

10, октябрь 2015

УДК 539.3

Изучение взаимосвязи между упругими характеристиками однослойной углеродной нанотрубки и графена

Сергеева Е.С., студент

*Россия, 105005, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана,
кафедра «Прикладная математика»*

Научный руководитель: Зарубин В.С., д.т.н., профессор

*Россия, 105005, г. Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана
кафедра «Прикладная математика»*

fn@bmstu.ru

В настоящее время в качестве армирующего материала в композитах широкое применение получили углеродные нанотрубки (УНТ). Ранние теоретические работы и недавние эксперименты в области исследования однослойных нанотрубок доказали, что нанотрубки являются одним из наиболее прочных материалов [1, 2, 3]. Данные по нанотрубкам имеют большой разброс по значениям. Например, модуль Юнга однослойных нанотрубок лежит в диапазоне от 0,22 ТПа до 3,6 ТПа [4, 5, 6]. Существуют различные математические модели, позволяющие на основе механических свойств нанотрубок определить механические свойства армированного ими композита. Даже при малых концентрациях армирующих элементов упругие характеристики композитов значительно улучшаются по сравнению с неармированным материалом [7, 8, 9]. Поэтому исследование и уточнение механических свойств ОУНТ является актуальной задачей.

Как известно, прообразом нанотрубки является графеновая плоскость. Графен представляет собой однослойную двумерную углеродную структуру, поверхность которой регулярным образом выложена правильными шестиугольниками со стороной 0,142 нм и атомами углерода в вершинах (рис. 1) [10].

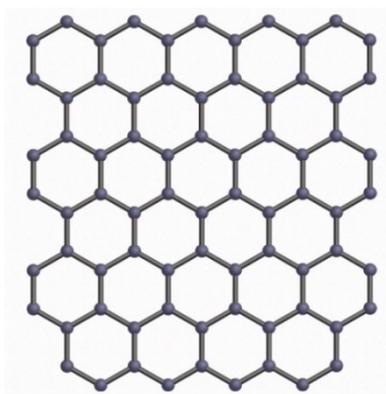


Рис. 1. Структура графена

Подобная структура является составляющим элементом кристаллического графита, в котором графеновые плоскости расположены на расстоянии примерно 3,4 нм друг от друга. За несколько лет, прошедших после первой публикации о получении и исследовании индивидуальных образцов графена, было разработано множество подходов к синтезу этого материала (микромеханическое расслоение графена, жидкофазное расслоение графита, окисление графита и синтез графена методом химического осаждения паров и т.д.) [10, 11, 12]. Открытие графена стало возможным только недавно, так как при получении графена наиболее трудной стадией является не столько синтез образцов, сколько идентификация и установление их основных параметров (размеры, число слоёв) [10, 13, 14, 15, 16]. В результате открытия сравнительно простого способа выделения индивидуального образца графена [13, 14, 15, 16] в последние годы резко возрос интерес к получению, исследованию и практическому использованию графена. Этот интерес обусловлен уникальными физико-химическими свойствами графена, такими как высокая электро- и теплопроводность, высокая упругость и хорошие электромеханические характеристики [10, 17]. Графен имеет необычные механические свойства [10, 18]. Наряду с хрупкостью он проявляет высокую податливость. Например, его можно упруго растянуть, удлиняя на 20 % [19, 20].

Графен в силу наличия более трёх осей симметрии расположения атомов в его плоскости следует считать изотропным в этой плоскости [21, 22, 23]. Поэтому упругие свойства графена в данной плоскости можно характеризовать двумя независимыми параметрами: продольным модулем упругости (модулем Юнга) E и коэффициентом поперечной деформации (коэффициентом Пуассона) ν .

