На правах рукописи

Ньи Ньи Лайнг

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МНОГОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук



Москва -- 2011

Работа выполнена в Калужском филиале федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э.Баумана»

Научные руководители: доктор физико-математических наук, профессор **Логинов Борис Михайлович**

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор **Жданов Сергей Михайлович**
кандидат физико-математических наук, с.н.с. **Прохоров Игорь Алексеевич**

Ведущая организация: Калужский государственный университет имени К.Э.Циолковского

Защита состоится « 18 » января 2012 г. в 14^{30} часов на заседании диссертационного совета Д212.141.17 при ГОУ ВПО «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана» по адресу: 248600, г. Калуга, ул. Баженова, д. 2, МГТУ им. Н.Э. Баумана, Калужский филиал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке МГТУ им. Н.Э. Баумана по адресу: г. Москва, ул. 2-я Бауманская, д. 5.

НТБ МГТУ им.Н.Э.Баумана
1988080
Ньи Ньи ЛайнгМоделирование

Автореферат разослан « 15 » декабря 201

Ученый секретарь диссертационного совета канд. тех. наук, доцент С.А.Лоскутов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы работы. Имеющиеся экспериментальные данные свидетельствуют об уникальных механических свойствах углеродных нанотрубок. Их жесткость оказывается сравнимой с жесткостью алмаза, в то время как их прочность, на порядок превышает показатели, присущие лучшим сортам стали. Более того, при упругой и неупругой деформациях, углеродные нанотрубки могут поглощать большое количество энергии. Отмеченные физические характеристики позволяют рассматривать углеродные нанотрубки в качестве перспективной основы для разработки новых высокопрочных, термоустойчивых и энергоемких композиционных материалов. Очевидны трудности экспериментального исследования механических свойств углеродных нанотрубок. При теоретическом анализе, с учетом множественной природы взаимодействий атомов углеродной нанотрубки, исследователи вынуждены прибегать к компьютерному моделированию, которое в настоящее время уверенно завоевало статус самостоятельного метода исследования. В настоящее время углеродные нанотрубки удается синтезировать многими способами. Результаты недавних экспериментальных исследований позволили установить, что при использовании наиболее распространенных и дешевых методов получения углеродных нанотрубок, например, метода химического осаждения из пара или разрядно-дугового метода, образующиеся нанотрубки имеют преимущественно многослойную структуру. Однако, к сожалению, механические свойства многослойных углеродных нанотрубок изучены крайне недостаточно. С учетом сказанного, настоящая работа посвящена разработке моделей, методов и анализу средствами компьютерного моделирования механических свойств многослойных углеродных нанотрубок.

Целью диссертационной работы являлось исследование физических свойств многослойных углеродных нанотрубок в условиях внешнего механического и радиационного воздействия

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

- разработать математическую модель и соответствующее программное обеспечение для анализа механических свойств многослойных углеродных нанотрубок;
- на основании компьютерного моделирования провести анализ основных механических характеристик многослойных углеродных

нанотрубок и их зависимостей от геометрических и физических параметров;

– исследовать влияние радиационных повреждений многослойных углеродных нанотрубок на их механические свойства и характеристики.

Научная новизна работы состоит в следующем:

– разработана новая квазидинамическая модель и методика моделирования физических свойств углеродных нанотрубок, позволяющая более чем на порядок снизить вычислительную сложность рассматриваемых задач анализа механических свойств углеродных нанотрубок;

– средствами компьютерного моделирования всесторонне изучены характеристики напряженно-деформационного состояния двухслойных и трехслойных углеродных нанотрубок, а также зависимости влияния на данные характеристики геометрических и физических параметров нанотрубок и особенностей воздействия внешней нагрузки;

– проведено исследование влияния радиационного облучения на формирование дефектной структуры многослойных углеродных нанотрубок; получены и исследованы зависимости механических характеристик многослойных углеродных нанотрубок от физических и геометрических параметров и уровня радиационного облучения, типов и плотности образующихся радиационных дефектов.

