже при малых концентрациях армирующих элементов упругие характеристики композитов значительно улучшаются по сравнению с неармированным материалом [1, 2, 3]. Поэтому исследование и уточнение механических свойств ОУНТ является актуальной задачей.

Как известно, прообразом нанотрубки является графеновая плоскость. Графен представляет собой однослойную двумерную углеродную структуру, поверхность которой регулярным образом выложена правильными шестиугольниками со стороной 0,142 нм и атомами углерода в вершинах [4].

Графен в силу наличия более трёх осей симметрии расположения атомов в его плоскости следует считать изотропным в этой плоскости [5, 6, 7]. Поэтому упругие свойства графена в данной плоскости можно характеризовать двумя независимыми параметрами: продольным модулем упругости (модулем Юнга)  $E$  и коэффициентом поперечной деформации (коэффициентом Пуассона)  $\nu$ . Исследуем и установим взаимосвязь между упругими характеристиками однослойного графена в предположении его изотропии в плоскости шестиугольных ячеек и образованной из графена в виде цилиндрической оболочки однослойной углеродной нанотрубки (ОУНТ) в предположении её трансверсальной изотропии относительно продольной оси.

Для модуля сдвига в этой плоскости будет справедливо соотношение [24]

$$\mu = \frac{E(1 + \nu)}{2}. \quad (1)$$

Однослойную углеродную нанотрубку (ОУНТ) будем считать круговой цилиндрической оболочкой толщиной  $h$  и наружным диаметром  $D$ , свёрнутой из листа однослойного графена той же толщины. Тогда радиус срединной поверхности такой оболочки будет равен  $R = (D - h)/2$ .

Условную толщину  $h$  однослойного графена обычно связывают с диаметром атома углерода, принимая толщину равной 0.075 нм [9]. Ось ОУНТ обозначим  $Ox_3$ , а координатные оси в плоскости, перпендикулярной оси  $Ox_3$  – соответственно  $Ox_1$  и  $Ox_2$ . В силу изотропии графена упругие свойства ОУНТ в направлении осей  $Ox_1$  и  $Ox_2$  следует считать одинаковыми, т.е. плоскость, перпендикулярная оси  $Ox_3$ , должна быть плоскостью изотропии.

Тогда ОУНТ одновременно можно считать и круговой цилиндрической оболочкой и прямолинейным круглым стержнем диаметром  $D$ , обладающим свойством трансверсальной изотропии относительно продольной оси  $Ox_3$ .

Из напряженно деформированного состояния стержня и оболочки при нагружении силой  $P$ , растягивающей рассматриваемые объекты вдоль их продольной оси, получаем следующие соотношения, связывающие элементы матрицы коэффициентов податливости ОУНТ и упругие характеристики однослойного графена

$$S_{33} = \frac{1/4}{E(1 - \eta)\eta} \quad (2)$$

и

$$S_{13} = S_{23} = \frac{-\nu/4}{E(1 - \eta)\eta}, \quad (3)$$

где  $\eta = h/D$ .

При нагружении стержня и оболочки крутящим моментом  $M_3$ , действующим относительно продольной оси рассматриваемых объектов, из напряженно

деформированного состояния получаем следующие соотношения, связывающие элементы матрицы коэффициентов податливости ОУНТ и упругие характеристики однослойного графена

$$S_{66} = \frac{1/4}{(1 - \eta)^2 \eta \mu}, \quad (4)$$

$$S_{11} = S_{22} = \frac{1 - \eta}{4\eta E} + \frac{1/16}{(1 - \eta)^2 \eta \mu}, \quad (5)$$

$$S_{12} = S_{21} = \frac{1 - \eta}{4\eta E} - \frac{1/16}{(1 - \eta)^2 \eta \mu}. \quad (6)$$

При приложении касательных напряжений к одному из оснований стержня и оболочки, из напряженно деформированного состояния получаем следующие соотношения, связывающие элементы матрицы коэффициентов упругости ОУНТ и упругие характеристики однослойного графена

$$C_{44} = C_{55} = \mu \frac{4Rh}{D^2} = 2\mu\eta(1 - \eta). \quad (7)$$

Следует отметить, что аналогичный результат будет получен и в случае нагружения боковой поверхности участка стержня и оболочки касательными напряжениями, направленными вдоль продольной оси.

### Результаты расчетов

В качестве исходных данных возьмем несколько значений модуля Юнга  $E$  и соответствующие им значения коэффициента Пуассона  $\nu$  графена (табл. 1).

