

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИЙ НАНОТРУБОК ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ТИПАХ НАГРУЖЕНИЯ

д.ф.-м.н.¹Журавков М.А., к.ф.-м.н.¹Чумак Н.Г., к.ф.-м.н.²Мартыненко И.М.

¹УО «Белорусский государственный университет», Минск

²УО «Белорусский национальный технический университет», Минск

Наноматериалы среди новых перспективных материалов занимают особое место. Использование нанокompозитных материалов в различных областях современного производства представляется вполне оправданным, так как этим материалам, как правило, присущи высокие значения прочности и трещиностойкости, они обладают особыми деформационными свойствами и характеристиками. Во всем многообразии наноматериалов выделяются углеродные наноматериалы, такие как углеродные нанотрубки (УНТ). Они могут быть представлены как в форме отдельных нанообъектов, так и в виде совокупностей или набора частиц, погруженных в матрицу другого материала.

Углеродная нанотрубка (УНТ) представляет собой однослойную либо многослойную цилиндрическую оболочку (рисунок 1) диаметром от одного до нескольких десятков нанометров и длиной от одной десятой до нескольких десятков микрон.

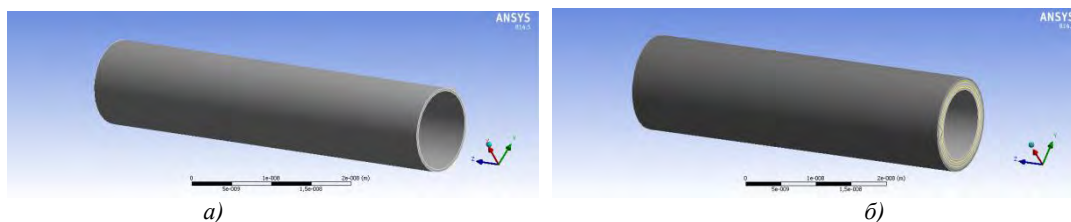


Рисунок 1.– Нанотрубки. а) однослойная б) пятислойная

Работа выполнена при поддержке БРФФИ (проект № Ф13К-154)

Однослойная нанотрубка может быть представлена в качестве тонкой цилиндрической оболочки [1, 2]. Механические свойства протяженной цилиндрической оболочки характеризуются модулями упругости, представляющими собой коэффициенты пропорциональности между напряжением и деформацией такой оболочки в некотором направлении. Модули упругости определяются при условиях малой нагрузки, когда деформация имеет упругий обратимый характер.

В данной работе рассматриваются такие виды деформации нанотрубок, как осевое растяжение и сжатие вдоль центральной оси нанотрубки, а так же поперечный изгиб (рисунок 2).

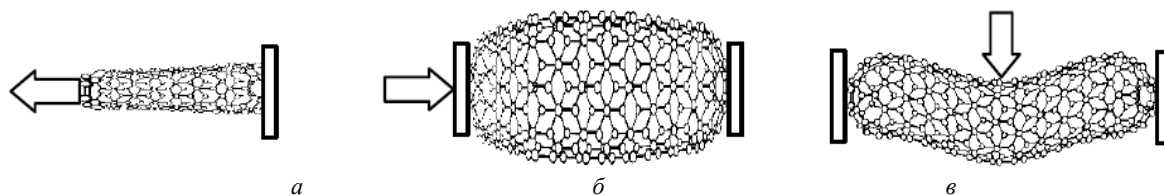


Рисунок 2.– Деформации нанотрубки: (а) осевое растяжение вдоль оси OZ; (б) осевое сжатие вдоль оси OZ; (в) поперечный изгиб

Наиболее важным параметром нанотрубки, характеризующим ее прочность на растяжение (рисунок 2а), является продольный модуль Юнга E , который можно определить из закона Гука [2]

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{N}{2\pi R h \varepsilon}, \quad (1)$$

где ζ – продольное напряжение, представляющее собой отношение продольного растягивающего усилия N , приложенного к нанотрубке, к площади ее поперечного сечения, ε – относительное растяжение (изменение длины) нанотрубки при таком напряжении, R – радиус нанотрубки, h – толщина ее стенок.

