На правах рукописи

Зо Е Аунг

ВЛИЯНИЯ ХЕМОСОРБЦИИ ГАЛОГЕНОВ НА НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМАЦИОННОЕ СОСТОЯНИЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук



Москва – 2012

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

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук, доцент **Гинзгеймер Сергей Александрович**

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор **Горбунов Александр Константинович**

кандидат химических наук, с.н.с. **Сидоров Валентин Семенович**

Ведущая организация: ООО «МеГа Эпитех», г.Калуга

НТБ МГТУ им. Н.Э. Баумана
1997168
Зо Е АунгВлияния хемосорбц

Защита состоится « 29 » февраля 2012 г. в 14^{30} часов на заседании диссертационного совета Д 212.141.17 при ФГБОУ 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.

Автореферат разослан « 25 » января 2012 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
кандидат технических наук, доцент С.А.Лоскутов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы работы. Имеющиеся многочисленные данные свидетельствуют об уникальных свойствах углеродных нанотрубок, что служит причиной интенсивных исследований и разработок их практического применения в самых разнообразных сферах. Наибольший объем публикаций в научной литературе связан с исследованиями и анализом возможностей использования углеродных нанотрубок в качестве принципиально новой элементной базы в микро и нано электронике. Большой объем работ посвящен экспериментальным исследованиям и разработкам практического применения химических свойств углеродных нанотрубок, связанных с их способностью адсорбировать на своей поверхности различные химические элементы. Относительно меньшее внимание в научной литературе уделено исследованиям механических свойств углеродных нанотрубок и разработкам технологий их практического применения. В настоящее время наиболее подробно исследованы механические характеристики отдельно взятых углеродных нанотрубок. Надежно установлено, что их жесткость соответствует жесткости алмаза, а их прочность, на порядок превышает показатели лучших сортов стали. Более того, при упругих и неупругих деформациях, углеродные нанотрубки могут поглощать большое количество энергии. Отмеченные характеристики позволяют рассматривать углеродные нанотрубки в качестве перспективной основы для разработки новых высокопрочных и энергоемких композиционных материалов. В свою очередь, проблематика создания композиционных материалов армированных углеродными нанотрубками, порождает целый круг задач, связанных с вопросами адгезии для поверхностных атомов углеродных нанотрубок. Данные вопросы являются также ключевыми при разработки методов адресной клеточной доставки лекарственных препаратов на молекулярном уровне. Поскольку упомянутые задачи содержательно являются задачами квантовой химии, а исследования механических свойств углеродных нанотрубок преимущественно проводится методами молекулярной динамики, большую актуальность приобретает проблема построения моделей и методологий, позволяющих корректно синтезировать результаты отмеченных атомарного и наноскопического методов

исследования. С учетом сказанного, большой интерес представляет исследование особенностей адсорбирования на поверхности углеродных нанотрубок с образованием ковалентных химических связей галогенов, которые в силу специфики строения своих валентных атомарных орбиталей, обладают высокой окислительной активностью, а также непосредственно участвуют в широком круге биологических и производственно технологических циклов.

Настоящая работа посвящена разработке моделей, методов и анализу средствами компьютерного моделирования механических характеристик и свойств углеродных нанотрубок хемосорбированных галогенами.

Целью диссертационной работы являлось исследование механических характеристик и свойств углеродных нанотрубок хемосорбированных галогенами.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

- разработать математическую модель и соответствующее программное обеспечение для анализа напряженно-деформационного состояния и механических свойств хемосорбированных углеродных нанотрубок;
- на основании компьютерного моделирования провести исследование процессов адсорбции галогенов с образованием химических связей на поверхности углеродных нанотрубок, характеризуемых различными геометрическими параметрами и хиральностью;
- исследовать влияние хемосорбции на механические характеристики и свойства углеродных нанотрубок.