Исследуем и установим взаимосвязь между упругими характеристиками однослойного графена в предположении его изотропии в плоскости шестиугольных ячеек и образованной из графена в виде цилиндрической оболочки однослойной углеродной нанотрубки (ОУНТ) в предположении её трансверсальной изотропии относительно продольной оси. Для модуля сдвига в этой плоскости будет справедливо соотношение [24]

$$\mu = \frac{E(1 + \nu)}{2}. \quad (1)$$

Однослойную углеродную нанотрубку (ОУНТ) будем считать круговой цилиндрической оболочкой толщиной h и наружным диаметром D , свёрнутой из листа однослойного графена той же толщины. Тогда радиус срединной поверхности такой оболочки будет равен $R = (D - h)/2$.

Условную толщину h однослойного графена обычно связывают с диаметром атома углерода, принимая толщину равной 0.075 нм [25]. Ось ОУНТ обозначим Ox_3 , а координатные оси в плоскости, перпендикулярной оси Ox_3 – соответственно Ox_1 и Ox_2 . В силу изотропии графена упругие свойства ОУНТ в направлении осей Ox_1 и Ox_2 следует считать одинаковыми, т.е. плоскость, перпендикулярная оси Ox_3 , должна быть плоскостью изотропии.

Тогда ОУНТ одновременно можно считать и круговой цилиндрической оболочкой и прямолинейным круглым стержнем диаметром D , обладающим свойством трансверсальной изотропии относительно продольной оси Ox_3 . Перейдём к установлению связи между указанными выше упругими характеристиками графена и коэффициентами податливости такого стержня.

Растяжение стержня и оболочки. При нагружении стержня силой P , растягивающей его вдоль ось Ox_3 (рис. 2), возникнет деформация $\varepsilon_{33} = S_{33}\sigma_{33}$, где $\sigma_{33} = 4P/(\pi D^2)$ – напряжение в поперечном сечении стержня.



Рис. 2. Растяжение стержня силой P

Это напряжение связано с напряжением, которое возникнет в оболочке и будет равно

$$\sigma'_{33} = \frac{P}{\pi(D-h)/h} = \frac{\sigma_{33}}{4(1-\eta)\eta}, \quad (2)$$

где $\eta = h/D$. В изотропном графене такое напряжение в силу закона Гука вызовет деформацию $\varepsilon'_{33} = \sigma'_{33}/E$. Приравнявая деформации ε_{33} и ε'_{33} и учитывая соотношение (2), находим

$$S_{33} = \frac{\varepsilon_{33}}{\sigma_{33}} = \frac{\varepsilon'_{33}/4}{\sigma_{33}(1-\eta)\eta} = \frac{1/4}{E(1-\eta)\eta}. \quad (3)$$

Сила P (рис. 2), согласно обобщённому закону Гука [24], вызовет в стержне деформации в направлениях осей Ox_1 и Ox_2 , для трансверсально изотропного стержня равные $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = S_{13}\sigma_{33} = S_{23}\sigma_{33}$. В поперечном сечении стержня возникнет напряжение $\sigma_{33} = 4P/(\pi D^2)$. В изотропном графене такое напряжение в силу обобщённого закона Гука вызовет деформацию $\varepsilon'_{11} = -\nu\sigma'_{33}/E$.

Приравнявая деформации ε_{11} и ε'_{11} и учитывая соотношение (2), находим

$$S_{13} = S_{23} = \frac{\varepsilon_{11}}{\sigma_{33}} = \frac{-\nu\sigma'_{33}/4}{E\sigma'_{33}(1-\eta)\eta} = \frac{-\nu/4}{E(1-\eta)\eta}. \quad (4)$$

Нагружение крутящим моментом стержня и оболочки. Для нахождения коэффициента податливости $S_{66} = 2(S_{11} - S_{12}) = 2\varepsilon_{12}/\sigma_{12}$, определяющего связь между деформацией сдвига ε_{12} в плоскости изотропии стержня, перпендикулярной его продольной оси Ox_3 , и касательным напряжением σ_{12} в этой плоскости, рассмотрим

нагружение одинаковым крутящим моментом M_3 (рис. 3) как стержня, так и оболочки, образованной сворачиванием графена.

