

СРАВНЕНИЕ УПРУГИХ ХАРАКТЕРИСТИК УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ МОДЕЛЯХ И ПРИМЕНЯЕМЫХ СХЕМАХ НАГРУЖЕНИЯ

Нагорный Ю.Е., Оковитый А.В., Репченко В.И.

A carbon nanotube of the "zigzag" approximation to the valence-force field and the field of central forces in different schemes of loading is considered (longitudinal tension-compression, uniform pressure to the side wall and bending the circular ring with two concentrated forces acting along the diameter). The geometry is calculated and digitization with the elements of elastic segment and elastic corner is made. Numerical experiments to determine the Young's modulus and Poisson's ratio as a function of the geometric parameters were carried out.

1. Композиционные конструкционные материалы на основе углеродных наноструктур. Комплекс механических свойств материалов включает в себя прежде всего упругость, пластичность, прочность и твердость. Соответствующая информация является с необходимостью востребованной при проектировании любого объекта. Технологическое развитие на каждом этапе ставит задачи создания все новых и новых конструкционных материалов с механическими свойствами максимально подходящими для условий функционирования объекта.

Существует два пути улучшения и оптимизации характеристик материалов – создание новых веществ с помощью химических технологий и разработка многокомпонентных систем в виде композитов. В настоящее время активно развивается направление, связанное с использованием в качестве армирующей компоненты наноразмерных структур, в частности, углеродных. Это обусловлено их уникальными механическими свойствами: жесткостью на уровне 1-10 ТПа, высокой прочностью. В наибольшей степени сейчас получило развитие производство нанотрубок. Себестоимость вышла на уровень сотен долларов за килограмм и снижается, а объем производства оценивается в несколько тонн и растет.

Возможность управления свойствами композиционных конструкционных материалов предполагает знания механики и геометрии их составляющих. На сегодняшний день, несмотря на значительное число теоретических и экспериментальных работ, посвященных исследованию механических свойств графена, нанотрубок и фуллеренов приходится констатировать, что пока получена лишь самая общая информация. Фактически, определены лишь упругие модули, характеризующие растяжение-сжатие, причем в предположении об изотропности свойств, что является достаточно грубым приближением. Например, модули Юнга и коэффициенты Пуассона нанотрубок с границами типа «зигзаг» и «кресло» при работе на растяжение-сжатие различаются примерно в полтора раза. Кроме этого теоретические исследования ведутся в приближении поля центральных сил (ПЦС) или валентно-силового поля (ВСП), в которых учитываются силы воздействия на центральный атом лишь ближайших соседей. Уже анализ простейших одномерных задач показывает, что этого недостаточно, так как погрешность в этом случае может достигать 50%.

Итак, назрела необходимость в том, чтобы:

- выяснить насколько оправдано проведение аналогии с компактным веществом путем сравнения упругих модулей, вычисленных при разных схемах нагружения,
- определить упругие характеристики каркасных аллотропных структур углерода с учетом анизотропии их строения,

– повысить точность определения упругих модулей путем перехода к использованию все более точных моделей и структурного элемента, включающего не четыре, а десять атомов.

2. Упругие характеристики нанотрубок при различных схемах нагружения. Как отмечалось выше, наиболее изученной в случае нанотрубок схемой нагружения (рисунок 2.1) является продольное растяжение-сжатие [1, 2, 3].

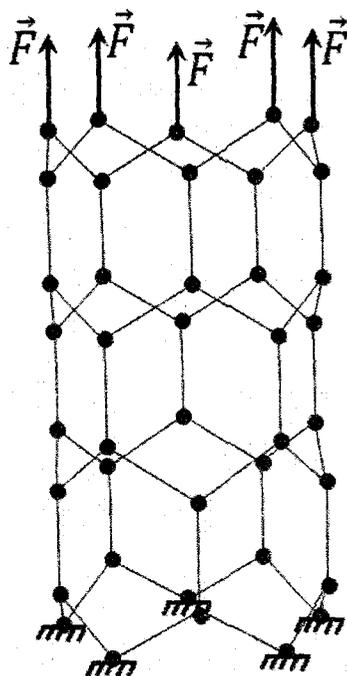


Рисунок 2.1 – Продольное растяжение УНТ типа зигзаг

Трубке ставится в соответствие полый стержень с толщиной стенки равной межслоевому расстоянию в графите. Модуль Юнга рассчитывается по формуле

$$E = \frac{F \cdot l}{\Delta l \cdot S}, \quad (2.1)$$

где l – длина трубки, Δl – удлинение, S – площадь поперечного сечения. На рисунке 2.2 приведена зависимость модуля Юнга от диаметра и длины нанотрубки в приближении поля центральных сил, а на рисунке 2.3 – валентно-силового поля.