Научная новизна работы состоит в следующем:

- разработаны методология и соответствующее программное обеспечение для моделирования и анализа напряженно-деформационного состояния и механических свойств хемосорбированных углеродных нанотрубок;
- всесторонне исследованы особенности процессов хемосорбции галогенов на поверхности углеродных нанотрубок; определены важнейшие статистические характеристики данных процессов и их зависимости от атомарной структуры хемосорбентов, геометрических параметров и хиральности нанотрубок;

- установлены особенности изменения механизмов разрушения углеродных нанотрубок в условиях воздействия внешней нагрузки, обусловленные изменениями напряженно-деформационного состояние нанотрубок при достижения порогового уровня плотности хемосорбентов;
- поведено исследование зависимости механических характеристик углеродных нанотрубок от плотности хемосорбентов, особенностей их физического строения и геометрических параметров нанотрубки.

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

- методы компьютерного анализа напряженно-деформационного состояния углеродных нанотрубок и их механических характеристик с учетом возможности хемосорбции галогенов на их поверхности;
- результаты исследования влияния хемосорбции на напряженно-деформационное состояние нанотрубок при различных значениях геометрических параметров и хиральности нанотрубок;

– установленные закономерности влияния плотности хемосорбентов и их физических параметров на механические характеристики и свойства углеродных нанотрубок.

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 2009, 2010, 2011);
2. Всероссийских научно-технических конференциях «Наукоёмкие технологии, в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе» (МГТУ им.Н.Э.Баумана, Москва 2009, 2010, 2011);
3. Всероссийской школе-семинаре студентов, аспирантов и молодых ученых по направлению «Наноинженерия» (МГТУ им.Н.Э.Баумана, Москва 2009, 2010).

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

Объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, выводов и списка литературы. Она изложена на 128 страницах текста, содержит 32 рисунка, 10 таблиц, 104 наименования цитируемой литературы.

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 физических свойств углеродных нанотрубок.

Вторая глава диссертации посвящена разработке модели и методики моделирования. Расчет энергетических характеристик проводился в рамках формализма теории функционала плотности при разложении волновых функций по базису плоских волн, на основании метод линейных присоединённых цилиндрических волн. Расчеты проводились с использованием пакета VASP.

С учетом вычислительных ограничений, накладываемых применением метода теории функционала плотности при расчете

устойчивых конфигураций углеродных нанотрубок, число атомов расчетного сегментного кластера варьировалось от 72 до 164, в зависимости от рассматриваемых параметров и хиральности углеродной нанотрубки. Для исключения влияния края модельного объема на исследуемые процессы использовались периодические граничные условия. Первоначально, адсорбируемый атом помещался в средней части сегментного кластера углеродной нанотрубки на фиксированном расстоянии r из рассматриваемого интервала значений [50÷450] пм от внешней поверхности нанотрубки. Для фиксированных значений параметра r производился расчет функционала электронной плотности, его минимизация и вычисление соответствующих энергетических характеристик системы. Значение параметра r_o, отвечающее минимальному значению энергии системы E_o, состоящей из кластера углеродной нанотрубки и адсорбируемого атома принималось в качестве длины связи. При этом энергия связи адсорбируемого атома рассчитывалась в соответствии с выражением:

$$E = E_R - E_o , \qquad (1)$$

где E_R – энергия системы соответствующая наибольшему значению параметра r.

В третьей главе диссертации проведено исследование зависимости основных характеристик процессов хемосорбции галогенов на внешние поверхности углеродных нанотрубок от различных физических и геометрических характеристик и параметров.

Анализ проводился для углеродных нанотрубок различного диаметра и хиральности. В табл. 1 представлены абсолютные и относительные значения энергии и длины связи атома фтора для различных нанотрубок. Относительные значения, приводились к соответствующим значениям энергии и длины связи атомов фтора с плоской поверхностью листа графена, равными, соответственно: E^*=3,47 [эВ]; l^* = 1,419 [Å].

В ходе работы были рассмотрены углеродные нанотрубки типа «кресло» с параметрами (4,4); (5,5); (6,6); (7,7); (8,8); (9,9); (10,10); (11,11); (12,12); (13,13), углеродные нанотрубки типа «зигзаг» с параметрами (7,0); (8,0); (9,0); (10,0); (12,0); (14,0); (19,0); (23,0) и углеродные нанотрубки общего вида с параметрами (5,3); (6,4); (11,5); (14,8); (17,9).