Модули упругости, соответствующие поперечным (изгибным) деформациям протяженной цилиндрической оболочки, выражаются через ее модуль Юнга E и коэффициент Пуассона ν . В соответствии с классической теорией упругости [1, 2], жесткость полого цилиндра по отношению к изгибу, определяемая как энергия, расходуемая для изгиба цилиндрической трубки на единичный угол, определяется следующей формулой:

$$D = \frac{E h^3}{12(1 - \nu^2)}, \quad (2)$$

где h — толщина стенок цилиндра.

При выполнении модельного анализа механических свойств УНТ в рамках механики сплошных сред и теории упругости, поверхность нанотрубки, составленная из атомов углерода, заменяется сплошной оболочкой, механические характеристики которой определяются исходя из соответствия результатам измерений или результатам последовательных расчетов. Такой подход на сегодня является наиболее распространенным при рассмотрении более сложных задач, относящихся, например, к установлению механических характеристик многослойных УНТ. Отметим, что в то же время такой подход является не единственным.

В качестве примера в таблице 1 [3] приведены результаты расчетов упругих характеристик для однослойных УНТ. Здесь (n_1, n_2) – индексы хиральности нанотрубки, R – ее радиус, B – объемный модуль упругости, E – модуль Юнга, M – модуль сдвиговой деформации (кручения относительно оси нанотрубки), ν – коэффициент Пуассона. Как следует из таблицы, расчетные значения модулей упругости УНТ весьма слабо чувствительны к ее геометрическим параметрам (диаметр и хиральность). Погрешность расчетов связана с неопределенностью значения толщины стенки нанотрубки и оценивается величиной порядка нескольких процентов.

(n_1, n_2)	R , нм	C_{11}	C_{33}	B , ТПа	E , ТПа	M , ТПа	ν
(5, 5)	0,34	0,397	1,054	0,191	0,971	0,436	0,280
(6, 4)	0,34	0,397	1,054	0,191	0,972	0,437	0,280
(7, 3)	0,35	0,397	1,055	0,190	0,973	0,454	0,280
(8, 2)	0,36	0,397	1,057	0,190	0,974	0,452	0,280
(9, 1)	0,37	0,396	1,058	0,191	0,974	0,465	0,280
(10, 0)	0,39	0,396	1,058	0,190	0,975	0,451	0,280
(10, 10)	0,68	0,398	1,054	0,191	0,972	0,457	0,278
(50, 50)	3,39	0,399	1,054	0,192	0,972	0,458	0,277
(100, 100)	6,78	0,399	1,054	0,192	0,972	0,462	0,277
(200, 200)	13,5	0,399	1,054	0,192	0,972	0,478	0,277
Графит, вдоль гексагональной плоскости		1,06		0,0083	1,02	0,44	0,16
Графит, перпендикулярно гексагональной плоскости			0,036	0,0083	0,0365	0,004	0,012
Алмаз, вдоль кубической оси		1,07	1,07	0,442	1,063	0,5758	0,10415

Таблица 1.– Параметры однослойных УНТ различной структуры, рассчитанные на основе эмпирической модели силовых постоянных

Из таблицы видно, что значения модулей упругости нанотрубки практически не зависят от ее диаметра и индексов хиральности. Такой вывод является естественным для расчетов, выполненных на основании эмпирической модели силовых постоянных.

Вместе с тем, следует заметить, что, согласно соотношению (2), результаты определения модулей упругости нанотрубок весьма чувствительны к значению толщины стенок цилиндрической оболочки, которой моделируется рассматриваемый объект.

Рассмотрим различные виды деформации однослойной и пятислойной нанотрубок при различных видах нагружения. При моделировании рассматривались нанотрубки со следующими характеристиками: однослойная - $R_{\min} = 5\text{ нм}$, $R_{\max} = 5,34\text{ нм}$, $L = 50\text{ нм}$; пятислойная - $R_{\min} = 5\text{ нм}$, $R_{\max} = 6,7\text{ нм}$, $L = 50\text{ нм}$. Расчетные значения модулей упругости УНТ брались из таблицы 1 при индексе хиральности нанотрубки (5, 5).

1. Поперечный изгиб однослойной и пятислойной нанотрубок под действием силы $F = 1 \cdot 10^{-6}$ Н, приложенной на поверхности цилиндра в направлении оси Ox нанотрубки при жесткой заделке на ее концах (рисунок 3).

