

УПРУГИЕ СВОЙСТВА ФУЛЛЕРЕНА C₂₀

Нагорный Ю.Е., Расюкевич Е.А., Репченков В.И., Чижик С.А.

Белорусский государственный университет, Минск

The mathematical model of mechanical behaviour of the fullerene C₂₀ is constructed and realised in a package "Mathematica" at static loading in case of small deformations. Valency interaction the neighbour-them of atoms and molecular two more remote was considered. Consideration is spent within the limits of the theory of the central interaction and the valence-force-field theory. Estimations of the Young's modulus E of structure in a case when loading are made by axial and radial forces. At axial compression the Young's modulus is close to the modulus 20 – atoms nanotube (0.601 TPa). At radial loading $0.00540 \text{ TPa} < E < 7.87 \text{ TPa}$ (the scheme of the central forces), $0.00269 \text{ TPa} < E < 3.93 \text{ TPa}$ (the valence-force scheme)

Фуллерен C₂₀ представляет собой минимальную пространственную замкнутую структуру углерода, содержащую 20 атомов, каждый из которых лежит в вершине выпуклого пятиугольника (Рис. 1). Расчёты показывают, что длины отрезков, соединяющих соседние атомы, лежат в диапазоне значений характерных для графита – 1.430 Å и алмаза – 1.540 Å и отличаются от среднего значения на несколько процентов. Однако твёрдо установленные данные на это счёт пока отсутствуют. Поэтому в данной работе за основу принята идеальная геометрическая модель C₂₀ в виде додекаэдра.

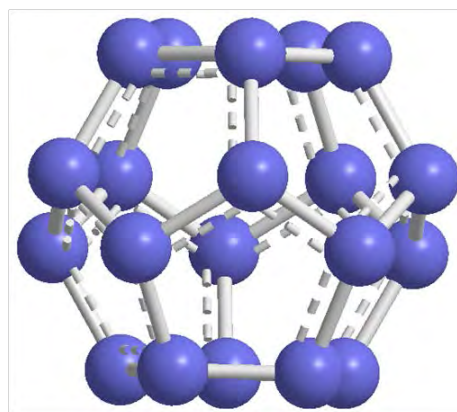


Рис. 1. Модель фуллерена C₂₀

Координаты атомов рассчитывались в глобальной декартовой системе координат ориентированной так, чтобы плоскость xOy совпадала с одним из пятиугольников (нижним) (рис. 2), а начало отсчёта лежало в его центре. Если спроецировать все вершины на плоскость xOy получится картина, представленная на рис. 3. Здесь же приводится нумерация

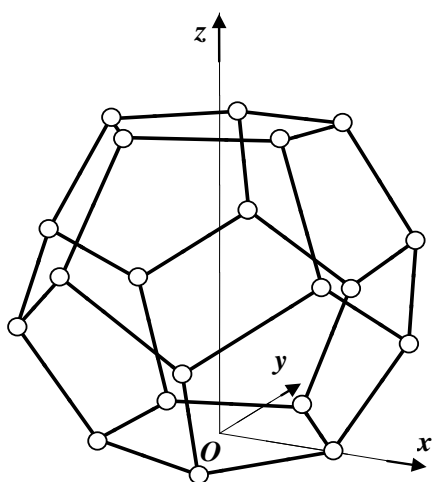


Рис. 2. Фуллерен C₂₀ в декартовой системе координат

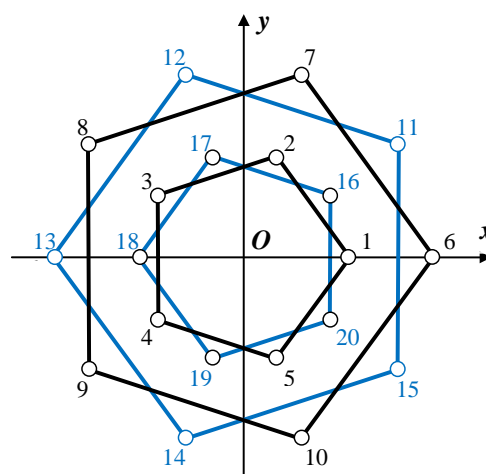


Рис. 3. Проекция узлов на плоскость xOy

атомов. Первые пять из них лежат в плоскости $z_i = 0$. Следующие образуют пятиугольник большего размера и принадлежат плоскости $z_i = a\sqrt{2/(5-\sqrt{5})}$. Атомы с 11-го по 15-ый расположены ещё выше при $z_i = a\sqrt{(\sqrt{5}+2)/\sqrt{5}}$. Наконец, последний пятиугольник образует плоскость $z_i = a\sqrt{10+22/\sqrt{5}}/2$. Приведём значения остальных координат:

$$\begin{aligned}
 x_i &= \frac{a}{2 \sin \frac{\pi}{5}} \cdot \cos \frac{2\pi(i-1)}{5}, & y_i &= \frac{a}{2 \sin \frac{\pi}{5}} \cdot \sin \frac{2\pi(i-1)}{5}, & z_i &= 0, & i &= \overline{1,5}, \\
 x_i &= a \cdot \operatorname{ctg} \frac{\pi}{5} \cdot \cos \frac{2\pi(i-1)}{5}, & y_i &= a \cdot \operatorname{ctg} \frac{\pi}{5} \cdot \sin \frac{2\pi(i-1)}{5}, & z_i &= a \sqrt{\frac{2}{5-\sqrt{5}}}, & i &= \overline{6,10}, \\
 x_i &= a \cdot \operatorname{ctg} \frac{\pi}{5} \cdot \cos \frac{\pi(2i-1)}{5}, & y_i &= a \cdot \operatorname{ctg} \frac{\pi}{5} \cdot \sin \frac{\pi(2i-1)}{5}, & z_i &= a \sqrt{\frac{\sqrt{5}+2}{\sqrt{5}}}, & i &= \overline{11,15}, \\
 x_i &= \frac{a}{2 \sin \frac{\pi}{5}} \cdot \cos \frac{\pi(2i-1)}{5}, & y_i &= \frac{a}{2 \sin \frac{\pi}{5}} \cdot \sin \frac{\pi(2i-1)}{5}, & z_i &= \frac{a}{2} \sqrt{10 + \frac{22}{\sqrt{5}}}, & i &= \overline{16,20}.
 \end{aligned}$$

(1)

где a – длина ребра додекаэдра (валентной связи).

Механическая модель формировалась по двум схемам: центральных сил и валентно-силовой [1]. В первом случае структурным элементом является одномерный упругий элемент [2], который применяется для описания взаимодействия, как соседних атомов, так и более удалённых. Во втором случае одномерный упругий элемент ставился в соответствие валентным связям, а угловой элемент [3] моделировал взаимодействие между направленными валентностями.

Поверхность фуллерена можно «разрезать» вдоль связей **1 – 6 – 11 – 16**, «растянуть» отдельные участки и перевести её в плоскую до получения структуры изображённой на рис. 3. Здесь же показана глобальная нумерация степеней свободы и выбор системы координат

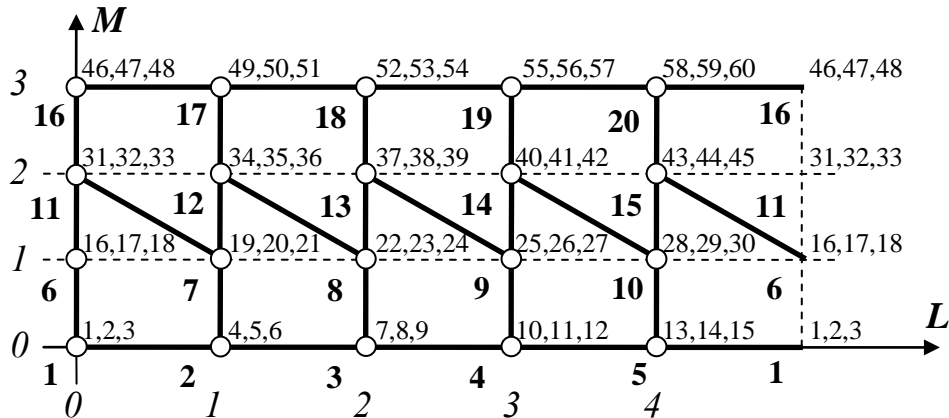


Рис. 4. Глобальная нумерация узлов и степеней свободы

LOM для векторной параметризации номеров объектов [4]. Приведём формулу вычисления номеров узлов системы через параметры:

$$I = \bar{a}_e^T \cdot \bar{b}_{se} + c = [L \quad M] \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 5 \end{bmatrix} + 1, \quad (2)$$