Анализ полученных результатов показал, что по мере уменьшения радиуса нанотрубки типа «зигзаг» величина энергии связи возрастает, а длина связи уменьшается. Данные изменения указывают на более высокую устойчивость химической связи с искривленной поверхностью нанотрубках по сравнению с плоским листом графена. Аналогичные зависимости были получены и для нанотрубок типа «кресло» и «общего типа». Сравнительный анализ полученных результатов показал, что углеродные нанотрубки типа «зигзаг» и «кресло» представляют собой, соответственно, нижние и верхние границы влияния структуры углеродных нанотрубок на исследуемые процессы хемосорбции. При этом углеродные нанотрубки с хиральностью общего типа занимают промежуточное положение. Например, для углеродных нанотрубок общего типа (5,3), типа «зигзаг» (7,0) и типа «кресло» (4.4), во всех случаях радиусы нанотрубок примерно равны и лежат в интервале значений от 0,271 до 0,274 нм. Однако для углеродной нанотрубки типа «кресло» превышение энергии связи по отношению к плоскому листу графена на 13% больше, чем для нанотрубки типа «зигзаг», а для нанотрубки общего типа это превышение составляет чуть больше 5%. Аналогичные закономерности наблюдаются и для уменьшения длин связи.

Поскольку энергия связи увеличивается по мере уменьшения радиуса нанотрубки, а длина связи уменьшается с уменьшением радиуса, большой интерес представляет анализ зависимости величины энергии связи от величины относительного уменьшения длины связи для нанотрубок с различной хиральностью. Полученные результаты показали, что во всех случаях, независимо от хиральности углеродных нанотрубок, увеличению энергии связи сопутствует уменьшение длины связи. Во всех случаях скорость роста величины энергии связи убывает по мере возрастания величины относительного сокращения длины связи, и во всех случаях для углеродных нанотрубок типа «кресло», величины энергии связи систематически превышает соответствующие величины для нанотрубок типа «зигзаг». Уровень данного несоответствия, в зависимости от величины относительного изменения длины связи, находится в интервале значений от 7 до 11%. При этом значения энергии связи для углеродных нанотрубок общего типа оказываются заключенными между отмеченными зависимостями для углеродных нанотрубок типа «кресло» и «зигзаг». Таким образом, к числу характеристик, оказывающих влияние на значения энергии связи относятся не только длина связи и радиус нанотрубки, но и ее хиральность.

Таблица 1.

Абсолютные и относительные значения энергии и длины связи для различных нанотрубок

нанотрубки типа «кресло»						нанотрубки типа «зигзаг»						нанотрубки общего типа					
(n,n)	R [нм]	E [эВ]	$\frac{\Delta E}{E^*}$ [%]	l [Å]	$\frac{\Delta l}{l^*}$ [%]	(n,0)	R [нм]	E [эВ]	$\frac{\Delta E}{E^*}$ [%]	l [Å]	$\frac{\Delta l}{l^*}$ [%]	(n,m)	R [нм]	E [эВ]	$\frac{\Delta E}{E^*}$ [%]	l [Å]	$\frac{\Delta l}{l^*}$ [%]
(4,4)	0,271	5,87	69,3	1,264	10,21	(7,0)	0,274	5,41	56,3	1,297	8,74	(5,3)	0,274	5,59	61,5	1,284	9,47
						(8,0)	0,313	5,22	50,6	1,337	5,87						
(5,5)	0,339	5,03	45,0	1,341	3,51	(9,0)	0,352	4,71	35,9	1,355	4,59	(6,4)	0,341	4,83	39,4	1,349	4,95
(6,6)	0,407	4,56	31,2	1,372	3,29	(10,0)	0,392	4,53	30,7	1,372	3,39						
(7,7)	0,475	4,11	18,6	1,379	2,84	(12,0)	0,470	4,01	15,6	1,377	3,02						
(8,8)	0,543	4,04	16,5	1,383	2,57	(14,0)	0,548	3,89	12,1	1,383	2,56	(11,5)	0,555	3,96	14,3	1,374	3,21
(9,9)	0,611	3,95	13,9	1,385	2,47												
10,10	0,678	3,86	11,3	1,387	2,28												
11,11	0,746	3,81	9,9	1,388	2,20	(19,0)	0,744	3,78	9,1	1,391	1,96	(14,8)	0,755	3,75	8,3	1,385	2,47
12,12	0,814	3,75	8.3	1,390	2,11												
13,13	0,882	3,72	7,4	1,392	1,92	(23,0)	0,901	3,73	7,8	1,396	1,65	(17,9)	0,895	3,72	7,4	1,394	1,74