Теоретическая и практическая ценность работы состоят в том, что разработанные в работе модели и методология квазидинамического моделирования для исследования напряженно-деформационного состояния и физических свойств многослойных углеродных нанотрубок в условиях внешнего радиационного и механического воздействия могут быть использованы для анализа широкого круга практически важных задач микро- и нано- материаловедения. Поскольку многослойные углеродные нанотрубки обладают широким спектром возможностей практического применения, установленные в работе закономерности влияния радиационного облучения на механические характеристики и свойства многослойных углеродных нанотрубок с различными геометрическими параметрами и хиральностью могут быть использованы при разработке новых электронных и электро-механических микро- и нано- приборов и устройств.

Достоверность результатов работы обусловлена корректной постановкой задачи, применением математически обоснованных методов ее решения, соответствием результатов известным экспериментальным данным.

На защиту выносятся следующие положения:

- квазидинамическая модель и методика компьютерного анализа напряженно-деформационного состояния многослойных углеродных нанотрубок и их механических характеристик в условиях различного внешнего радиационного и механического воздействия;
- результаты исследования физических характеристик многослойных углеродных нанотрубок и их зависимостей от особенностей внешнего нагружения, геометрических и физических параметров многослойных нанотрубок;
- установленные закономерности и механизмы возникновения бифуркационных трансформаций многослойных углеродных нанотрубок и особенности влияния на данные закономерности и механизмы физических и геометрических параметров и характеристик.
- установленные закономерности образования структурных нарушений и дефектов многослойных углеродных нанотрубок в результате радиационного облучения и зависимости механических характеристик многослойных нанотрубок от плотности радиационных дефектов различного типа.

Апробация результатов. Результаты диссертационной работы докладывались на конференциях:

1. Региональных научно-технических конференциях «Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе» (МГТУ им.Н.Э.Баумана, Москва 2008, 2009, 2010);
2. Всероссийских научно-технических конференциях «Наукоёмкие технологии, в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе» (МГТУ им.Н.Э.Баумана, Москва 2008, 2009, 2010);
3. Всероссийской школе-семинаре студентов, аспирантов и молодых ученых по направлению «Наноинженерия» (МГТУ им.Н.Э.Баумана, Москва 2008, 2010).

Публикации. Тема диссертации отражена в 10 научных работах, в том числе 1 статья в журнале из перечня ВАК.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, выводов и списка цитируемой литературы. Она

изложена на 139 страницах текста, содержит 39 рисунков, 13 таблиц, 125 библиографических названий.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность темы диссертации, ее практическое значение, формулируются основные цели исследования и основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава диссертации посвящена обзору литературы. В ней проводится рассмотрение и анализ методов и результатов современных исследований механических свойств углеродных нанотрубок.

Во второй главе диссертации проводится описание разработанных моделей и методик моделирования. Как правило, анализ взаимодействия атомов углерода в большинстве работ проводится на основе потенциала Бреннера-Терсоффа. Данный потенциал точно воспроизводит особенности взаимодействия атомов углерода на расстояниях не превышающих 2Å. Однако учет особенностей взаимодействия атомов углеродных нанотрубок на расстояниях превышающих 2Å могут иметь принципиальное значение для описания механических свойств, в случае возникновения дефектов. Имея ввиду данные обстоятельства, в настоящей работе анализ равновесных конфигураций нанотрубок проводился на основе специально разработанного комбинационного потенциала, задаваемого соотношением:

$$E_{ij}(r_{ij}) = \varsigma(r_{ij})E_{ij}^{BT} + \xi(r_{ij})E_{ij}^{MM}(r_{ij}),$$

где E_{ij}^{BT} - потенциал Бреннера-Терсоффа, $E_{ij}^{MM}(r_{ij})$ – модифицированный потенциал Морзе:

$$E_{ij}^{MM}(r_{ij}) = E_{np} + E_{yz},$$

где

$$E_{np} = D_{ij}^{(e)}\{[1-e^{-\beta_{ij}(r-R_{ij}^{(e)})}]^2 - 1\}, \quad E_{yz} = \frac{1}{2}k_\theta(\theta_{ijk} - \theta_{ijk}^{(e)})^2[1 + k_s(\theta_{ijk} - \theta_{ijk}^{(e)})^4],$$

а ступенчатые функции $\varsigma(r_{ij})$ и $\xi(r_{ij})$ обеспечивают доминантные роли потенциалу Бреннера-Терсоффа при $r_{ij} < 1{,}7$ Å, модифицированному потенциалу Морзе при $2\text{Å} < r_{ij} < 10\text{Å}$ и достаточную гладкость перехода

