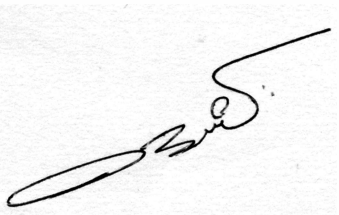
На правах рукописи

Тин Ко Ко Вин

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ДЕФЕКТОВ НА 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 **Белов Юрий Сергеевич**

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор **Жданов Сергей Михайлович**

кандидат физико-математических наук, **Власов Виктор Николаевич**

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

Защита состоится «15» 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 «13» января 2(

НТБ МГТУ им.Н.Э.Баумана
1997171
Тин Ко Ко ВинИсследование

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

ант 2 ч

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы работы. В последние десятилетия углеродные нанотрубки (УНТ), благодаря своим уникальным свойствам, привлекают пристальное внимание исследователей в самых разнообразных областях научных исследований и практических разработок. Наибольшее количество работ связано с анализом возможностей применения углеродных нанотрубок в качестве элементной базы в микро- и нано- электронике. Однако, не меньшего внимания заслуживают механические свойства нанотрубок, поскольку, наряду с прочностью сравнимой с алмазом, они характеризуются гибкостью превышающей лучшие марки стали. Несмотря на большую практическую значимость, механические свойства нанотрубок изучены крайне недостаточно. Очевидные проблемы проведения экспериментальных исследований механических свойств объектов наноскопического масштаба приводят к тому, что получаемые данные, основанные на использовании различных методик, могут приводить к результатам, различающимся между собой более чем на порядок. По-видимому, успехи в понимании природы механических свойств углеродных нанотрубок следует связывать с компьютерными экспериментами, которые позволяют, не только наиболее полно и точно воспроизводить физические процессы, протекающие на атомарном уровне в углеродных нанотрубках в условиях внешнего нагружения, но и на основе анализа гипотетических моделей появляется возможность проводить исследования и оценивать степень влияния различных механизмов появления механических свойств, что невозможно сделать ни какими другими средствами. Поскольку в условиях внешнего механического или радиационного воздействия могут образовываться структурные нарушения в регулярном чередовании образующих УНТ атомов, анализ влияния различного рода структурных дефектов нанотрубки на ее механические свойства, несомненно, является практически важной и актуальной задачей физики конденсированного состояния.

Настоящая работа посвящена разработке моделей и методов компьютерного анализа влияния топологических дефектов нанотрубок на их механические свойства.

Целью диссертационной работы являлось исследование влияния топологических дефектов углеродной нанотрубки на ее механические свойства.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

- разработать математическую модель анализа напряженно-деформационного состояния нанотрубок, содержащих топологические дефекты;
- провести сравнительный анализ характеристик напряженно-деформационного состояния и механических свойств углеродных нанотрубок, содержащих и не содержащих топологические дефекты;
- исследовать особенности парного взаимодействия топологических дефектов в условиях воздействия внешнего нагружения;
- проанализировать зависимость механических свойств углеродных нанотрубок от плотности топологических дефектов и особенностей их распределения.

Научная новизна работы состоит в следующем:

- на основе методов молекулярной динамики разработаны методы и соответствующее программное обеспечение для анализа напряженно-деформационного состояния углеродных нанотрубок, содержащих топологические дефекты;
- всесторонне изучены особенности влияния топологических дефектов на напряженно-деформационное состояние УНТ в условиях внешнего нагружения и в зависимости от геометрических параметров УНТ и ее хиральности;
- проведено исследование физических процессов парного взаимодействия топологических дефектов; определены критические параметры сближения топологических дефектов (ТД), при которых вклады ТД в суммарное разупрочнение УНТ перестают быть аддитивными; для закритических областей сближения ТД определены характеристики напряженно-деформационного состояния УНТ и изучены особенности их влияния на разупрочнение, в зависимости от геометрических параметров УНТ и ее хиральности;
- проведено исследование зависимости механических характеристик УНТ от плотности топологических дефектов и особенностей их распределения на поверхности УНТ;
- установлен многозонный характер зависимости снижения прочности УНТ от плотности топологических дефектов в случае их хаотического распределения на поверхности; дано объяснение наблюдаемых физических зависимостей, связанное с установленными специфическими особенностями продольного и поперечного взаимодействия топологических дефектов,