$\Delta E = |E - E^*|$; $E^* = 3{,}47$ [эВ]; $\Delta l = |l - l^*|$; $l^* = 1{,}419$ [Å]

Следующий вопрос, рассмотренный в третьей главе диссертации, связан с анализом влияния физических особенностей галогенов на исследуемые процессы хемосорбции. Известно, химическая активность элементов главной подгруппы VII группы периодической таблицы с увеличением порядкового номера уменьшается. Поэтому большой интерес представляет анализ влияния периода галогенов на особенности процессов. хемосорбции и упругие характеристики углеродных нанотрубок. В качестве адсорбентов, помимо фтора были рассмотрены хлор и бром. Полученные результаты показали (см. табл. 2), что во всех случаях по мере уменьшения радиуса нанотрубки и увеличения ее кривизны, значения энергии связи увеличиваются, а длины связей уменьшаются. Причем, по мере увеличения порядкового номера галогенов наблюдается не только соответственно уменьшение абсолютных значений энергии связи и увеличение абсолютных значений длины связи, но и происходит заметное снижение влияния радиуса углеродной нанотрубки на отмеченные характеристики процесса.

Четвертая глава диссертации посвящена анализу напряженно-деформационного состояния и механических свойств хемосорбированных углеродных нанотрубок.

В процессе итерационного расчета энергии и длины связи адсорбируемых атомов для нанотрубок, характеризуемых различными геометрическими параметрами и хиральностью, были получены параметрические зависимости энергетических характеристик системы от расстояния адсорбируемого атома до внешней поверхности нанотрубки. Данные сетки значений энергии, параметрически зависящие от диаметра нанотрубки и ее хиральности, позволяют для конкретных типов нанотрубок производить расчет потенциала взаимодействия адсорбируемого атома с криволинейной поверхностью углеродной нанотрубки и, следовательно, силы, действующей со стороны криволинейной поверхности на адсорбируемый атом. Табуляция потенциалов и сил взаимодействия адсорбируемых атомов с криволинейной поверхностью углеродных нанотрубок позволила воспользоваться методологией квазидинамического моделирования, разработанной для анализа равновесных конфигураций и механических свойств нанотрубок. Анализ формоизменения исходной конфигурации углеродных нанотрубок в результате хемосорбции позволил установить, что образование химической связи происходит трансформация равновесных положений атомов углеродной нанотрубки в области

присоединенного атома, при этом происходят изменения не только длин, но и углов химических связей в локальной области присоединения атома. Для выяснения особенностей влияния изменения углов связи, происходящих в результате адсорбции атомов на криволинейную поверхность углеродных нанотрубок, был проведен специальный анализ связанный с рассмотрением локальных структурных трансформаций. Результаты данного анализа показали, что при уменьшении радиуса нанотрубки в локализованной области хемосорбции, наблюдается трансформация угловых связей гибридизации SP3, которая сопровождается увеличением величины угла $\Delta\theta_{\perp}$, характеризующего отклонение связи от нормали к криволинейной поверхности нанотрубки. Введение математического ожидания, в соответствии с выражением:

$$\Delta\bar{\theta}_{\perp} = \frac{1}{3}\sum_{i=1}^{3}(\theta_{\perp}^{(i)} - \pi/2), \qquad (2)$$

позволило установить, что во всех случаях, независимо от типа углеродных нанотрубок, наблюдается обратная зависимость угловых характеристик от величины радиуса нанотрубки (см. табл. 3). При этом корреляции между радиусом нанотрубки и ее хиральностью формируются таким образом, что влияние величины $\Delta\bar{\theta}_{\perp}$ на величину энергии связи остаются неизменными вне зависимости от типа хиральности.