потенциала Бреннера-Терсоффа в модифицированный потенциал Морзе в интервале $1,\text{Å} < r_{ij} < 2\text{Å}$. Численные значения параметров выбирались равными: $R_{ij}^{(e)} = 1,315 \cdot 10^{-10} м$, $D_{ij}^{(e)} = 9,325 \cdot 10^{-19} н \cdot м$, $\delta_{ij} = 0,80469$, $S_{ij} = 1,29$, $\beta_{ij} = 1,5 \cdot 10^{10} м^{-1}$, $R_{ij}^{(1)} = 1,7 \cdot 10^{-10} м$, $R_{ij}^{(2)} = 2,0 \cdot 10^{-10} м$, $\theta_{ijk}^{(e)} = 2,094 рад$, $k_\theta = 0,9 \cdot 10^{-18} н \cdot м / рад^2$, $k_s = 0,754 рад^{-4}$, $a_0 = 0,011304$, $c_0 = 19$, $d_0 = 2,5$.

На основе специально разработанной нотации послойного прохождения атомов углерода и введенного критерия определения области учета влияния ближайших соседей для атомов нанотрубки, системы уравнений баланса сил для углеродных атомов оказывается возможным записать в каноническом виде, при котором соответствующие дифференциально-матричные операторные уравнения приводится к ленточному типу. Ширина ленты ς зависит от степени рассматриваемого приближения и равняется числу атомов УНТ, заключенных в соответствующем круге приближения. Таким образом, предлагаемый подход позволяет существенно понизить вычислительную сложность задачи, поскольку, в качестве альтернативы традиционно применяемому молекулярно динамическому методу анализа с вычислительной сложностью $O(n^2)$, разработанная методика позволяет понизить вычислительную сложность до $O(n)$.

Третья глава диссертации посвящена исследованию механических свойств многослойных нанотрубок. В соответствии с результатами классической теории оболочек, сжатие цилиндрических поверхностей может сопровождаться бифуркацией, когда при достижении критического уровня деформации цилиндрическая поверхность теряет устойчивость и скачком переходит в новое состояние, при котором на гладкой цилиндрической поверхности появляются выпуклости и вогнутости. Поскольку углеродная нанотрубка является дискретным атомарным образованием установленные для гладких цилиндрических поверхностей эффекты не могут автоматически распространены на углеродные нанотрубки без проведения самостоятельного исследования.

Анализ особенностей бифуркационных процессов однослойных нанотрубок различных диаметров и хиральности, характеризуемых параметрами: (5,5); (10,10); (15,15); (7,0); (16,0); (25,0), позволил установить следующие закономерности. Независимо от хиральности нанотрубок, зависимости уровня критической деформации $\varepsilon_{кр}$, при которой возникает бифуркация, от параметра η, определяемого как отношение длины нанотрубки к ее диаметру, обнаруживает две области значений η, в

пределах которых зависимости $\varepsilon_{кр}$ от η качественно отличаются. В первой области, зависимость $\varepsilon_{кр}$ от η, для всех рассмотренных параметров нанотрубок практически линейна. Во второй области наблюдается экспоненциальное убывание величины критической деформации по мере увеличения параметра η. Полученные результаты показали, что не зависимо от хиральности, критическое значение параметра η^*, служащее разделом между двумя областями, увеличивается по мере увеличения диаметра нанотрубки. Детальный анализ структурных изменений однослойной нанотрубки позволил установить, что во всех случаях для критических значений деформации, отвечающих первой области значений η $(\eta<\eta^*)$, бифуркационный переход сопровождается возникновением выпуклостей и вогнутостей на поверхности нанотрубки, при этом первоначальная ось симметрии остается внутри нанотрубки. Для второй области значений η, при $\eta>\eta^*$, в результате бифуркационного перехода нанотрубка прогибается как стержень и выходит за пределы своей первоначальной оси симметрии. Сравнительный анализ полученных зависимостей позволил установить, что при выборе нанотрубок приблизительно равного диаметра их хиральность практически не оказывает заметного влияния на результаты. В тоже время при фиксации значений параметра η наблюдается гиперболическая зависимость уровня критической деформации от диаметра нанотрубок.