приводящими к увеличению дисперсии в распределениях величин углов между углеродными связями для характерных узлов дефектной структуры

Теоретическая и практическая ценность работы состоят в том, что разработанные в работе методы исследования напряженно-деформационного состояния и механических свойств УНТ в условиях внешнего нагружения могут быть использованы для анализа влияния на механические характеристики УНТ широкого круга различных дефектов, с неизбежностью образующихся в условиях радиационного облучения. Поскольку углеродные нанотрубки обладают широким спектром возможностей практического применения, установленные в работе закономерности влияния топологических дефектов на напряженно-деформационное состояние углеродных нанотрубок с различными геометрическими параметрами и хиральностью могут быть использованы при разработке новых электронных и электромеханических нано приборов и устройств.

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

На защиту выносятся следующие положения:

- метод компьютерного анализа напряженно-деформационного состояния нанотрубок и их механических характеристик с учетом содержащихся топологических дефектов;
- результаты исследования влияния топологических дефектов на напряженно-деформационное состояние нанотрубок при различных значениях геометрических параметров и хиральности УНТ;
- установленные закономерности парного физического взаимодействия топологических дефектов в условиях внешнего нагружения и закономерности влияния плотности топологических дефектов и характера их распределения на механические свойства УНТ.

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 РФ.

Объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, выводов и списка литературы. Она изложена на 126 страницах текста, содержит 48 рисунков, 2 таблицы, 118 библиографических названия.

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 УНТ.

Во второй главе диссертации проводится описание использованных и разработанных моделей и методик моделирования. Нахождение равновесного состояния УНТ в условиях действия внешней нагрузки проводилось на основе стандартных методов молекулярной динамики. Укрупненная блок-схема используемого алгоритма Плимптона представлена на рис.1. Воздействие внешней нагрузки моделировалось следующим образом. На одном конце УНТ положение атомов фиксировалось, а на другом конце атомам присваивалась постоянная скорость, направление которой соответствовало внешней нагрузке. В ходе предварительного моделирования было установлено, что при скоростях деформации $v < 200\,Å/фс$ вычисляемые характеристик практически не зависят от скорости, а при значениях диаметра нанотрубки превышающих 15 Å значения коэффициента Пуассона остаются в пределах статистической ошибки практически неизменными. Поэтому при моделировании величина скорости деформации и значение коэффициента Пуассона принималась равными соответственно $v = 200\,Å/фс$ и 0,25. Задание температуры в интервале значений [10÷400] ^{0}К проводилось на основании термостата Ланжевена. Временной шаг для перемещений атомов в новое положение выбирался равным 2 *фс*.

Для учета особенностей угловых эффектов ковалентной связи атомов в записи потенциальной энергии взаимодействия производился учет

угловых членов высокого порядка. Кривизна и замкнутость поверхности УНТ обуславливает характерные физические свойства, которые могут существенно отличаться от своих аналогов плоской графитовой

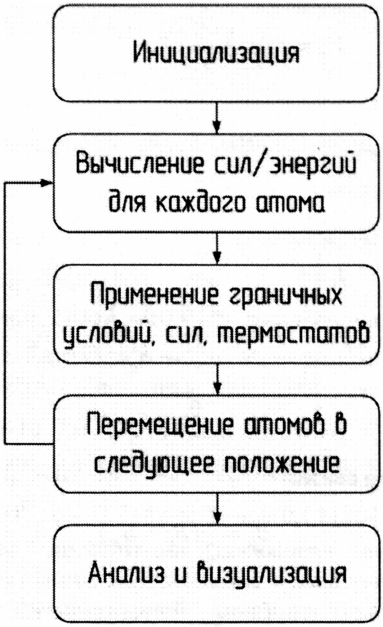


Рис.1. Блок-схема алгоритма нахождения равновесного состояния УНТ

поверхности. Если при образовании плоских структур типа графита доминирующая межатомарная связь имеет SP^2 структуру, то в углеродных нанотрубках, с учетом кривизны поверхности, корректный анализ физических свойств должен проводиться с учетом гибридизации на основе SP^3 связей. Анализу особенностей корректного описания межатомарного взаимодействия атомов углерода в научной литературе уделено большое внимание и, в настоящее время, для описания данного вида взаимодействия широко применяется потенциал Бреннера-Терсоффа, который в формализме суммирования по *i-j* связям, имеет вид:

$$E_{ij}^{BT} = \sum_{i}\sum_{j>i}\left[V_R\left(r_{ij}\right) - \bar{B}_{ij}V_A\left(r_{ij}\right)\right], \qquad (1)$$

где V_R и V_A отталкивающая и притягивающая части взаимодействия:

$$V_R = f_{ij}\left(r_{ij}\right)\frac{D_{ij}^{(e)}}{S_{ij}-1}e^{-\left(\sqrt{2S_{ij}}\beta_{ij}\left(r-R_{ij}^{(e)}\right)\right)}, \tag{2}$$

$$V_A = f_{ij}\left(r_{ij}\right)\frac{D_{ij}^{(e)}S_{ij}}{S_{ij}-1}e^{-\left(\sqrt{2/S_{ij}}\beta_{ij}\left(r-R_{ij}^{(e)}\right)\right)}, \tag{3}$$

$D_{ij}^{(e)}$ – глубина потенциальной ямы; S_{ij}, β_{ij}, $R_{ij}^{(e)}$ – эмпирические параметры; $f_{ij}\left(r_{ij}\right)$ функция отсечения:

$$f_{ij}\left(r_{ij}\right) = \begin{bmatrix} 1, & r < R_{ij}^{(1)} \\ \left[1+\cos\frac{\pi\left(r-R_{ij}^{(1)}\right)}{R_{ij}^{(2)}-R_{ij}^{(1)}}\right]\frac{1}{2} & R_{ij}^{(1)} < r < R_{ij}^{(2)} \\ 0, & r > R_{ij}^{(2)} \end{bmatrix}, \tag{4}$$

$\overline{B}_{ij}$ – функция порядка связи:

$$\overline{B}_{ij} = \frac{1}{2}(B_{ij}+B_{ji}), \tag{5}$$

$$B_{ij} = \left[1+\sum_{k\neq i,j} G(\theta_{ijk})f_{ik}(r_{ik})\right]^{-\delta_{ij}}, \tag{6}$$

где θ_{ijk} - угол между связями *i-j* и *i-k*, функция *G* задается выражением:

$$G(\theta_{ijk}) = a_0\left(1+\frac{c_0^2}{d_0^2}-\frac{c_0^2}{d_0^2+(1+\cos(\theta_{ijk}))^2}\right), \tag{7}$$

где a_0, c_0, d_0 – эмпирические параметры.

Специфика потенциала Бреннера-Терсоффа такова, что он достаточно точно воспроизводит особенности взаимодействия атомов углерода на расстояниях не превышающих 2Å. Однако при наличии дефектов особенности взаимодействия атомов УНТ на расстояниях превышающих 2Å могут иметь принципиальное значение. Имея ввиду данные обстоятельства в настоящей работе анализ равновесных конфигураций УНТ проводился на основе комбинационного потенциала, задаваемого соотношением:

$$E_{ij}(r_{ij}) = \varsigma(r_{ij})E_{ij}^{BT} + \xi(r_{ij})E_{ij}^{MM}(r_{ij}), \quad (8)$$

где $E_{ij}^{MM}(r_{ij})$ – модифицированный потенциал Морзе:

$$E_{ij}^{MM}(r_{ij}) = E_{np} + E_{ус}, \quad (9)$$

где

$$E_{np} = D_{ij}^{(e)}\{[1 - e^{-\beta_{ij}(r - R_{ij}^{(e)})}]^2 - 1\}, \quad E_{ус} = \frac{1}{2}k_\theta(\theta_{ijk} - \theta_{ijk}^{(e)})^2[1 + k_s(\theta_{ijk} - \theta_{ijk}^{(e)})^4], \quad (10)$$