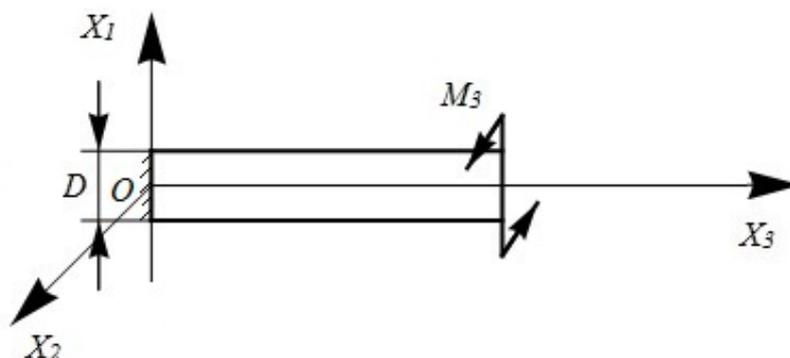


Рис. 3. Нагружение крутящим моментом M_3 стержня

При этом наибольшее касательное напряжение в стержне диаметром D будет равно [24]

$$\sigma_{12}^* = \frac{16M_3}{\pi D^3},$$

а соответствующая деформация сдвига –

$$\varepsilon_{12}^* = \frac{S_{66}\sigma_{12}^*}{2} = \frac{8S_{66}M_3}{\pi D^3}. \quad (5)$$

При нагружении круговой цилиндрической оболочки толщиной h с наружным диаметром D таким же крутящим моментом для однородного по толщине касательного напряжения можно записать [24]

$$\sigma'_{12} = \frac{M_3}{2\pi R^2 h} = \frac{4M_3}{\pi(D-h)^2 h}.$$

Этому напряжению соответствует деформация сдвига

$$\varepsilon'_{12} = \frac{\sigma'_{12}}{2\mu} = \frac{2M_3}{\pi(D-h)^2 h\mu}. \quad (6)$$

Приравнивая правые части соотношений 5 и 6 получаем

$$S_{66} = \frac{1/4}{(1-\eta)^2 \eta \mu}. \quad (7)$$

В плоскости изотропии для коэффициентов податливости справедливо равенство [24]

$$S_{66} = 2(S_{11} - S_{12}). \quad (8)$$

Это равенство совместно с формулой (1) используем для нахождения коэффициентов податливости $S_{11} = S_{22}$ и $S_{12} = S_{22}$. Для этого сначала рассмотрим нагружение стержня диаметром D давлением p , равномерно распределённым по боковой поверхности этого стержня. При таком нагружении в стержне возникает однородное напряжённое состояние с напряжениями $\sigma_{11} = \sigma_{22} = -p$ при $\sigma_{33} \equiv 0$. Однородное деформированное состояние, согласно обобщённому закону Гука [24] будут характеризовать компоненты тензора деформации

$$S_{11} = S_{22} = (S_{11} + S_{12})\sigma_{11} = -(S_{11} + S_{12})p. \quad (9)$$

При этом величина деформации ε_{11} совпадает с относительным уменьшением диаметра стержня.

При таком нагружении тонкостенной круговой цилиндрической оболочки в ней возникнут в окружном (тангенциальном) направлении напряжение

$$\sigma'_t = -p(D - h)/(2h)$$

и деформация

$$\varepsilon'_t = \frac{\sigma'_t}{E} = -p \frac{D - h}{2Eh}. \quad (10)$$

Эта деформация будет определять относительное уменьшение диаметра оболочки, эквивалентное уменьшению диаметра стержня.