Для выяснения особенностей влияния хемосорбции на изменение локальных упругих характеристик углеродных нанотрубок, был проведен анализ зависимости поля напряжений на поверхности углеродной нанотрубки при различных уровнях внешней деформации. Полученные диаграммы показали, что в области химического соединения присутствует значительная концентрация напряжений. При этом колебания напряжений не ограничивается областью, где происходит трансформация гибридизации, наблюдается также всплески избыточных напряжений в областях достаточно отдаленных, что может служить причиной образования топологических дефектов. Для проверки данной гипотезы, был проведен сравнительный анализ эволюции разрушения углеродных бездефектных и хемосорбированных нанотрубок. Анализ последовательных стадий развития дефектной структуры в бездефектной углеродной нанотрубки (11,11) в процессе ее растяжения позволил установить, что первый

Таблица 2.

Абсолютные и относительные значения энергии связи и длины связи для различных галогенов

(n,m)	R[нм]	галоген											
		фтор $E^* = 3{,}47$ [эВ]; $l^* = 1{,}419$ [Å]				хлор $E^* = 3{,}11$ [эВ]; $l^* = 1{,}831$ [Å]				бром $E^* = 2{,}73$ [эВ]; $l^* = 2{,}021$ [Å]			
		E [эВ]	$\frac{\Delta E}{E^*}$ [%]	l [Å]	$\frac{\Delta l}{l^*}$ [%]	E [эВ]	$\frac{\Delta E}{E^*}$ [%]	l [Å]	$\frac{\Delta l}{l^*}$ [%]	E [эВ]	$\frac{\Delta E}{E^*}$ [%]	l [Å]	$\frac{\Delta l}{l^*}$ [%]
(4,4)	0,271	5,87	69,3	1,264	10,21	4,52	45,3	1,688	7,92	3,71	35,8	1,894	6,27
(5,5)	0,339	5,03	45,0	1,341	3,51	4,03	29,8	1,761	3,81	3,32	21,7	1,967	2,63
(6,6)	0,407	4,56	31,2	1,372	3,29	3,71	19,2	1,788	2,26	3,13	14,5	1,983	1,88
(7,7)	0,475	4,11	18,6	1,379	2,84	3,52	13,4	1,803	1,54	3,01	10,2	1,995	1,26
(8,8)	0,543	4,04	16,5	1,383	2,57	3,42	10,1	1,808	1,24	2,94	7,6	1,999	1,07
(10,10)	0,678	3,86	11,3	1,387	2,28	3,33	7,3	1,812	1,03	2,87	5,3	2,004	0,82
(12,12)	0,814	3,75	8.3	1,390	2,11	3,28	5,7	1,821	0,95	2,83	3,7	2,006	0,74

топологический дефект в этом случае появляется при уровне относительной деформации равном ε=9,4%. Последующее увеличение деформации сопровождается прогрессирующим ростом числа образующихся топологических дефектов. При величине относительной деформации ε=10,7%, новых дефектов не образуется. Однако, при ε=11,4%, образуется два топологических дефекта, а при ε=12,3% образуется уже три топологических дефекта. Дальнейшее увеличение деформации сопровождается катастрофическим ростом числа дефектов, что, в конечном итоге приводит к пластическому разрушению нанотрубке при уровне деформации ε=14,1%.

С целью выявления особенностей разрушения хемосорбированных углеродных нанотрубок было проведено следующее испытание. В центральной области углеродной нанотрубке (11,11) химически присоединялись атомы фтора с контролируемой погонной плотностью, после чего проводилось растяжение нанотрубки и анализ эволюции развития дефектообразования. Полученные результаты показали, что, во-первых, образование топологических дефектов для хемосорбированных углеродных нанотрубок происходит при уровне относительной деформации, примерно в полтора раза меньше, чем в случае бездефектной углеродной нанотрубки (ε=5,7%), а, во-вторых, образующиеся топологические дефекты располагаются вдали от области хемосорбций.