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

Третья глава диссертации посвящена анализу напряженно-деформационного состояния, обусловленного топологическими дефектами УНТ. В контексте молекулярной динамики существуют различные формулировки напряжения: вириальное напряжение, атомное или BDT напряжение и напряжение Луцко. Во всех случаях расчеты производятся на основе суммирования кинетических характеристик атомов и производных от потенциалов межатомарного взаимодействия. Различия заключаются лишь в процедурах усреднения. Для вириального напряжения суммирование производится по всем атомам, занявшим общий объем системы. В случае BDT напряжения, оценка производится на основе усреднения характеристик для определенного объема связанного с конкретным атомом. Для напряжения Луцко рассматривается некоторые усредненные объемы содержащие внутри себя неоднородные или дефектные области. В соответствии с отмеченными формулировками напряжений, сформулирована методология определения сопутствующих деформаций и характеристик жесткости нанотрубок содержащих и не содержащих топологические дефекты и проведен сравнительный анализ различных способов описания механических свойств бездефектных УНТ, характеризуемых различными геометрическими параметрами и хиральностью. Результаты проведенного анализа показали, что для бездефектных УНТ зависимости напряжения от деформации для

рассмотренных способов описания практически совпадают. При этом полученные закономерности влияния диаметра УНТ и ее хиральности соответствуют известным литературным данным.

Анализ влияния топологических дефектов на напряженно-деформационное состояния УНТ позволил установить, что присутствие топологических дефектов приводит к существенному падению величины жесткости. Если для бездефектной УНТ значение модуля Юнга составляет 1,002 ТПа, то присутствие в УНТ топологического дефекта приводит к снижению значения модуля Юнга до величины 0,629÷0,639 ТПа, которое при значениях диаметра УНТ превышающих 0,8 нм, остается практически неизменным.

Для анализа влияния хиральности УНТ на особенности зависимостей напряжения от деформации были выбраны нанотрубки примерно одного диаметра и с разной хиральностью. Полученные результаты показали, что в том случае, когда топологические дефекты в УНТ отсутствуют, жесткость УНТ типа «зигзаг» выше, чем УНТ типа «кресло», и чем ближе хиральность к одному из этих предельных случаев, тем ближе соответствующие характеристики жесткости. Присутствие топологических дефектов приводит к значительному снижению жесткости УНТ, и обнаруживает нетривиальную зависимость от хиральности. Для выяснения физической природы влияния хиральности нанотрубки на эффект снижения ее жесткости за счет топологического дефекта был проведен специальный анализ особенностей локализованных деформаций в области расположения топологического дефекта. Результаты проведенного анализа позволили установить, что наблюдаемые зависимости обусловлены значительной неоднородностью характерных изменений углов связи для конкретных атомов вблизи дефектной области по мере увеличения внешней деформации. Большие изменения угла связи порождают большие компоненты вращения и большие продольные перемещения в области дефекта. Поэтому, комбинация изначальной неправильности пяти- и семиугольников топологического дефекта и больших изменений углов связи вызывает значительные угловые изменения и значительные деформации. В результате описанных больших деформаций при меньших напряжениях локальная жесткость области содержащей топологический дефект оказывается значительно ниже жесткости областей, не содержащих дефекты. Таким образом, полученные результаты позволили установить, что топологические дефекты, в силу рассмотренных структурных особенностей и характера реакции на внешнюю деформацию, обуславливают снижение локальной жесткости в результате увеличения локальной концентрации деформаций, что может служить затравкой для зарождения трещин при более низких значениях внешней деформации.

Четвертая глава диссертации посвящена исследованию процессов парного взаимодействия топологических дефектов и анализу зависимости

механических характеристик УНТ от плотности топологических дефектов и особенностей их распределения. Первоначально, анализ влияния топологических дефектов на механические характеристики нанотрубки проводился для случая парного взаимодействия. Взаимное расположение дефектов характеризовалось относительным расстоянием между ними, выраженным в относительных единицах длины углеродной связи a_0=1,44Å. Отдельно были рассмотрены случаи, когда топологические дефекты располагались вдоль длины нанотрубки и вдоль ее окружности.