Тогда из равенства правых частей (9) и (10) получим

$$S_{11} + S_{12} = \frac{1 - \eta}{2\eta E}. \quad (11)$$

Из формул (8) и (11) с учётом равенства (7) следует

$$S_{11} = S_{22} = \frac{1 - \eta}{4\eta E} + \frac{1/16}{(1 - \eta)^2 \eta \mu} \quad (12)$$

и

$$S_{12} = S_{21} = \frac{1 - \eta}{4\eta E} - \frac{1/16}{(1 - \eta)^2 \eta \mu}. \quad (13)$$

Приложение касательных напряжений. Для нахождения коэффициентов податливости $S_{44} = S_{55}$ ОУНТ определим напряжённо-деформированное состояние участков стержня и оболочки между двумя поперечными сечениями, в каждом из которых заданы противоположно направленные перезывающие силы. В первом приближении эту задачу можно решить следующим образом. В прямолинейном стержне с круглым поперечным сечением диаметром D двумя поперечными сечениями выделим участок длиной ΔL .

Такой участок геометрически будет представлять собой круглую таблетку толщиной ΔL . Введём прямоугольную декартову систему координат $Ox_1 x_2 x_3$ с началом в центре нижнего основания таблетки и осью Ox_3 , направленной перпендикулярно этому основанию. Нижнее основание таблетки примем жёстко закреплённым, а к верхнему основанию приложим касательные напряжения τ_{31} , направленные вдоль оси Ox_1 (рис. 4, а).

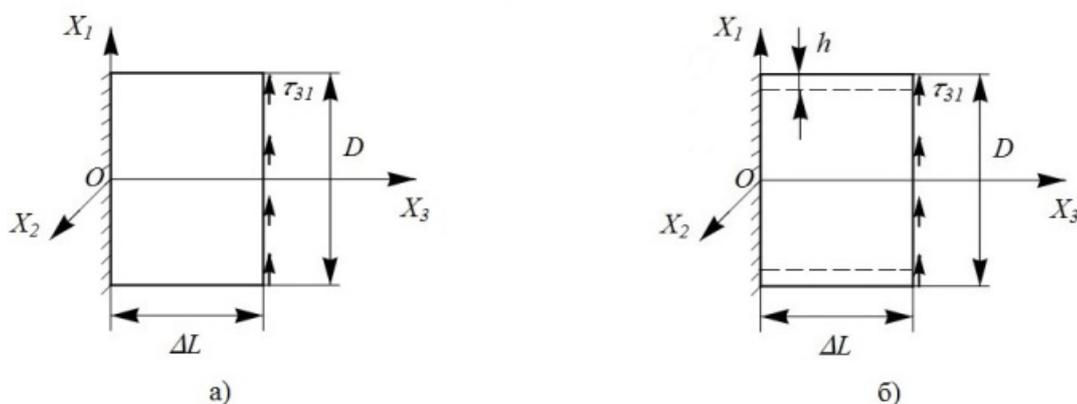


Рис. 4. Касательные напряжения τ_{31} , направленные вдоль оси Ox_1 , приложенные к верхнему основанию: а) к участку стержня; б) к участку цилиндрической оболочки

Будем считать, что напряжения τ_{31} могут сдвинуть все частицы, принадлежащие верхнему основанию, вдоль оси Ox_1 на малое расстояние Δx_1 , а у всех образующих боковой поверхности таблетки, в исходном состоянии параллельных оси Ox_3 , возникнет одинаковый наклон, определяемый углом $\gamma = \Delta x_1 / \Delta L$. Примем, что этот угол

соответствует деформации сдвига стержня в плоскости $x_1 O x_3$. Тогда для материала стержня можно считать из обобщённого закона Гука, что $C_{44} = C_{55} = \tau_{31}/\gamma$.