Сопоставление результатов эволюции разрушения бездефектных и хемосорбированных углеродных нанотрубок позволяет сделать следующие выводы. Разрушение бездефектных углеродных нанотрубок происходит в результате образования и катастрофического роста образующихся структурных дефектов на поверхности нанотрубки, и, по своей природе является пластическим. Хемосорбция обуславливает локальные изменения жесткости нанотрубки, вследствие чего, топологические дефекты зарождаются при меньших значениях относительной деформации и в областях отдаленных от непосредственного присоединения углеводородных молекул. Разрушение хемосорбированных углеродных нанотрубок, при изменении погонной плотности в интервале значений от 1,8 до 4,5 [$нм^{-1}$] приводит к снижению критического уровня допустимой деформации, соответственно от 1,34 до 1,92 раз. В отличие от нанотрубок без химических соединений, хемосорбированные нанотрубки разрушаются

Таблица 3.

Значения дополнительных углов связи $\Delta\theta_{\perp}$ и $\Delta\bar{\theta}_{\perp}$ для нанотрубок различного типа

нанотрубки типа «кресло»				нанотрубки типа «зигзаг»				нанотрубки общего типа			
(n,n)	R [нм]	$\Delta\theta_{\perp}$ [град]	$\Delta\bar{\theta}_{\perp}$ [град]	(n,0)	R [нм]	$\Delta\theta_{\perp}$ [град]	$\Delta\bar{\theta}_{\perp}$ [град]	(n,m)	R [нм]	$\Delta\theta_{\perp}$ [град]	$\Delta\bar{\theta}_{\perp}$ [град]
(4,4)	0,271	11,32	9,17	(7,0)	0,274	10,21	7,70	(5,3)	0,274	10,44	8,93
				(8,0)	0,313	8,85	6,52				
(5,5)	0,339	9,05	6,72	(9,0)	0,352	7,74	5,74	(6,4)	0,341	8,26	6,28
(6,6)	0,407	7,17	4,43	(10,0)	0,392	6,32	4,46				
(7,7)	0,475	5,35	3,17	(12,0)	0,470	4,45	3,11				
(8,8)	0,543	4,48	2,82	(14,0)	0,548	3,41	2,51	(11,5)	0,555	4,16	2,67
(9,9)	0,611	3,86	2,24								
(10,10)	0,678	3,15	2,03								
(11,11)	0,746	2,43	1,52	(19,0)	0,744	2,18	1,42	(14,8)	0,755	2,25	1,47
(12,12)	0,814	2,17	1,19								
(13,13)	0,882	1,83	1,05	(23,0)	0,901	1,57	0,96	(17,9)	0,895	1,68	1,02

хрупко, причем разрывам связей отвечают области, в которых непосредственно располагаются хемосорбированные атомы.

Анализ зависимости модуля Юнга от плотности хемосорбентов позволил установить, что по всех случаях по мере увеличения плотности, наблюдается увеличение модуля Юнга, причем в определенных интервалах значений плотности [$\lambda_н$, $\lambda_к$] данная зависимость является линейной. Численные значения границ отмеченных интервалов – величины $\lambda_н$ и $\lambda_к$ представлены в табл. 4. Там же приведены соответствующие значения модуля Юнга – величины $Y_н$, $Y_к$ и уровень относительного увеличения модуля Юнга в пределах линейной зависимости ΔY, вычисляемый как $\Delta Y = (Y_к - Y_н)/ Y_н$. Полученные результаты показали, что с ростом порядкового номера хемосорбента происходит снижение уровня относительного увеличения модуля Юнга в пределах области линейной зависимости. Более того, в пределах рассмотренных значений изменения плотности, наибольшие значения модуля жесткости отвечают хемосорбентам с наименьшим порядковым номером. Таким образом, потеря пластичности углеродных нанотрубок, также как и тенденция перехода от пластического разрушения к хрупкому проявляются тем слабее, чем выше период адсорбируемого галогена.

Таблица 4.