Для изучения особенностей взаимодействия между топологическими дефектами, был проведен анализ изменения напряжения Луцко вдоль длины нанотрубки для случаев, когда расстояние между дефектами соответствовало значениям: $3a_0$; $12a_0$; $18a_0$; $30a_0$. Зависимости величины относительного напряжения $\frac{\sigma}{\sigma_N}$, выраженного в единицах σ_N, отвечающих бездефектной области УНТ для рассмотренных случаев взаимного расположения дефектов представлены на рис. 2. На данном рисунке нуль абсциссы координат помещен в центральную точку, равноудаленную от топологических дефектов, расположенных слева и справа от нуля на одинаковом расстоянии.

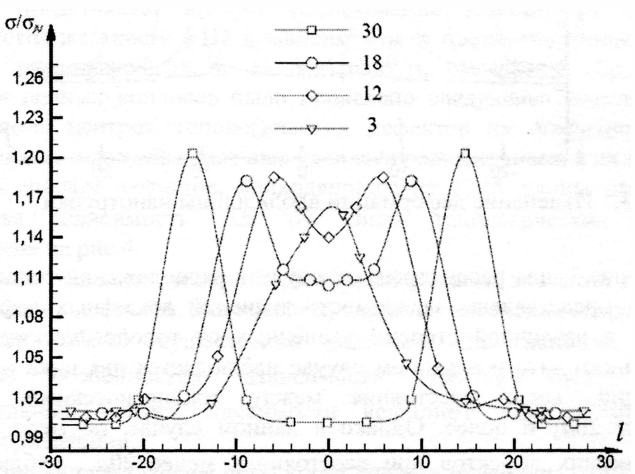


Рис.2. Изменение напряжения Луцко вдоль длины нанотрубки

Полученные результаты позволили установить, что когда расстояние между топологическими дефектами составляет порядка $20a_0$ и более, наблюдается два пика избыточных напряжений, локализация которых точно

соответствует месторасположению каждого из дефектов и дефекты практически не взаимодействуют и имеют независимые пики. В этом случае величины уровня напряжения между дефектами имеет значения, соответствующие напряжению в удаленных от дефекта областях. Однако по мере дальнейшего сближения топологических дефектов при расстояниях между ними менее $20a_0$, наблюдается слияние индивидуальных пиков избыточных напряжений, сопровождающееся одновременным снижением уровня локализованных избыточных напряжений.

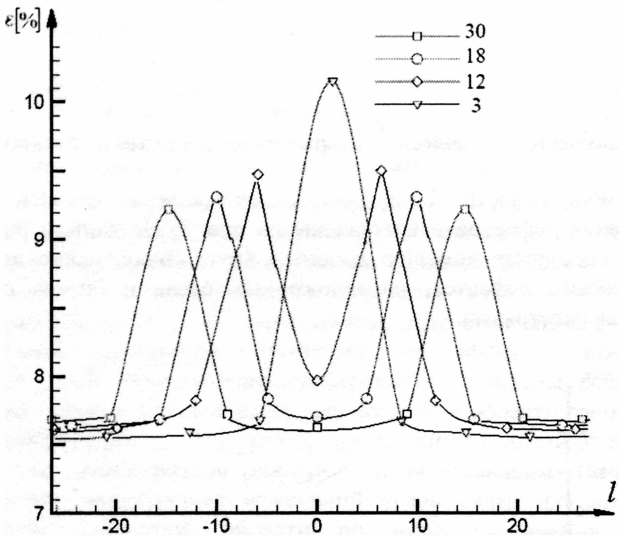


Рис.3. Изменение деформации вдоль длины нанотрубки

На рис.3, для рассмотренных случаев расположения топологических дефектов, представлены зависимости значений локальных деформаций в областях, в различной степени удаленных от топологических дефектов. Можно видеть, что и в данном случае наблюдается два пика избыточных деформаций, когда расстояние между топологическими дефектами составляет $20a_0$ и более. Однако в данном случае, по мере сближение топологических дефектов при расстояниях менее $20a_0$, наблюдается не только слияние индивидуальных пиков избыточных деформаций, но и рост их максимальных значений.