Самостоятельный интерес представляет анализ изменения энергетического состояния углеродной нанотрубки в процессе бифуркационных изменений. С этой целью, для нанотрубок с различными геометрическими параметрами и хиральностью, были проанализированы зависимости от деформации величины избыточной энергии деформации приходящейся на один атом углеродной нанотрубки – величины ΔW, вычисляемой как разность упругой энергии деформированной и исходной нанотрубки. Полученные результаты позволили установить, что в процессе бифуркации происходит скачкообразное увеличение величины ΔW, причем, независимо от хиральности, по мере увеличения диаметра нанотрубки значение уровня деформации, при которой происходит скачок уменьшается, а величина амплитуды скачка также убывает.

Для многослойных нанотрубок параметр η – не имеет однозначной интерпретации, поэтому, для многослойных нанотрубок исследования проводились с абсолютных значениях длины нанотрубок. Анализ структурных изменений происходящих в двухслойных нанотрубках позволил установить следующие закономерности. Соотношение диаметров нанотрубок, составляющих двухслойную нанотрубку, предопределяет три зоны длины двухслойной нанотрубки, в пределах которых структурные

бифуркационные изменения при достижении критической деформации имеют следующие характерные особенности. В области больших значений длин, когда бифуркация каждой из нанотрубок протекает по типу стержневого прогиба, запуск погиба двухслойной нанотрубки реализуется за счет прогиба внутренней нанотрубки, которая начинает прогибаться первой. Важной особенностью, при этом является уровень критической деформации двухслойной нанотрубки, который оказывается выше соответствующего значения для внутренней нанотрубки и ниже соответствующего значения для внешней нанотрубки. В данном случае внутренняя нанотрубка стимулирует прогиб внешней, в то время как внешняя нанотрубка тормозит прогиб внутренней. Область малых значений длины двухслойной нанотрубки, характеризуется другими закономерностями. В данном случае бифуркационный процесс запускается внешней нанотрубкой, так как при достижении критической деформации она первой начинает деформироваться по типу вогнутостей, с сохранением своей первоначальной оси симметрии. Теперь уровень критической деформации двухслойной нанотрубки оказывается выше уровня критической деформации внешней нанотрубки и ниже уровня критической деформации внутренней нанотрубки, т.е. теперь внешняя нанотрубка запускает бифуркационный процесс двухслойной нанотрубки. Наконец, в центральной области, в которой бифуркация однослойной внешней нанотрубки должна развиваться за счет образования вогнутостей с сохранением центральной оси первоначальной симметрии, в то время как независимая бифуркация однослойной внутренней нанотрубки все еще развивается по типу стержневого прогиба, итоговая бифуркация двухслойной нанотрубки реализуется по типу образования вогнутостей. При этом в зависимости от длины нанотрубки, запуск бифуркационного процесса двухслойной нанотрубки может осуществляться как за счет внешней нанотрубки, так и за счет внутренней нанотрубки, это предопределяется конкретным соотношением их диаметров однослойных нанотрубок, для конкретного значения длины двухслойной нанотрубки. Полученные результаты также показали, что для двухслойных нанотрубок описанные закономерности бифуркационных процессов оказываются практически независящими от хиральности нанотрубок.

Для выяснения влияния роли диаметра нанотрубок было проведено дополнительное исследование, для которого были выбраны различные двухслойные нанотрубки, характеризуемые различной хиральностью и разными значениями диаметра, при этом во всех случаях отношение длины двухслойной нанотрубки к диаметру внешней нанотрубки выбиралось

примерно одинаковым и составляло значение близкое к пяти. Полученные результаты зависимости значения критической деформации от диаметра внешней нанотрубки показали, что независимо от хиральности, по мере роста диаметра нанотрубки, значения критической деформации убывают по закону, близкому к гиперболическому.