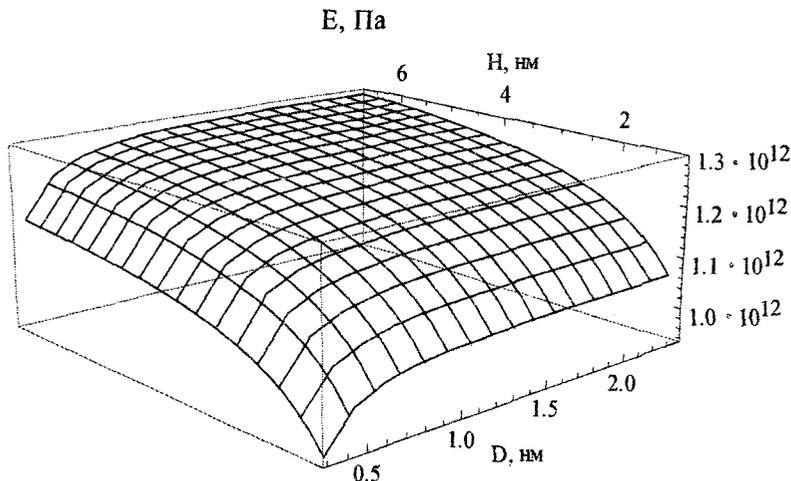


Рисунок 2.2 – Модуль Юнга УНТ типа зигзаг при разных длинах и диаметрах, вычисленный для растяжения образца в приближении поля центральных сил

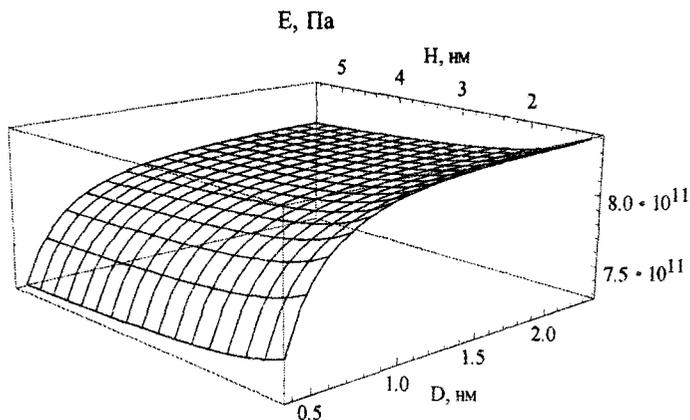


Рисунок 2.3 – Модуль Юнга УНТ типа зигзаг при разных длинах и диаметрах, вычисленный для растяжения образца в приближении валентно-силового поля

Из графиков видно, что применение разных моделей дает количественные различия и качественные. Диапазон изменения E в первом случае от 0.94 ТПа до 1.29 ТПа, во втором – от 0.73 ТПа до 0.84 ТПа. В приближении ПЦС модуль Юнга возрастает монотонно, как с увеличением диаметра, так и с увеличением длины трубки. При использовании модели ВСП с увеличением диаметра E так же увеличивается, но рост длины трубки приводит к уменьшению модуля Юнга.

На рисунке 2.4 приведены зависимости коэффициента Пуассона от диаметра и длины нанотрубки в приближении поля центральных сил, а на рисунке 2.5 – валентно-силового поля.