где $L = \overline{0,4}$, $M = \overline{0,3}$;

\bar{a}_e – вектор координат элемента;

\bar{b}_{se} – вектор шагов нумерации;

c – константа, определяющая начало отсчёта.

Приведенные выше данные – декартовы координаты узлов, матрицы жёсткости элементов, нумерация элементов и степеней свободы позволяют сформировать матрицу жёсткости системы. Реализация алгоритмов МКЭ осуществлялась в пакете “Mathematica”.

Выполнены численные эксперименты по статическому нагружению фуллерена C_{20} и двадцатиатомной нанотрубки. Схемы нагружения одинаковыми силами показаны на рис. 5, 6. Нанотрубка выбрана в качестве объекта сравнения поскольку для неё можно ввести определения упругих модулей [5]. Кроме того, обе системы состоят из одинакового количества атомов и имеют близкие размеры: диаметр фуллерена $D_f=0.391$ нм, высота $H_f=0.316$ нм, у трубки $D_t=0.398$ нм, $H_t=0.284$ нм. Модуль Юнга трубки равен 0.601 ТПа в модели центрального взаимодействия и 0.527 ТПа в модели валентно-силового поля [5]. Предположим, что силовые коэффициенты обеих систем одинаковы. Вычисления показывают, что смещения крайних атомов фуллерена и нанотрубки при одинаковой нагрузке в случае теории центрального взаимодействия практически совпадают. В теории валентно-силового поля соответствующие смещения фуллерена примерно на 40 % больше чем у трубки. Таким образом, жёсткость фуллерена сравнима с продольной жёсткостью нанотрубки. Попутно отметим, что нанотрубка обнаруживает очень высокую податливость при нагружении вдоль диаметра. Соответствующие смещения более чем на порядок превосходят осевые при одинаковой суммарной нагрузке.

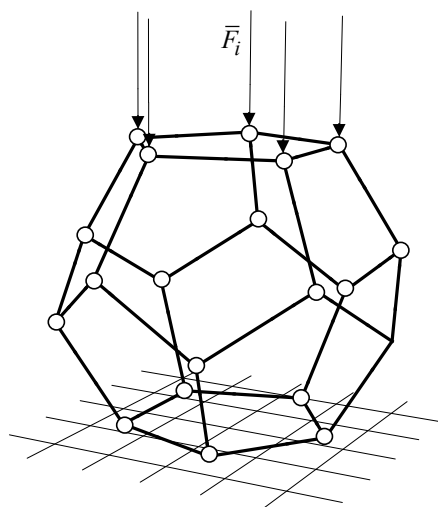


Рис. 5. Фуллерен C_{20} под действием равномерной осевой нагрузки

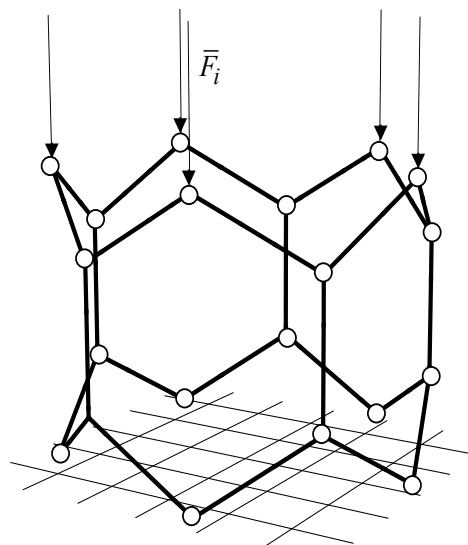


Рис. 6. 20-атомная нанотрубка типа “зигзаг” под действием равномерной осевой нагрузки