В сплошном стержне при однородной деформации сдвига γ для касательных напряжений в плоскости верхнего основания получим $\tau_{31} = \text{const}$, что соответствует перерезывающей силе

$$Q = \pi \frac{D^2}{4} \tau_{31} = \pi \frac{D^2}{4} C_{44} \gamma. \quad (14)$$

Для установления связи C_{44} с упругими характеристиками графена заменим таблетку участком свёрнутой из графена круговой цилиндрической оболочки (рис. 4, б) толщиной h с радиусом $R = (D - h)/2$ срединной поверхности и той же длиной ΔL . При закреплённом нижнем основании этого участка оболочки сдвиг вдоль оси $O x_1$ верхнего основания как абсолютно жёсткого целого на малое расстояние Δx_1 приведёт к одинаковому наклону всех образующих оболочки, определяемому тем же углом γ . Но в отличие от материала сплошного стержня сдвиговая деформация полотна графена не будет однородной. Дело в том, что наклон образующих оболочки с исходными координатами $(x_1 = \pm R, x_2 = 0)$ не приведет к деформации сдвига графена, тогда как наклон образующих с исходными координатами $(x_1 = 0, x_2 = \pm R)$ вызовет в полотне графена деформацию сдвига, равную γ .

Если от декартовой системы координат перейти к цилиндрической с отсчитываемой от оси $O x_1$ угловой координатой φ в плоскости $x_1 O x_2$, то изменение деформации сдвига полотна графена будет описывать зависимость $\gamma^*(\varphi) = \gamma \sin\varphi$. Чтобы вызвать в графене деформацию $\gamma^*(\varphi)$, необходимо в направлении оси $O x_1$ приложить касательное напряжение

$$\tau_{31}^*(\varphi) = \mu \gamma^*(\varphi) \sin\varphi = \mu \gamma \sin^2\varphi.$$

Для этого к верхнему основанию оболочки следует приложить суммарную перерезывающую силу

$$Q^* = 2Rh \int_0^\pi \tau_{31}^*(\varphi) d\varphi = 2Rh\mu\gamma \int_0^\pi \sin^2\varphi d\varphi = \pi Rh\mu\gamma. \quad (15)$$

Тогда из формул (14) и (15) при условии $Q = Q^*$ получим

$$C_{44} = C_{55} = \mu \frac{4Rh}{D^2} = 2\mu\eta(1 - \eta). \quad (16)$$

Приближённость приведённого решения связана с рядом принятых допущений, которые в дальнейшем требуют уточнения на основе более строгой постановки задачи. Одно из допущений связано с предположением об однородности сдвиговой деформации в таблетке, соответствующей фрагменту сплошного стержня. Второе допущение игнорирует искажение первоначально круглого верхнего поперечного сечения оболочки из графена при нагружении перерезывающей силой. Это допущение можно оправдать выбором весьма малого значения ΔL , что снижает искажение верхнего сечения оболочки благодаря жёсткому закреплению ей нижнего поперечного сечения, но тогда возникают сомнения в правомерности замены $\operatorname{tg} \gamma$ углом γ .

Коэффициенты податливости $S_{44} = S_{55}$ ОУНТ можно также найти из решения следующей задачи. В прямолинейном стержне с круглым поперечным сечением диаметром D двумя поперечными сечениями выделим участок длиной ΔL (рис. 5, а). Такой участок геометрически будет представлять собой круглую таблетку толщиной ΔL . Введём прямоугольную декартову систему координат $Ox_1 x_2 x_3$ с началом в центре нижнего основания таблетки и осью Ox_3 , направленной перпендикулярно этому основанию. Разрежем таблетку пополам плоскостью, содержащей ось Ox_3 . Далее будем рассматривать только верхнюю половину таблетки. Закрепим все точки, лежащие в плоскости разреза шарнирами, тем самым обеспечив запрет на перемещение по вертикали и горизонтали, но разрешив поворот в плоскости $x_1 Ox_3$. Аналогично закрепим шарнирами все точки верхней боковой поверхности. К верхней боковой поверхности приложим касательные напряжения τ_{13} , направленные вдоль оси Ox_3 (рис. 5 б). Будем считать, что эти напряжения могут сдвинуть все частицы, принадлежащие верхней боковой поверхности, вдоль этой оси на малое расстояние Δx_3 , причём у верхнего основания, в исходном состоянии параллельного оси Ox_1 , возникнет наклон (рис. 5 в), определяемый следующим соотношением: $\gamma = 2\Delta x_3/D$. Так как в плоскости разреза таблетки все точки закреплены шарнирами, то точки боковой поверхности нижней половины таблетки переместятся на расстояние Δx_3 , но в противоположную сторону. Примем, что этот угол соответствует деформации сдвига стержня в плоскости $x_1 Ox_3$. Тогда для материала стержня можно считать из обобщённого закона Гука, что $C_{44} =$