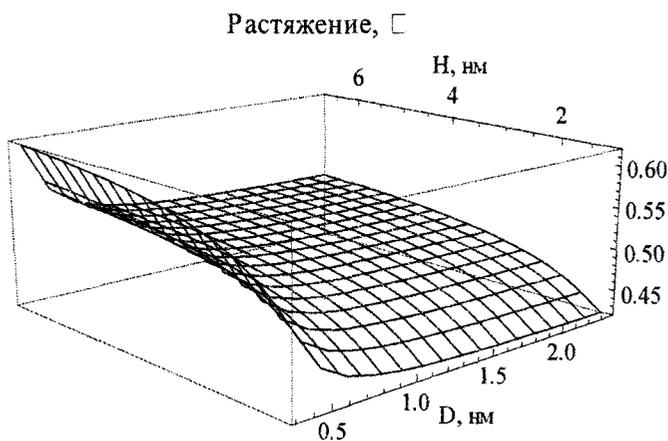


Рисунок 2.4 – Коэффициент Пуассона УНТ типа зигзаг при разных длинах и диаметрах, вычисленный для растяжения образца в приближении поля центральных сил

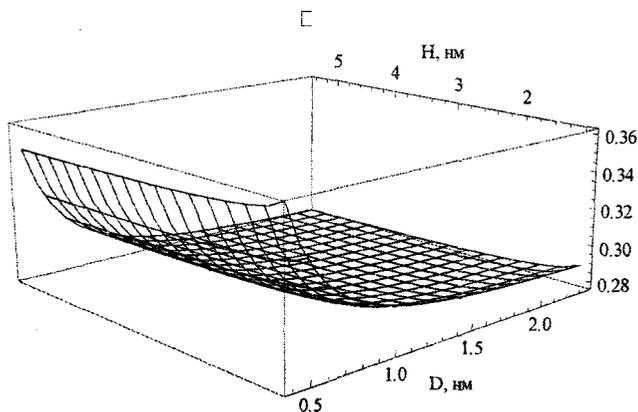


Рисунок 2.5 – Коэффициент Пуассона УНТ типа зигзаг при разных длинах и диаметрах, вычисленный для растяжения образца в приближении валентно-силового поля

В первом случае зависимость коэффициента Пуассона не монотонна. Он уменьшается с увеличением диаметра и возрастает с увеличением высоты трубки. Асимптотическое значение ~ 0.5 . Приделы изменения $0.42 < \nu < 0.62$. Для схемы валентно-силового поля величина коэффициента Пуассона мало меняется при увеличении высоты трубки, в то время как рост диаметра заметно сказывается на его значении.

Рассмотрим другую схему нагружения, для которой известно аналитическое решение. Это полый цилиндр под действием равномерного давления на боковую стенку (рисунок 2.6) [4, с. 34-35].

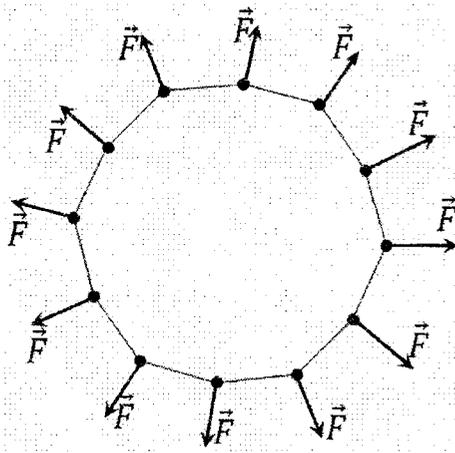


Рисунок 2.6 – УНТ типа зигзаг под действием равномерного давления на боковую стенку

Выражение для радиальных смещений имеет вид:

$$u = a \cdot r + \frac{b}{r}, \quad (2.2)$$

где r – радиус точки для которой вычисляют смещение,

$$a = \frac{p \cdot R_1^2}{R_2^2 - R_1^2} \cdot \frac{(1 + \nu) \cdot (1 - 2\nu)}{E}, \quad (2.3)$$

$$b = \frac{p \cdot R_1^2 R_2^2}{R_2^2 - R_1^2} \cdot \frac{(1 + \nu)}{E}, \quad (2.4)$$

здесь p – давление, R_1 , R_2 – внутренний и внешний радиусы соответственно, ν – коэффициент Пуассона, E – модуль Юнга.