Следуя установившимся подходам [6], проведём так же формальное сопоставление численных решений для фуллерена с аналогичными аналитическими решениями линейной теории упругости. Отметим, что к настоящему времени исследования, посвящённые механике C_{20} практически отсутствуют [6]. Рассмотрим задачу о нагружении шарового слоя равномерным наружным давлением в предположении изотропии упругих свойств фуллерена. Аналитическое решение имеет вид [7]:

$$u = \frac{-pR_2^3}{E(R_2^3 - R_1^3)} \left(r(1 - 2\nu) + R_1^3 \frac{1 + \nu}{2r^2} \right), \quad (3)$$

где u – радиальное смещение;

p – внешнее давление;

R_1, R_2 – внутренний, внешний радиус слоя;

E, ν – модуль Юнга, коэффициент Пуассона материала.

Схема нагружения фуллерена, соответствующая этой задаче, выбиралась следующим образом. Величины узловых сил, направленных вдоль радиуса описанной сферы, вычислялась по формуле:

$$F_i = \frac{p \cdot 4\pi R_2^2}{20}. \quad (4)$$

Граничные условия, обеспечивающие исключение движения системы как целого, состояли в закреплении всех узлов основания по вертикали, 3-го и 4-го узлов – по направлению вдоль оси Ox , 3-го узла – вдоль оси Oy . Соответственно обнулялись надлежащие проекции узловых сил.

Узловые смещения фуллерена получаются после решения задачи

$$[k'] \cdot \bar{U} = \bar{F}, \quad (5)$$

где $[k']$ – матрица разрешающей системы уравнений. Выделив из вектора \bar{U} изменение радиуса фуллерена и приравняв его к смещению точек срединной поверхности шарового слоя, можно получить зависимость между параметрами $E, \nu, h = R_2 - R_1$. В качестве «толщины стенки» h однослойной каркасной углеродной структуры обычно выбирается удвоенный радиус действия молекулярных сил в ортогональном направлении [6]. На рис. 7 показан график зависимости модуля Юнга от величины параметров ν, h в модели центрального взаимодействия. Принято, что $0 < \nu < 0.5$, а $1 \text{ \AA} < h < 3.4 \text{ \AA}$, где верхняя граница для h – удвоенный радиус действия молекулярных сил графена. На рис. 8 приведено сечение предыдущего графика, полученное при $h = 1.5 \text{ \AA}$ – длине связи $[1+1]$ между фуллеренами, в «кластерной молекуле» $(C_{20})_2$ [8]. Из первого графика видно, что E монотонно возрастает по мере уменьшения ν и h , изменяясь в пределах $0.00540 \text{ ТПа} < E < 7.87 \text{ ТПа}$. Второй график более реалистичен и даёт более узкий диапазон для модуля Юнга: $0.845 \text{ ТПа} < E < 5.22 \text{ ТПа}$. Эти результаты позволяют сделать заключение, что жёсткость фуллерена в радиальном направлении превышает его жёсткость в осевом направлении.

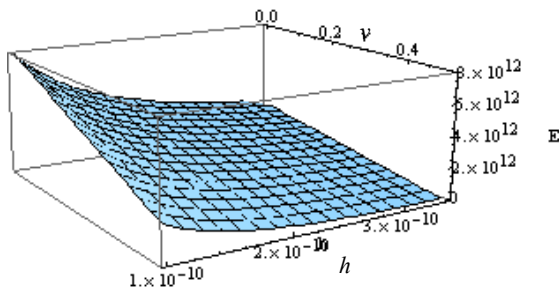


Рис. 7. График зависимости модуля Юнга от коэффициента Пуассона ν и «толщины стенки» h (схема центрального взаимодействия)

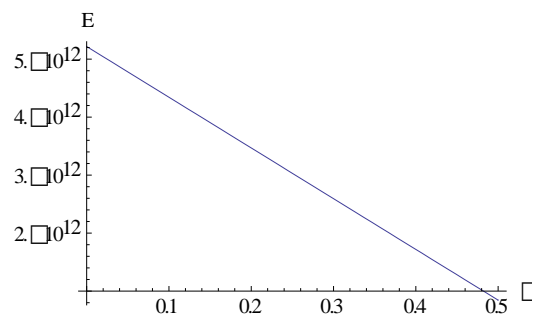


Рис. 8. График зависимости модуля Юнга от коэффициента Пуассона ν при $h = 1.5 \text{ \AA}$