$C_{55} = \tau_{13}/\gamma$. В сплошном стержне при однородной деформации сдвига γ для касательных напряжений на верхней боковой поверхности получим, что τ_{13} имеет постоянное значение, что соответствует перерезывающей силе

$$Q = \pi \frac{D^2}{8} \tau_{13} = \pi \frac{D^2}{8} C_{44} \gamma. \quad (17)$$

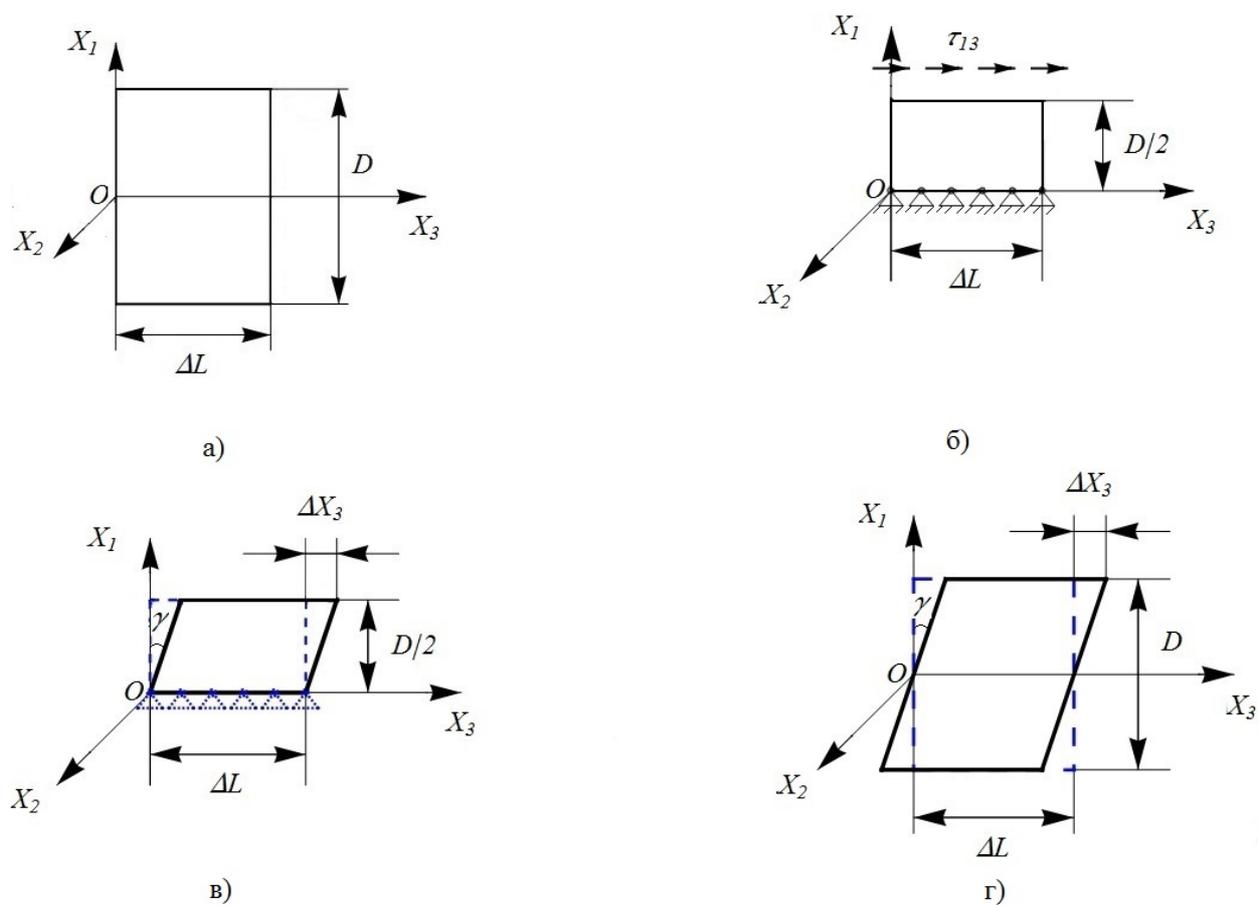


Рис. 5. а) таблетка в недеформированном состоянии; б) разрез таблетки на две равные части плоскостью, содержащей ось Ox_3 ; в) верхняя половина таблетки в деформированном состоянии; г) таблетка в деформированном состоянии