Можно видеть, что ряд особенностей, характерных для рассмотренных ранее зависимостей локальных значений напряжения вдоль длины нанотрубки, повторяются и в этом случае, однако имеются и характерные отличия. Прежде всего, полученные зависимости показывают,

что в данном случае, также как для зависимостей, представленных на рис.2, топологические дефекты не проявляют эффективного взаимного влияния, когда расстояние между ними превышает значение $20a_0$. Однако, при дальнейшем сближении дефектов, пики, отвечающие значениям величины деформации локализованной в непосредственном месторасположении дефектов, сливаются, приводя к увеличению величины локализованной деформации.

Таким образом, в то время как в процессе сближения топологических дефектов до расстояния $3a_0$ происходит почти 20% снижение избыточных пиковых локализованных напряжений, одновременно с этим, значения избыточных локализованных деформаций увеличиваются более чем на 45%. Дополнительный анализ изменения длин связей и соответствующих углов показал, что при очень малых расстояниях между топологическими дефектами, уменьшение длин связей происходит за счет изменения значений соответствующих углов между связями. В результате этого снижение локализованных напряжений реализуется в результате увеличения локализованных деформаций, что, в конечном счете, сопровождается снижением жесткости.

Поскольку в реальных условиях образование топологических дефектов на поверхности углеродной нанотрубки может носить случайный характер, представляет интерес исследование зависимости изменения характеристик жесткости УНТ в зависимости от плотности топологических дефектов, расположенных на ее поверхности случайным образом. Для выяснения данных вопросов было проведено следующее моделирование. Расположение центров топологических дефектов на поверхности УНТ генерировалось с помощью датчика псевдослучайных чисел, а их плотность задавалась числом дефектов, приходящихся на 100Å длины нанотрубки. Полученная зависимость ΔE от числа топологических дефектов представлена на рис.4.

Можно выделить четыре характерных области значений плотности топологических дефектов, для которых, характер изменения скорости роста зависимости $\Delta E(N)$ существенно различен. Для наиболее полного выяснения особенностей зависимости $\Delta E(N)$ был проведен дополнительный анализ зависимости величины ΔE от параметров взаимной ориентации.

На рис.5 представлены результаты анализа изменения относительной величины ΔE в зависимости от расположения взаимодействующих топологических дефектов, характеризуемого зенитным углом сферической системы координат, ось OZ которой совпадает с осью УНТ, плоскость XOY проходит через центр одного топологического дефекта, а радиус-вектор проведенный в центр другого топологического дефекта составляет угол θ с осью OZ. Абсолютная величина разности координат $|z_1 - z_2|$ для

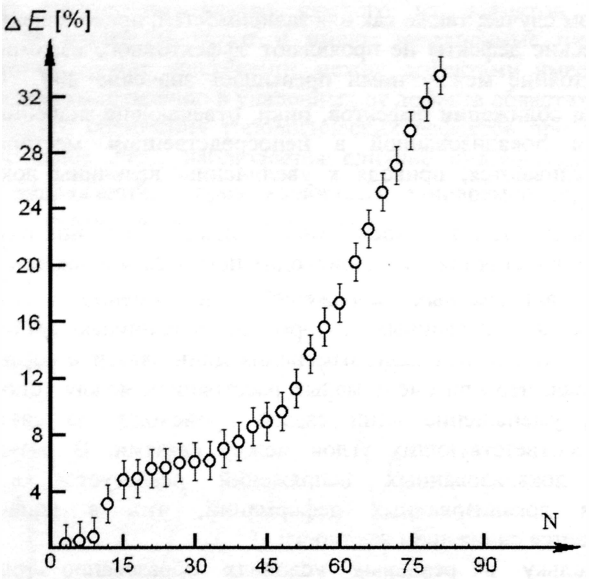


Рис.4. Зависимость ΔE от числа топологических дефектов при случайном распределении дефектов на поверхности УНТ