Для вычисления модуля Юнга кроме размеров трубки, давления и смещения, которые задаются, необходимо также знать коэффициент Пуассона. Возьмем его из результатов испытаний по растяжению нанотрубки. Результаты отображены на графиках зависимости модуля Юнга E от размеров трубки (рисунки 2.7, 2.8).

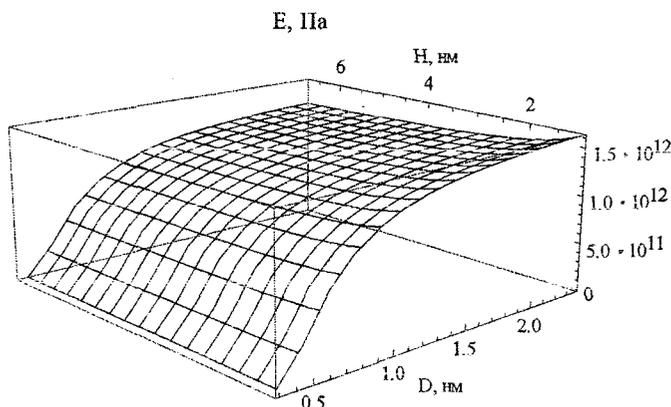


Рисунок 2.7 – Модуль Юнга УНТ типа зигзаг при разных длинах и диаметрах, вычисленный при равномерном давлении на стенку образца в приближении поля центральных сил

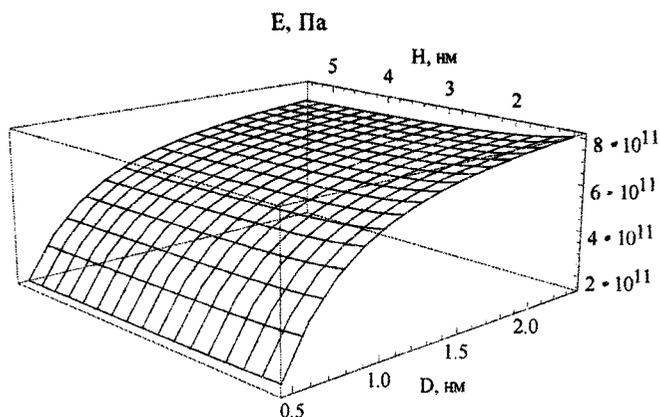


Рисунок 2.8 – Модуль Юнга УНТ типа зигзаг при разных длинах и диаметрах, вычисленный при равномерном давлении на стенку образца в приближении валентно-силового поля

В отличие от предыдущего случая графики похожи. Интервалы изменения E различны: $0.3 < E < 1.60$ ТПа в первом случае, во втором – от 0.15 ТПа до 0.81 ТПа.

Итак, обе рассмотренные схемы нагружения дают примерно одинаковые значения для модуля Юнга. В обоих случаях приближение ВСП приводит к значительно меньшей (почти в два раза) жесткости системы.

Рассмотрим также деформацию кругового кольца сгибаемого двумя сосредоточенными силами, действующими вдоль диаметра (рисунок 2.9).

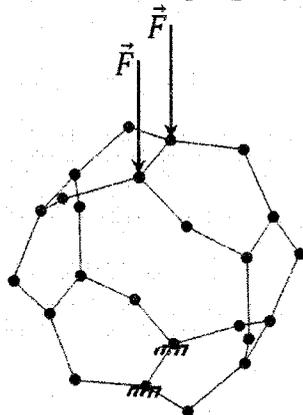


Рисунок 2.9 – Сжатие одного слоя УНТ типа зигзаг двумя сосредоточенными силами, действующими вдоль диаметра

Аналитическое решение имеет вид [4, с. 119]

$$u = \frac{F \cdot R^3}{E \cdot I} \left(\frac{1}{\pi} + \frac{1}{4} \varphi \cos \varphi - \frac{\pi}{8} \cos \varphi - \frac{1}{4} \sin \varphi \right), \quad 0 \leq \varphi \leq \pi, \quad (2.5)$$

где F – действующая сила, R – радиус цилиндра, E – модуль Юнга, I – момент инерции сечения, φ – угол между линией действия силы и радиусом цилиндра. Момент инерции вычисляем следующим образом:

$$I = \frac{A^3 \cdot B}{12}, \quad (2.6)$$

где A – толщина кольца, B – его высота.