Значения модуля Югна на границах линейной области

периоды	$\lambda_н$[нм $^{-1}$]	$Y_н$[ТПа]	$\lambda_к$[нм $^{-1}$]	$Y_к$[ТПа]	ΔY[%]
II	1,07	0,863	3,62	1,081	25,3
III	0,94	0,858	3,96	1,034	20,4
IV	0,76	0,854	4,52	0,995	16,5

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработана математическая модель, методика компьютерного моделирования и программное обеспечение для исследования процессов хемосорбции и влияния данных процессов на напряженно-деформационное состояние и механические свойства углеродных нанотрубок.

2. Впервые проведено моделирование процессов хемосорбции галогенов второго, третьего и четвертого периода на внешние поверхности углеродных нанотрубок; получены и проанализированы основные статистические характеристики данных процессов и их зависимости от геометрических параметров и хиральности углеродных нанотрубок.

3. Введена новая статистическая характеристика - математическое ожидание угла отклонения связи от нормали, характеризующая степень трансформации гибридизации атомов углеродной нанотрубки; установлена универсальность введенной характеристики при описании зависимостей энергии связи хемосорбента от радиуса и хиральности углеродных нанотрубок.

4. Проведено исследование влияния хемосорбции на напряженно-деформационное состояние и механические характеристики углеродных нанотрубок; впервые, для углеродных нанотрубок с различными геометрическими параметрами и хиральностью, получены зависимости характеристик жесткости от плотности хемосорбентов.

5. Установлено, что трансформация гибридизации ковалентных связей атомов углеродной нанотрубки в результате хемосорбции приводит к увеличению жесткости нанотрубки и при достижении порогового значения плотности хемосорбентов углеродная нанотрубка практически полностью утрачивает свои пластические свойства и при критическом уровне деформации происходит хрупкое разрушение.

Основные результаты диссертации отражены в работах:

1. Зо Е Аунг, Гинзгеймер С.А., Смирнов А.А. Влияние хемосорбции галогенов на упругие характеристики углеродных нанотрубок // Наукоемкие технологии. 2011. Т.12, №9. С. 41-44
2. Зо Е Аунг, Белов Ю.С., Ньи Ньи Лайнг. Квазидинамическая модель моделирования механических свойств углеродных нанотрубок // Труды МГТУ. М., 2009. Т.598. Методы исследования и проектирования сложных технических систем. С. 19-33.
3. Зо Е Аунг, Белов Ю.С. Методические особенности моделирования механических свойств гибридизированных углеродных нанотрубок // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы региональной научно-технической конференции. М., 2010. Т.1. С. 194-196.
4. Зо Е Аунг, Белов Ю.С. Моделирование механических свойств

гибридизированных углеродных нанотрубок // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы региональной научно-технической конференции. М., 2010. Т.1. С. 197-198.

5. Зо Е Аунг, Белов Ю.С. Расчет энергетических характеристик гибридизации углеродных нанотрубок // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы региональной научно-технической конференции. М., 2010. Т.1. С.199-200.
6. Зо Е Аунг, Белов Ю.С., Логинов Б.М. Влияние хемосорбции на механические свойства углеродных нанотрубок // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. М., 2010. Т.2. С.14-18.
7. Зо Е Аунг, Белов Ю.С., Логинов Б.М. Механические характеристики углеродных нанотрубок с композиционными дефектами // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. М., 2010. Т.2. С.19-22.
8. Зо Е Аун, Белов Ю.С., Логинов Б.М. Химическая активность углеродных нанотрубок с дефектами // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. М., 2010. Т.2. С. 23-26.
9. Зо Е Аунг, Гинзгеймер С.А. Моделирование энергетических характеристик процессов хемосорбции галогенов // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Региональной научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. М., 2011. Т.1. С. 143-147.
10. Зо Е Аунг, Гинзгеймер С.А. Геометрические особенности трансформации гибридизации, обусловленные процессами хемосорбции // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Региональной научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. М., 2011. Т.1. С. 152-154.

Зо Е Аунг

Влияния хемосорбции галогенов
на напряженно-деформационное состояние и
механические свойства углеродных нанотрубок

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Подписано в печать .01.2012г. Формат бумаги 60х84 1/16.
Бумага типографская № 2. Печать офсетная. Усл. печ. л. 1.0.
Уч.-изд. л. 1.0. Тираж 100 экз. Заказ № 025-09-12.

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