Примеры расчетов приведены на рисунках 4 – 6.

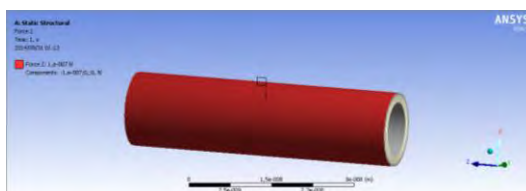


Рисунок 3.– Схема приложение силы $F = 1 \cdot 10^{-6}$ Н для пятислойной нанотрубки

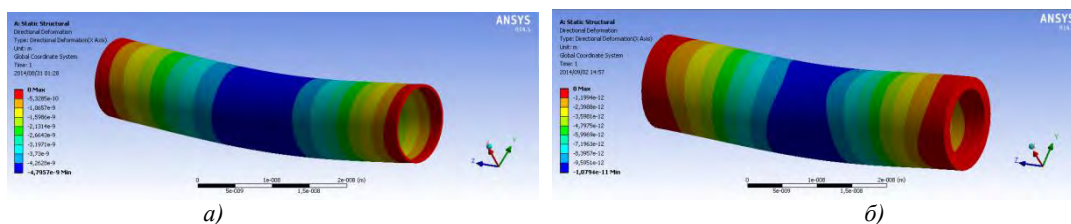


Рисунок 4.– Смещение вдоль оси Ox для: а) однослойной, б) пятислойной нанотрубок

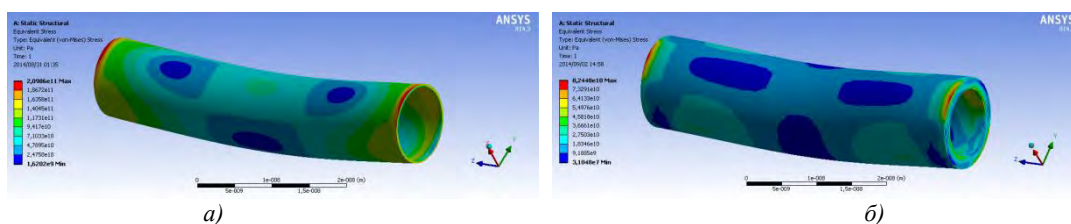


Рисунок 5.– Напряжения эквивалентные по Мизесу для: а) однослойной, б) пятислойной нанотрубок

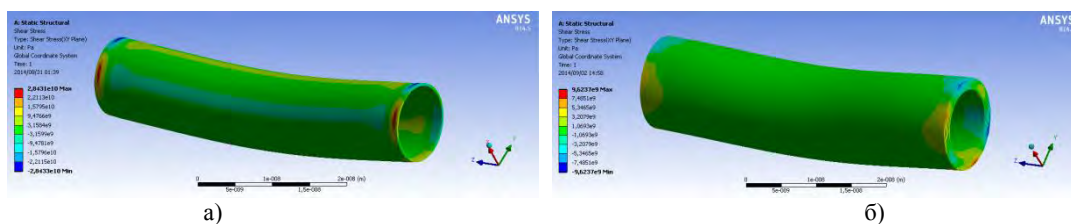


Рисунок 6.– Сдвиговые напряжения для: а) однослойной, б) пятислойной нанотрубок

2. Растяжение нанотрубки вдоль центральной оси.

При растяжении цилиндрической оболочки обычно происходит сокращение ее поперечного размера. Это свойство характеризуется коэффициентом Пуассона ν , величина которого определяется как отношение относительного поперечного сжатия $\tilde{\varepsilon}$ к относительному продольному растяжению ε :

$$\nu = \frac{\tilde{\varepsilon}}{\varepsilon}. \quad (3)$$

При этом величина ν не может превышать 0,5 из физических соображений [3].

Рассмотрим осевое растяжение одно, двух и пятислойной нанотрубок вдоль оси OZ при действии силы $F = 1 \cdot 10^{-6}$ Н, приложенной к одной из граней при жесткой заделке по другой грани (рисунок 7).