Самостоятельный интерес представляет анализ изменения энергетического состояния углеродной нанотрубки в процессе бифуркационных изменений. Полученные результаты позволили установить, что начало бифуркационного деформирования сопровождается скачкообразным изменением величины ΔW. Причем, если для однослойных нанотрубок данный скачек приводил к снижению величины избыточной энергии деформации, то, в данном случае, скачек избыточной энергии в узком диапазоне значений деформации сначала приводит к существенному увеличению избыточной энергии, которое впоследствии сопровождается относительно небольшим спадом. Дополнительный анализ структурных изменений в двухслойной углеродной нанотрубки позволил установить, следующие закономерности, обуславливающие наблюдаемые зависимости. В процессе деформации, момент достижения критического значения деформации, при котором наблюдается резкое увеличение избыточной энергии, характеризуется началом бифуркационных изменений внешней нанотрубки. В этом момент на поверхности внешней нанотрубки начинают образовываться выпуклости и вогнутости, однако эффективному развитию вогнутостей внешней нанотрубки эффективно препятствует внутренняя нанотрубки. В результате такого противоборства, с одной стороны, на поверхности внутренней нанотрубки также начинают образовываться выпуклости и вогнутости, а, с другой стороны, потенциальная энергия атомов, как внешней, так и внутренней нанотрубок начинает возрастать. Развитие данного процесса противоборства и взаимного содействия в формировании неровностей на обеих нанотрубках, в определенный момент времени достигает насыщения, после чего реализуется структурная перестройка атомов как внешней, так и внутренней нанотрубок, сопровождаемая небольшим спадом значения избыточной энергии. При этом последующий рост деформации двухслойной нанотрубки уже не вызывает существенных скачков в значениях избыточной энергии.

Анализ структурных изменений, происходящих в трехслойных углеродных нанотрубках показал, что соотношение диаметров нанотрубок, составляющих трехслойную нанотрубку, предопределяют три зоны длины двухслойной нанотрубки, в пределах которых структурные

бифуркационные изменения при достижении критической деформации имеют следующие характерные особенности. В области больших значений длин, когда бифуркация каждой из нанотрубок протекает по типу стержневого прогиба, запуск погиба трехслойной нанотрубки реализуется за счет прогиба внутренней нанотрубки, которая начинает прогибаться первой. Важной особенностью, при этом является уровень критической деформации трехслойной нанотрубки, который оказывается выше соответствующего значения для внутренней и средней нанотрубки, но ниже соответствующего значения для внешней нанотрубки. В данном случае внутренняя нанотрубка стимулирует прогиб сначала средней, а затем внешней нанотрубок, в то время как средняя и внешняя нанотрубки препятствуют формоизменению внутренней нанотрубки. Область малых значений длины трехслойной нанотрубки, характеризуется другими закономерностями. В данном случае бифуркационный процесс запускается внешней нанотрубкой, так как при достижении критической деформации она первой начинает деформироваться по типу вогнутостей и выпуклостей, с сохранением своей первоначальной внутренней оси. Теперь уровень критической деформации трехслойной нанотрубки оказывается выше уровня критической деформации внешней и средней нанотрубок, но ниже уровня критической деформации внутренней нанотрубки, т.е. теперь внешняя нанотрубка запускает бифуркационный процесс трехслойной нанотрубки, а средняя и внутренняя нанотрубки препятствуют развитию данного процесса. Наконец, в центральной области, в которой бифуркация однослойной внешней нанотрубки должна развиваться за счет образования вогнутостей с сохранением центральной оси первоначальной симметрии, в то время как независимая бифуркация однослойных внутренней и средней нанотрубок все еще развивается по типу стержневого прогиба, итоговая бифуркация трехслойной нанотрубки реализуется по типу образования вогнутостей. При этом в зависимости от длины нанотрубки, запуск бифуркационного процесса трехслойной нанотрубки может осуществляться как за счет внешней нанотрубки, так и за счет внутренних нанотрубок, это предопределяется конкретным соотношением диаметров однослойных нанотрубок, для конкретного значения длины трехслойной нанотрубки.

Полученные результаты позволили установить, что начало бифуркационного деформирования сопровождается скачкообразным изменением величины ΔW. В данном случае, также как и для двухслойных нанотрубок наблюдаемый скачек сопровождается сначала увеличением величины избыточной энергии с последующим спадом. Анализ структурных изменений в трехслойной углеродной нанотрубки позволил

установить, следующие закономерности, обуславливающие наблюдаемые зависимости. В процессе деформации, момент достижения критического значения деформации, при котором наблюдается резкое увеличение избыточной энергии, характеризуется началом бифуркационных изменений внешней нанотрубки. В этот момент на поверхности внешней нанотрубки начинают образовываться выпуклости и вогнутости, однако эффективному развитию вогнутостей внешней нанотрубки эффективно препятствует сначала средний, а потом и внутренний слой нанотрубки. В результате такого противоборства, с одной стороны, на поверхностях средней и внутренней нанотрубки также начинают образовываться выпуклости и вогнутости, а, с другой стороны, потенциальная энергия атомов, как внешней, так и внутренней нанотрубок начинает резко возрастать. Развитие данного процесса противоборства и взаимного содействия в формировании неровностей на всех трех нанотрубках, в определенный момент времени достигает насыщения, после чего реализуется структурная перестройка атомов нанотрубок, сопровождаемая небольшим спадом значения избыточной энергии. При этом последующий рост деформации двухслойной нанотрубки уже не вызывает существенных скачков в значениях избыточной энергии.