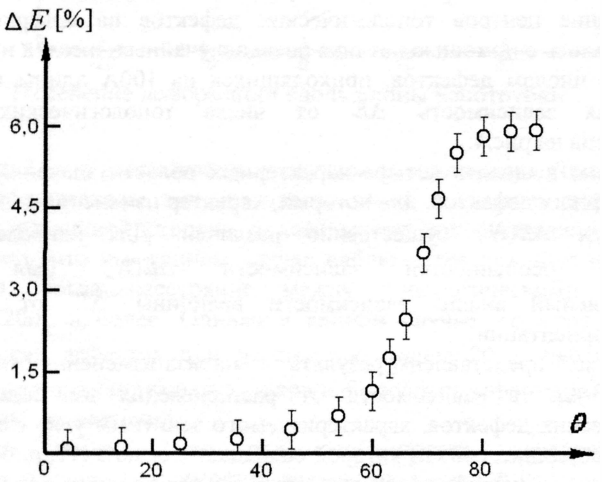


Рис.5. Зависимость от зенитного угла θ относительного уменьшения жесткости ΔE в случае парного взаимодействия дефектов

рассматриваемых дефектов превышала критическое расстояние $20a_0$, при котором, в случае продольного расположения топологических дефектов вдоль УНТ, не наблюдается их эффективное взаимодействие с перекрытием характерных пиков напряжений и деформаций. Полученные результаты позволили установить, что эффективное взаимодействие топологических дефектов начинает наблюдаться, когда угол θ превышает значение 60°. В интервале значений от 60° до 75° наблюдается резкий рост уменьшения жесткости УНТ, а при значениях зенитного угла более 75° величина ΔE остается практически постоянной и составляет значение порядка 6%.

С учетом полученных результатов зависимости относительного уменьшения жесткости УНТ от зенитного угла, характеризующего взаимное расположение топологических дефектов, был проведен дополнительный анализ, позволивший установить следующее характерные закономерности в зависимости $\Delta E(N)$, представленной на рис.4.

В интервале значений N от 0 до 9, топологические дефекты, случайно распределенные вдоль поверхности УНТ, практически не взаимодействуют. В интервале значений от 9 до 13 образуются пары топологических дефектов, для которых значения соответствующих зенитных углов превышают значения 60°, в силу чего наблюдается эффективное увеличение величины ΔE. Вместе с тем, в интервале значений числа топологических дефектов от 13 до 27 происходит насыщение в размещении топологических дефектов, при котором парные зенитные углы превышают значения в 60°, поэтому рост величины ΔE временно прекращается. Дальнейший рост ΔE в интервале значений числа топологических дефектов от 27 до 49 обусловлен их продольным взаимодействием, в то время, как увеличение скорости роста ΔE в интервале значений N от 49 до 84 обусловлено эффективным поперечным взаимодействием топологических дефектов.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Проведен детальный анализ различных способов описания и анализа локальных и интегральных характеристик напряженно-деформационного состояния углеродных нанотрубок, содержащих топологические дефекты; предложен оригинальный метод расчета напряжений и деформаций для определения модулей упругости в областях с топологическими дефектами и без них.

2. На основе методов молекулярной динамики разработана математическая модель, методика моделирования и программное обеспечение для исследований влияния топологических дефектов углеродных нанотрубок на их механические свойства.

3. Проведен детальный анализ особенностей напряженно-деформационного состояния углеродных нанотрубок в областях,

содержащих топологические дефекты при различных условиях внешнего нагружения; получены данные о влиянии геометрических параметров углеродных нанотрубок и хиральности на исследуемые характеристики в областях содержащих топологические дефекты.

4. Установлены наноскопические закономерности влияния топологических дефектов на локализованные характеристики в областях расположения топологических дефектов, связанные с особенностями дисперсионного изменения углов смежности углеродных связей в условиях внешнего нагружения, обуславливающими снижение локальной жесткости за счет увеличения локальной концентрации деформации.