Таблица 1

Значения модуля Юнга  $E$  и коэффициента Пуассона  $\nu$  графена

Экспериментально полученные данные			Данные, полученные численно		
№	$E$ , ТПа	$\nu$	№	$E$ , ТПа	$\nu$
1	1,1 [10]	0,125 [10]	4	1,2 [13, 14]	0,412 [13, 14]
2	1,1 [11]	0,170 [11]	5	0,7 [13, 14]	0,397 [13, 14]
3	1,0 [12]	0,249 [12]	6	0,7 [13]	-0,158 [13]

Найдем значения элементов матрицы коэффициентов податливости для ОУНТ с Armchair структурой Zigzag структурой. В качестве исходных возьмем данные из таблицы 1. Для удобства анализа зависимости упругих характеристик ОУНТ от характеристик однослойного графена для исследуемых типов ОУНТ вычислим модуль Юнга  $E_N$ . Также выявим зависимость упругих характеристик ОУНТ от диаметра  $D_N$  ОУНТ.

Диаметр ОУНТ можно определить по формуле [15]

$$D = \frac{\sqrt{3}d_0}{\pi} \sqrt{m^2 + n^2 + mn},$$

где  $d_0 = 0,142$  нм – расстояние между соседними атомами углерода в графеновой плоскости,  $(n, m)$  – индексы хиральности ОУНТ, указывающие координаты шестиугольника, который в результате сворачивания графеновой плоскости должен совпадать с шестиугольником, находящимся в начале координат.

Результаты расчётов приведены в таблицах 2–3.

Таблица 2

Зависимость значений модуля Юнга  $E_N$  ОУНТ от хиральности и диаметра ОУНТ и значений упругих характеристик однослойного графена

Тип ОУНТ	Индексы хиральности	$D_N$ , нм	Модуль Юнга $E_N$ ОУНТ, ТПа					
			Упругие характеристики однослойного графена (нумерация из табл. 1)					
			1	2	3	4	5	6
Armchair	(4, 4)	0,54	0,43	0,44	0,41	0,54	0,31	0,23
	(6, 6)	0,81	0,30	0,31	0,29	0,38	0,22	0,16
	(8, 8)	1,09	0,23	0,24	0,23	0,29	0,17	0,12
	(10, 10)	1,36	0,19	0,19	0,18	0,24	0,14	0,09

Таблица 3

Зависимость значений модуля Юнга  $E_N$  ОУНТ от хиральности и диаметра ОУНТ и значений упругих характеристик однослойного графена

Тип ОУНТ	Индексы хиральности	$D_N$ , нм	Модуль Юнга $E_N$ ОУНТ, ТПа					
			Упругие характеристики однослойного графена					
			(нумерация из табл. 1)					
			1	2	3	4	5	6
Zigzag	(4, 0)	0,31	0,69	0,70	0,66	0,85	0,49	0,37
	(6, 0)	0,47	0,49	0,50	0,47	0,60	0,35	0,27
	(8, 0)	0,63	0,38	0,39	0,36	0,47	0,28	0,20
	(10, 0)	0,78	0,31	0,32	0,29	0,39	0,23	0,17

По данным из таблиц 2–3 построим график зависимости значений модуля Юнга  $E_N$  ОУНТ от хиральности и диаметра ОУНТ и значений упругих характеристик однослойного графена. (рис. 1)

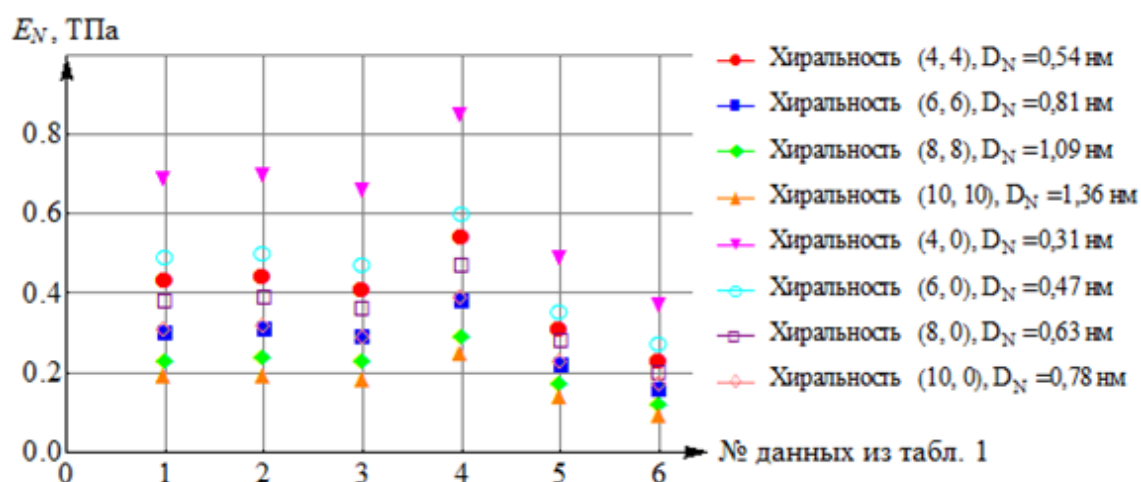


Рис. 1. Зависимость модуля Юнга  $E_N$  ОУНТ от хиральности и диаметра ОУНТ и значений упругих характеристик однослойного графена