В четвертой главе диссертации, средствами компьютерного моделирования, проведено исследование влияния ионного облучения на механические характеристики многослойных углеродных нанотрубок. При моделировании в качестве бомбардирующих ионов были выбраны ионы аргона. Взаимодействие ионов аргона с атомами углерода описывалось на основании отталкивающего потенциала Зиглера-Бирзака-Литмарка Соударение атомов аргона с атомами углерода считалось абсолютно упругим. Равновесная конфигурация углеродной нанотрубки после ионной бомбардировки определялась методами молекулярной динамики, регулирование температуры осуществляется на основе термостата Ланжевена. При моделировании предполагалось, что атомы аргона, с заданной кинетической энергией – E, двигаются перпендикулярно площадке DxL, на которой размещалась углеродная нанотрубка, характеризуемая внешним диаметром D и длиной L. Координаты пересечения атомами аргона площадки DxL задавались случайным образом и принимались равновероятными.

Анализ типичных дефектов, образующихся в процессе бомбардировки ионами аргона, обладающими различной энергией, позволил выделить следующие восемь типов: 1) B(2) – вакансия на внешней нанотрубке; 2) A(2) – адсорбция на внешней нанотрубке; 3) A(1) –

адсорбция на внутренней нанотрубке; 4) ХС(1,2) – выбитый атом химически связан с внешней и внутренней нанотрубками; 5) БВ(2) – бивакансия на внешней нанотрубке; 6) В(1) – вакансия на внутренней нанотрубке; 7) ХСБ(1,2) –два выбитых атомы химически связаны между собой и с внешней и внутренней нанотрубками; 8) БВ(1) – бивакансия на внутренней нанотрубке.

Полученные результаты позволили установить, что независимо от геометрических параметров нанотрубок и хиральности, в тех случаях, когда энергия иона аргона не превышает уровня в 50 эВ, описанных выше типов дефектов не образуется. Столкновение ионов аргона с атомами углеродной нанотрубки приводит лишь к первичной деформации нанотрубки, которая впоследствии, в результате релаксационных процессов полностью устраняется и нанотрубка принимает свою исходную конфигурацию. Увеличение уровня энергии бомбардирующих ионов в интервале значений от 50 до 100 эВ, также преимущественно приводит к недолговременной деформации углеродной нанотрубки. Однако, при этом взаимодействие примерно одной трети бомбардирующих ионов приводит к образованию одиночных вакансий. Причем вакансионные атомы углерода в процессе релаксационных процессов преимущественно адсорбируются на внутренней стороне внешней нанотрубки. Отмеченные тенденции возрастают в количественном отношении при увеличении энергии бомбардирующих ионов в интервале значений от 100 до 150 эВ. Однако и в данном диапазоне энергетических значений образование вакансий наблюдается примерно лишь в половине случаев столкновений, в то время как примерно половина бомбардирующих ионов вызывает первоначальную деформацию внешнего слоя нанотрубки. В том случае, когда энергия бомбардирующих ионов превышает уровень 150 эВ и лежит в интервале значений от 150 до 200 эВ, впервые, взаимодействие практически всех атомов аргона приводит к образованию вакансий, при этом выбитые атомы углерода в значительном объеме (более 40%) оказываются преимущественно связанными химической связью, как с внешней, так и с внутренней нанотрубками. Дальнейшее увеличение энергии бомбардирующих ионов в интервале значений от 250 до 400 эВ сохраняет отмеченную тенденцию формирования ХС(1,2) дефектов, однако в данном диапазоне значений энергий, конкурирующей становится тенденция образования бивакансий. Более того, необходимо отметить, что возникающие бивакансии, в результате образования ХС(1,2) и ХСБ(1,2) дефектов, также интенсивно способствуют химическому связыванию внешней и внутренней нанотрубок. Наконец, когда уровень энергии

бомбардирующих ионов достигает значения в 450 эВ и лежит в интервале значений от 450 до 600 эВ, преимущественным результатом взаимодействия ионов аргона с атомами углеродной нанотрубки становиться образование вакансий и бивакансий, причем как на внешней, так и внутренней нанотрубках, что приводит к существенной деградации исходной структуры нанотрубок.