Зависимость модуля Юнга от ν, h в случае применения валентно-силовой схемы показана на рис. 9. Естественно, характер изменения E остался прежним, но поменялись пределы изменения. Они уменьшились практически вдвое: $0.00269 (0.420) \text{ ТПа} < E < 3.93$

(2.60) ТПа, где в скобках указаны минимальное и максимальное значения модуля Юнга при $h = 1.5 \text{ \AA}$.

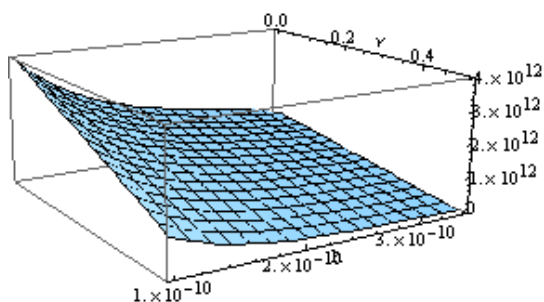


Рис. 9. График зависимости модуля Юнга от коэффициента Пуассона ν и “толщины стенки” h (валентно-силовая схема)

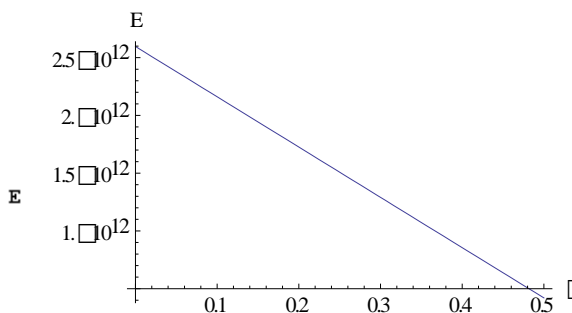


Рис. 10. График зависимости модуля Юнга от коэффициента Пуассона ν при $h = 1.5 \text{ \AA}$.

Такое большое различие в величинах упругих коэффициентов в разных моделях для C_{20} при равномерном радиальном нагружении вызвано тем, что атомы, сместившись по радиусам, остаются на сфере, а это означает, что валентные углы не меняются и, следовательно, угловые элементы не работают. Вклад в упругие свойства даёт только силовой коэффициент валентной связи.

Литература

1. Коптев Г.С., Пентин Ю.А. Расчёт колебаний молекул. МГУ, 1977.
2. Репченков В.И., Нагорный Ю.Е., Сыроежкин С.В. // Применение МКЭ к моделированию наноструктур. Мн.: Белгосуниверситет, 2005. 19 с. Деп. в БелИСА.
3. Нагорный Ю.Е., Репченков В.И., Сыроежкин С.В., Чижик С.А. // Расчёт механических свойств графена в модели валентно-силового поля // Теоретическая и прикладная механика : Сб. ст. — 2007, вып 22, с. 182-186
4. Репченков В. И., Нагорный Ю. Е., Репченкова Е. В. Векторная параметризация номеров степеней свободы и номеров элементов в МКЭ. – Белгосуниверситет. Мн., 2003. – 13 с. – Деп. в БелИСА 14 июня 2003 г., № 200344
5. Нагорный Ю.Е., Репченков В.И., Чижик С.А. // Сравнительный численный анализ механического поведения нанотрубки в случае применения разных механических моделей. // Теоретическая и прикладная механика: Сб. ст. — 2008. , вып 23, с. 157-159
6. Елецкий А. В. // Механические свойства углеродных наноструктур и материалов на их основе // Усп. физ. наук, 2007, т. 177, №3
7. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. // Теоретическая физика Т VII. – М.: Наука, 1987. – С. 33-34
8. Подливаев А. И., Опенов Л. А. // Образование “кластерной молекулы” $(C_{20})_2$ и её термическая устойчивость. // Физика твёрдого тела 2006, том 46, вып. 11, с. 2104-2110.