Из рисунка 1 видно, что при всех значениях упругих характеристик однослойного графена значения модуля Юнга  $E_N$  для ОУНТ типа Zigzag, чем значения для ОУНТ типа Armchair. Установлен факт того, что при увеличении диаметра ОУНТ значениями модуля

Юнга ОУНТ  $E_N$  уменьшаются. Также выявлена обратная зависимость между индексами хиральности и значениями модуля Юнга ОУНТ  $E_N$ .

**Выводы.** Установлена взаимосвязь между упругими характеристиками однослойного графена в предположении его изотропии в плоскости шестиугольных ячеек и образованной из графена в виде цилиндрической оболочки однослойной углеродной нанотрубки (ОУНТ) в предположении её трансверсальной изотропии относительно продольной оси. Выведены зависимости между элементами матрицы коэффициентов податливости ОУНТ и упругими характеристиками однослойного графена. Выявлена обратная зависимость между индексами хиральности и значениями модуля Юнга ОУНТ  $E_N$ . Выявлена обратная зависимость между диаметром и значениями модуля Юнга ОУНТ  $E_N$ . Установлен факт того, что значения модуля Юнга  $E_N$  для ОУНТ типа Zigzag, чем значения для ОУНТ типа Armchair.

### Список литературы

1. Тарасова Е.С. Исследование механических свойств композитов, армированных углеродными нанотрубками // Молодежный научно-технический вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2014. № 7. Режим доступа: <http://sntbul.bmstu.ru/doc/728018.html> (дата обращения 26.02.2015).
2. Микитаев А.К., Козлов Г.В. Эффективность усиления полимерных нанокомпозитов дисперсными наночастицами // Materials Physics and Mechanics. 2014. № 21. Р. 51 – 57.
3. Микитаев А.К., Козлов Г.В. Перколяционная модель усиления нанокомпозитов полимер/углеродные нанотрубки // Materials Physics and Mechanics. 2015. № 22. Р. 101 – 106.
4. Елецкий А.В., Искандарова И.М., Книжник А.А., Красиков Д.Н. Графен: методы получения и теплофизические свойства // Успехи физических наук. 2011. Т. 181. № 3. С. 233 – 268.
5. Вустер У. Применение тензоров и теории групп для описания физических свойств кристаллов. М.: Мир, 1977. 384 с.
6. Сиротин Ю.Н., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1979. 640 с.
7. Новосёлов К.С. Графен: материалы Флатландии // Успехи физических наук. 2011. Т. 181. С. 1299 – 1311.
8. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Математические модели механики и электродинамики сплошной среды. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. 512 с.

9. Krishnan A., Dujardin E., Ebbesen T.W., Yianilos P.N., Treacy M.M.J. Young's modulus of single-walled nanotubes. // *Physical Review B*. 1998. N. 58. P. 14013 – 14019.
10. Bosak A., Krisch M., Mohr M., Maultzsch J., Thompsen C. Elasticity of single-crystalline graphite: in-elastic X-ray scattering study // *Phys. Rev. B*. 2007. V. 75. P. 153408 – 153412.
11. Blakslee O.L., Proctor D.G., Seldin E.J., Spence G.B., Weng T. Elastic constants of compression-an-nealed pyrolytic graphite // *J. Appl. Phys.* 1970. V. 41. № 8. P. 3373 – 3382.
12. Bowman J.C., Krumhansl J.A. The Low-Temperature Specific Heat of Graphite // *J. Phys. Chem. Solids*. 1958. V. 6. № 4. P. 367 – 379.
13. Беринский И.Е, Кривцов А.М. Об использовании многочастичных межатомных потенциалов для расчёта упругих характеристик графена и алмаза // *Механика твёрдого тела*. 2010. № 6. С. 60 – 85.
14. Erdemir A., Martin J.-M. Superlubricity. Amsterdam: Elsevier, 2007. 524 p.
15. Елецкий А.В. Углеродные нанотрубки и их эмиссионные свойства // *Успехи физических наук*. 2002. Т.172. № 4. С. 401 – 438.