Анализ влияния геометрических характеристик углеродной нанотрубки, ее диаметра и хиральности на рассмотренные закономерности образования дефектной структуры, в результате ионной бомбардировки, позволил установить, что увеличение диаметров нанотрубок при сохранении ее хиральности сопровождается небольшим уменьшением числа образующихся дефектов типа ХС(1,2) и ХСБ(1,2), а изменение хиральности нанотрубок практически не влияет на отмеченные ранее особенности формирования дефектной структуры.

Поскольку к числу наиболее характерных дефектов, независимо от геометрических параметров углеродных нанотрубок, можно отнести вакансии, бивакансии, а также ХС(1,2) дефекты, связующие внешнюю и внутреннюю нанотрубки, представляет интерес исследование влиянии перечисленных дефектов на механические характеристики углеродных нанотрубок. Для решения данного вопроса в многослойные нанотрубки, характеризуемые различными геометрическими параметрами и хиральностью, случайным образом, с заданной плотностью вводились те или иные дефекты, после чего углеродные нанотрубки, на основании метода квазидинамического моделирования, подвергались механическому воздействию. Расположение задаваемого дефекта на поверхности нанотрубок задавалось случайным образом, а их плотность дефектов менялась в пределах от 0 до 2,0 [шт/нм$^{-2}$], что соответствовало внесению от нуля до пятидесяти дефектов разного типа. Полученные результаты позволили выделить следующие особенности в характере полученных зависимостей относительных величин разупрочнения от плотности дефектов разного типа. Наличие бивакансий в углеродных нанотрубках приводит к наибольшему разупрочнению. В интервале значений от 0 до 1,3 [нм$^{-2}$], разупрочнение практически линейно возрастает по мере увеличения плотности дефектов. Однако, в области значений плотности равной 1,3 [нм$^{-2}$], данная зависимость претерпевает излом, сопровождающейся последующим увеличением скорости разупрочнения. Дополнительный анализ показал, что данный излом непосредственно связан с достижением критического значения плотности дефектов, при котором

локальные внутренние избыточные напряжения, создаваемые дефектами, начинают перекрываться, что сопровождается увеличением разупрочнения.

Аналогичные особенности наблюдаются и для кривой разупрочнения, связанной с одиночными вакансиями. Однако возникновение комплексов, состоящих из вакансий и дефектов ХС, приводит к снижению как скорости, так и абсолютных значений разупрочнения. Полученные результаты показали, что наибольшее разупрочнение, обусловленное бивакансиями составляет примерно 25%, а уровень упрочнения вызванный одиночными вакансиями может достигать значения 15%. При этом присутствие дефектов типа ХС, в каждом из случаев, приводит примерно к двух кратному снижению уровня разупрочнения.

Анализ влияния геометрических параметров нанотрубок и их хиральности на рассмотренные особенности влияния различных дефектов на разупрочнение показал, что при сохранении хиральности увеличение диаметров нанотрубок не сопровождается изменением качественных закономерностей рассмотренных процессов и приводит лишь к небольшому количественному снижению наблюдаемых зависимостей, не более 10-15% в зависимости от рассматриваемого типа дефекта. Анализ характеристик разупрочнения при сохранении диаметров и изменении хиральности показал, что влияние хиральности практически не проявляется.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработана новая квазидинамическая модель и методика компьютерного моделирования и анализа напряженно-деформационного состояния и физических свойств многослойных углеродных нанотрубок в условиях внешнего механического и радиационного воздействия.

2. Впервые получены характеристики жесткости и прочности многослойных углеродных нанотрубок и исследованы их зависимости от особенностей внешнего нагружения, геометрических и физических параметров нанотрубки.

3. Установлены новые закономерности, связанные с механизмами возникновения бифуркационных трансформаций многослойных углеродных нанотрубок и влиянием на данные механизмы физических и геометрических параметров и характеристик.