Будем сравнивать наибольшие сближения точек, где прикладываются силы. Из (2.5) имеем:

$$|u(0) - u(\pi)| = \frac{F \cdot R^3}{E \cdot I} \left(\frac{\pi}{4} - \frac{2}{\pi} \right), \quad (2.7)$$

Приравнивая это выражение к значению численного решения для дискретной системы получаем зависимость модуля Юнга от диаметра трубки (рисунки 2.10, 2.11):

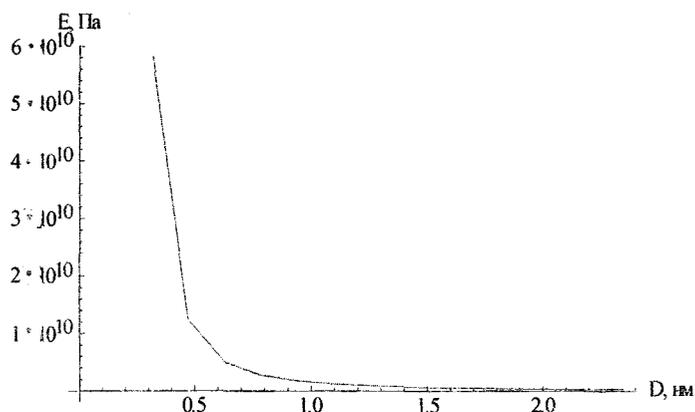


Рисунок 2.10 – Модуль Юнга УНТ типа зигзаг при разных диаметрах, вычисленный в приближении поля центральных сил

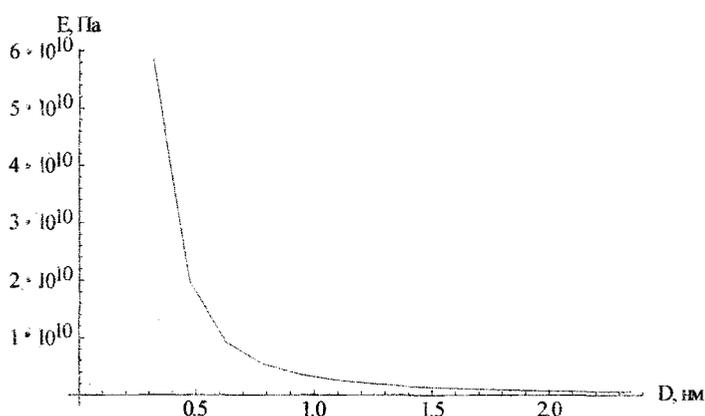


Рисунок 2.11 – Модуль Юнга УНТ типа зигзаг при разных диаметрах, вычисленный в приближении валентно-силового поля

В обоих случаях видна очень сильная зависимость модуля Юнга для данной схемы нагружения от диаметра. Чем больше диаметр, тем трубка “мягче”, но в первом случае спад наблюдается более быстрый. Начинаются графики приблизительно с одного значения $E \approx 5.8 \cdot 10^{10}$ Па. Асимптотическое значение для модели поля центральных сил составляет $E \approx 2.32 \cdot 10^8$ Па, а для приближения валентно-силового поля $E \approx 5.18 \cdot 10^8$ Па что на три порядка меньше, чем в случаях растяжение-сжатие и давление.

ЛИТЕРАТУРА

1. A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes / Chunyu Li, Tsu-Wei Chou // International journal of Solids and Structures. – 2003. – Vol. 40 – P. 2487–2499.
2. Веремеиук, П.В. Зависимость механических свойств однослойной углеродной нанотрубки с границей типа «кресло» от размеров / П.В. Веремеиук, Ю.Е. Нагорный // Сборник статей международной конференции молодых ученых «Молодежь в науке – 2005». – НАН РБ, 2005.
3. Нагорный, Ю.Е. Сравнительный численный анализ механического поведения нанотрубки в случае применения разных механических моделей / Ю.Е. Нагорный, В.И. Репченков, С.А. Чижик // Теоретическая и прикладная механика: Сб. ст. – 2008. – Вып 23 — С. 160–161.
4. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – Т VII. – М.: Наука, 1987. – С. 246.