5. Проведено исследование парного взаимодействия топологических дефектов в углеродных нанотрубках в условия внешнего нагружения. Установлены критические параметры сближения топологических дефектов, при которых происходит нарушение аддитивности вкладов дефектов в изменения механических свойств нанотрубок. Получены характеристики интегрального влияния взаимодействующих топологических дефектов на напряженно-деформационное состояние нанотрубок; изучено влияние геометрических параметров сближения на особенности данных характеристик.

6. Проведен анализ зависимости напряженно-деформационных характеристик углеродных нанотрубок от плотности топологических дефектов. Получены зависимости характеристик жесткости от плотности топологических дефектов для различных типов распределения дефектов на поверхности нанотрубки. Установлено, что когда распределение дефектов на поверхности нанотрубки имеет случайный характер, зависимость от их плотности величины модуля Юнга имеет многозонную структуру. Дано объяснение полученных зависимостей, основанное на установленных характерных особенностях продольного и поперечного взаимодействия топологических дефектов.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

1. Влияние топологических и радиационных дефектов на упругие характеристики углеродных нанотрубок / Тин Ко Ко Вин, Б.М. Логинов, Ю.С. Белов [и др.] // Наукоемкие технологии. 2011. Т.12, № 9. С. 45-52.

2. Тин Ко Ко Вин, Проскурнин А.Н., Логинов Б.М. Влияния плотности топологических дефектов на механические характеристики УНТ // Наноинженерия. Сборник трудов 3-ей Всероссийской школы-семинара по направлению «Наноинженерия». М., 2010. С. 406-411.

3. Тин Ко Ко Вин, Проскурнин А.Н., Логинов Б.М. Исследование парного взаимодействия топологических дефектов углеродных нанотрубок // Наноинженерия. Сборник трудов 3-ей Всероссийской

школы-семинара по направлению «Наноинженерия». М., 2010. С. 401-405.

4. Тин Ко Ко Вин, Пономарев А.В., Белов Ю.С. Оценка эффективности молекулярно-динамического алгоритма 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. 74-76.

5. Тин Ко Ко Вин, Пономарев А.В., Белов Ю.С. Молекулярно-динамический алгоритм моделирования УНТ с дефектами // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы Всероссийской научно-технической конференции. М., 2009. Т. 2. С. 72-73.

6. Тин Ко Ко Вин, Пономарев А.В., Белов Ю.С. Особенности молекулярно-динамического 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. 70-71.

7. Тин Ко Ко Вин, Проскурнин А.Н., Логинов Б.М. Наноскопическое моделирование топологических дефектов в нанотрубках // Наноинженерия. Сборник трудов 1-ой Всероссийской школы-семинара по направлению «Наноинженерия». М., 2008. С. 332-341.

8. Тин Ко Ко Вин. Особенности описания механических свойств УНТ содержащих топологические дефекты // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы региональной научно-технической конференции. М., 2010. Т. 2. С. 56-58.

9. Тин Ко Ко Вин, Проскурнин А.Н., Логинов Б.М. Анализ внутренних полей напряжений, порождаемых топологическими дефектами в нанотрубках // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы региональной научно-технической конференции. М., 2008. Т.2. С. 80-85.

10. Тин Ко Ко Вин, Проскурнин А.Н., Логинов Б.М. Влияние хиральности нанотрубки с топологическими дефектами на характеристики жесткости // Наукоемкие технологии в приборо- и машиностроении и развитие инновационной деятельности в вузе: Материалы региональной научно-технической конференции. М., 2008. Т.2. С. 73-79.

Тин Ко Ко Вин

Исследование влияния топологических дефектов
на механические свойства углеродных нанотрубок

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Подписано в печать 18.01.2012 г. Формат бумаги 60x84 1/16.
Бумага типографская № 2. Печать офсетная. Усл. печ. л. 1.0.
Уч.-изд. л. 1.0. Тираж 100 экз. Заказ № 028-90-11.

Московский государственный
технический университет имени Н.Э. Баумана
Калужский филиал
248600, г. Калуга, ул. Баженова, 2.