4. Показано, что критический уровень деформации, при которой начинают проявляться бифуркационные изменения, регулируется соотношениями геометрических параметров многослойных нанотрубок, при этом независимо от их хиральности, имеется три характерные области

значений геометрических параметров, в пределах которых бифуркационные процессы развиваются по различным сценариям.

5. Получены характеристики напряженно-деформационного и энергетического состояния многослойных углеродных нанотрубок и изучены их зависимости от внешних физических и внутренних геометрических параметров. Впервые установлено, что бифуркационным процессам в случае многослойных нанотрубок предшествует значительное увеличение внутренней избыточной энергии системы; дано объяснение данному явлению, связанное с аккумуляцией внутренней энергии за счет межслойного взаимодействия.

6. Впервые, средствами компьютерного моделирования проведен анализ влияния радиационного облучения на структуру и физические характеристики многослойных углеродных нанотрубок. Установлены интервальные энергетические характеристики облучения, в пределах которых радиационное воздействие обуславливает образование различных дефектов структуры многослойных нанотрубок. Получены данные о влиянии на физические характеристики многослойных нанотрубок различных типов дефектов и зависимости разупрочнения многослойных нанотрубок от плотности различных дефектов и геометрических параметров многослойных нанотрубок.

Основные результаты диссертации отражены в работах:

1. Влияние топологических и радиационных дефектов на упругие характеристики углеродных нанотрубок / Ньи Ньи Лайнг [и др.] // Наукоемкие технологии. 2011. № 9. С. 23-37.
2. Ньи Ньи Лайнг, Говоров Д.С., Гинзгеймер С.А. Моделирование аксиальной деформации двухслойной углеродной нанотрубки // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы региональной научно-технической конференции. М., 2008. Т. 2. С. 64-67.
3. Ньи Ньи Лайнг, Пономарев А.В. Особенности молекулярно динамического моделирования механических свойств двойных УНТ // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. М., 2009. Т. 2. С. 44-47.
4. Ньи Ньи Лайнг, Пономарев А.В. Молекулярно динамический алгоритм моделирования для канонического ансамбля // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности

в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. М., 2009. Т. 2. С. 48-50.

5. Ньи Ньи Лайнг, Клочко О.С., Богданова Е.М. Особенности и характеристики потенциалов взаимодействия при моделировании двойных УНТ // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. М., 2009. Т. 2. С. 51-54.
6. Ньи Ньи Лайнг, Рыбкин С.В. Методы расчета, измерения и анализа механических свойств углеродных нанотрубок // Наноинженерия. Сборник трудов 1-ой Всероссийской школы-семинара по направлению «Наноинженерия». М., 2008. С. 243-258.
7. Ньи Ньи Лайнг, Говоров Д.С., Гинзгеймер С.А. Молекулярно динамическое моделирование деформирования двухслойных нанотрубок // Наноинженерия. Сборник трудов 1-ой Всероссийской школы-семинара по направлению «Наноинженерия». М., 2008. С. 339-342.
8. Квазидинамическая модель моделирования механических свойств углеродных нанотрубок / Ньи Ньи Лайнг [и др.] // Труды МГТУ. Методы исследования и проектирования сложных технических систем. М., 2009. Т. 598, С. 19-33.
9. Ньи Ньи Лайнг, Гинзгеймер С.А. Наноскопическое исследование деформации многослойных углеродных нанотрубок // Наноинженерия. Сборник трудов 3-ой Всероссийской школы-семинара по направлению «Наноинженерия». М., 2010. С. 360-372.
10. Ньи Ньи Лайнг, Гинзгеймер С.А. Наноскопическое исследование влияния радиации на механические свойства многослойных углеродных нанотрубок // Наноинженерия. Сборник трудов 3-ой Всероссийской школы-семинара по направлению «Наноинженерия». М., 2010. С. 373-378.

Ньи Ньи Лайнг

Моделирование механических свойств
многослойных углеродных нанотрубок

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Подписано в печать 13.12.2011г. Формат бумаги 60х84 1/16.
Бумага типографская № 2. Печать офсетная. Усл. печ. л. 1.0.
Уч.-изд. л. 1.0. Тираж 100 экз. Заказ № 025-80-11.

КФ МГТУ им. Н.Э. Баумана
248600, г. Калуга, ул. Баженова, 2.