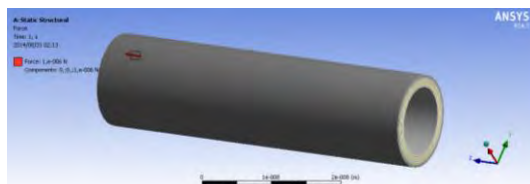


Рисунок 7.– Схема приложение силы $F = 1 \cdot 10^{-6}$ Н для пятислойной нанотрубки при осевом растяжении

Результаты моделирования представлены на рисунок 8 – 10.

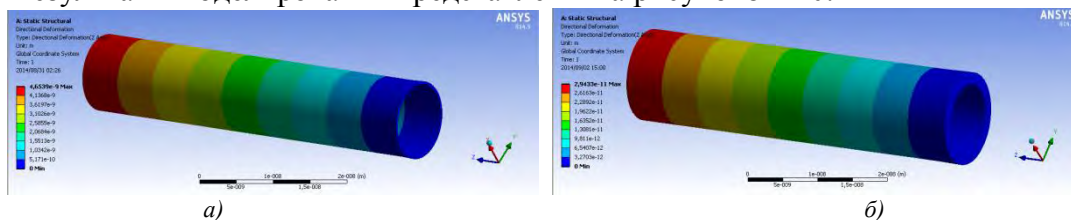


Рисунок 8.– Смещение вдоль оси OZ для: а) однослойной, б) пятислойной нанотрубок

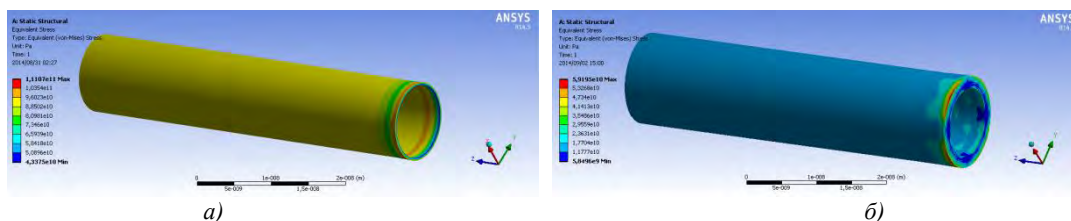


Рисунок 9.– Эквивалентные по Мизесу напряжения для: а) однослойной, б) пятислойной нанотрубок

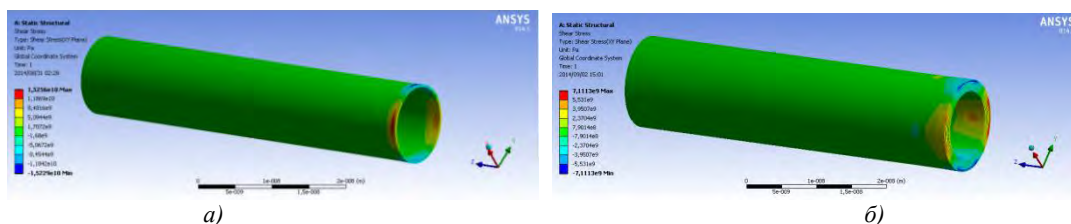


Рисунок 10.– Сдвиговые напряжения для: а) однослойной, б) пятислойной нанотрубок

3. Сжатие нанотрубки вдоль центральной оси.

Модули упругости, соответствующие сжатию и растяжению цилиндрической оболочки, выражаются через вторую производную от этой зависимости в точке минимума и в рамках классической теории упругости эти величины равны друг другу.

Однако растяжение и сжатие УНТ являются симметричными процессами только при бесконечно малых нагрузках, которые не нарушают структуру УНТ. При достаточно большом сжимающем усилии происходит резкое изменение структуры оболочки, которая сжимается в "гармошку". Такое сжатие, сопровождающееся изменением структуры, носит название "эйлеровской деформации" и имеет характер

неустойчивости. Порог данной неустойчивости характеризуется величиной предельного сжимающего усилия.

Рассмотрим осевое сжатие вдоль оси OZ для одно, двух и пятислойной нанотрубок при действии, как и в предыдущем случае, силы $F = 1 \cdot 10^{-6}$ Н, приложенной к одной грани при жесткой заделке на другой грани.

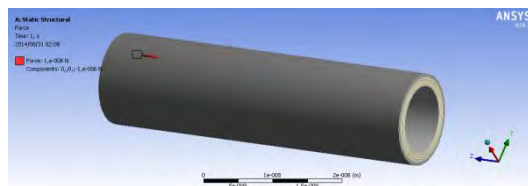


Рисунок 11.– Схема приложение силы $F = 1 \cdot 10^{-6}$ Н для пятислойной нанотрубки при осевом сжатии

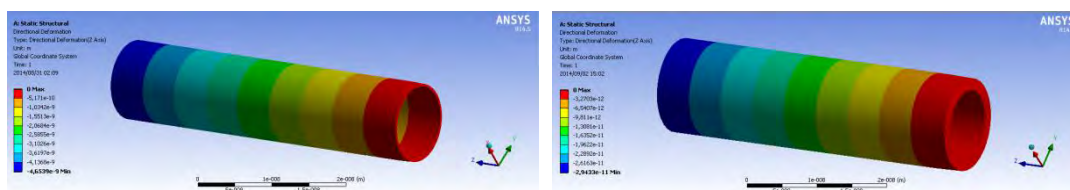


Рисунок 12.– Смещение вдоль оси OZ для: а) однослойной, б) пятислойной нанотрубок

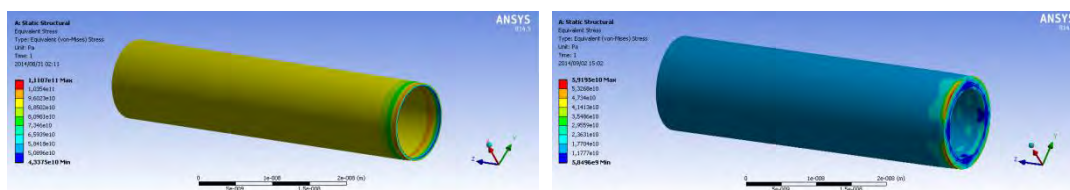


Рисунок 13.– Эквивалентные по Мизесу напряжения для: а) однослойной, б) пятислойной нанотрубок

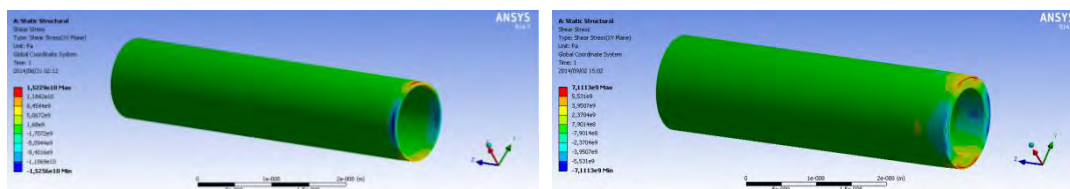


Рисунок 14.– Сдвиговые напряжения для: а) однослойной, б) пятислойной нанотрубок

4. Прочность нанотрубок.

Согласно измерениям, опубликованным в [4], значение изгибной прочности многослойных УНТ оказалось равным $14,2 \pm 0,8$ ГПа. Для однослойной это значение составляет $31,2 \pm 0,6$ ГПа. Столь высокое значение изгибной прочности УНТ связано с их повышенной гибкостью. Значение прочности на разрыв однослойной нанотрубки имеет значения 45 ± 7 ГПа, а для многослойной – $1,72$ ГПа. Значение прочности при сжатии выбираем в соответствии с результатами экспериментов, приведенных в [4, 5, 6]: для пятислойной нанотрубки – $1,6$ ГПа, а для однослойной – 40 ГПа.

Вычислим коэффициент напряжений, характеризующий запас прочности нанотрубок при изгибе, растяжении и сжатии, используя значения приведенных предельных напряжений. Значение усилия, действующего на нанотрубку, принимаем как и ранее равным $F = 1 \cdot 10^{-6}$ Н.

Коэффициент напряжений $\sigma_{1\max}^*$ будет рассчитывать как отношение вычисленного значения напряжений к их предельным значениям.

Результаты вычислений представлены на рисунках 15 – 17.

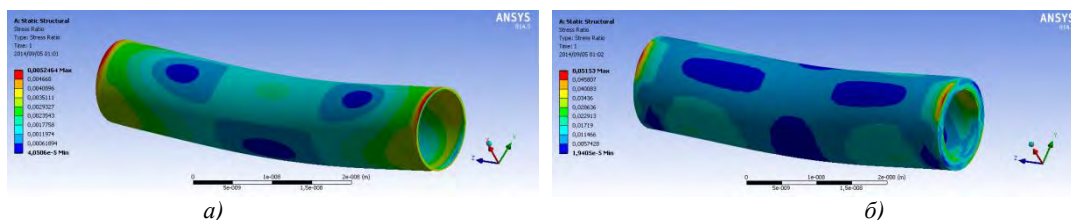


Рисунок 15.– Максимальные эквивалентные напряжения при изгибе: а) однослойной, б) двухслойной, в) пятислойной нанотрубок

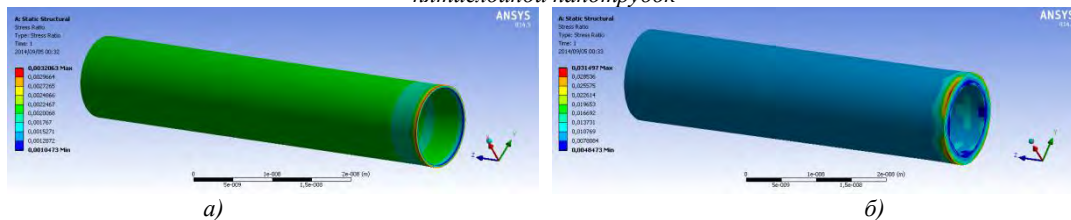


Рисунок 16.– Коэффициент напряжений при растяжении для: а) однослойной, б) пятислойной нанотрубок

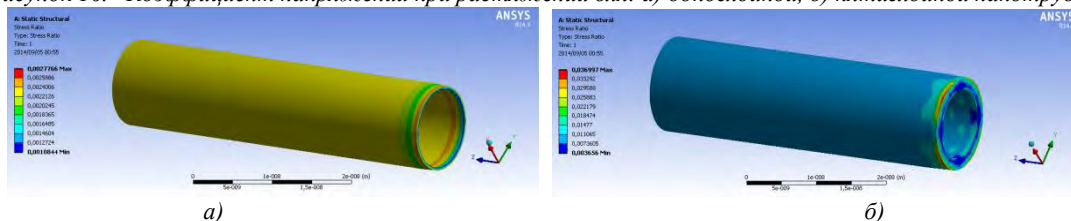


Рисунок 17. Коэффициент напряжений при сжатии для а) однослойной, б) пятислойной нанотрубок

Вывод. Выполнено компьютерное моделирование деформирования однослойной и пятислойной нанотрубок при различных типах их нагружения. Показано, что запас прочности у однослойной нанотрубки выше, чем у пятислойной. При этом коэффициент напряжений $\sigma_{1\max}^*$ при различных видах нагружения для однослойной нанотрубки оказался меньше на 10% по сравнению с пятислойной.

РЕЗЮМЕ

В работе на основе компьютерного моделирования выполнено исследование напряженно-деформированного состояния одна и пятислойных углеродных нанотрубок при индексе хиральности (5, 5) при различных типах их деформирования (осевом растяжении, сжатии, поперечном изгибе). Рассчитан коэффициент напряжения, характеризующий запас прочности нанотрубок.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л.Д, Лифшиц Е.М. Теория упругости. М.: Наука, 1965.– С. 204
2. Тимошенко С.П, Гудьер Дж. Теория упругости. М.: Мир, 2-е изд.,1972.– С.576
3. Lu J. P. Phys. Rev. Lett. 79 1297 (1997)
4. Wong E W, Sheehan P E, Lieber Ch M Science 277 1971 (1997)
5. Venkateswaran U D et al. Phys. Rev. B 59 10928 (1999)
6. Gaal R, Salvetat J-P, Forro L Phys. Rev. B 61 7320 (2000)

SUMMARY

In the work on the basis of computer modeling a study of the stress-strained state single- and double-wall carbon nanotubes with chirality index (5,5) under various types of deformation have been performed. The stress ratio that characterizing the strength of the nanotubes have been calculated.

E-mail: Zhuravkov@bsu.by

Поступила в редакцию 10.10.2014