Для установления связи C_{44} с упругими характеристиками графена заменим таблетку участком свёрнутой из графена круговой цилиндрической оболочки толщиной h с радиусом $R = (D - h)/2$ срединной поверхности и той же длиной ΔL (рис. 6 а).

Разрежем оболочку пополам плоскостью, содержащей ось Ox_3 . Далее будем рассматривать только верхнюю половину оболочки. Закрепим все точки, лежащие в плоскости разреза шарнирами, тем самым обеспечив запрет на перемещение по вертикали и горизонтали, но разрешив поворот в плоскости x_1Ox_3 . Аналогично закрепим шарнирами все точки верхней боковой поверхности. К верхней боковой поверхности приложим касательные напряжения τ_{13} , направленные вдоль оси Ox_3 (рис. 6 б).

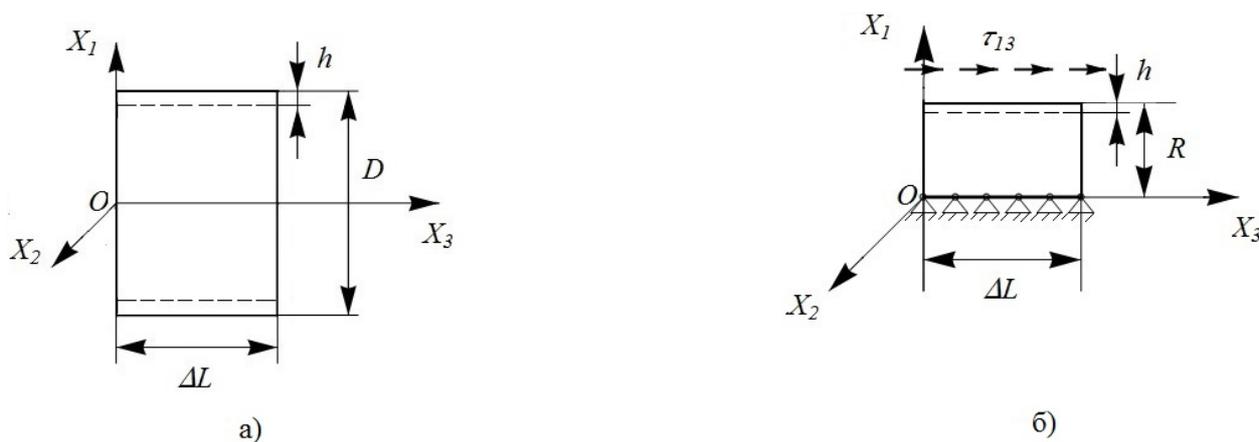


Рис. 6. а) оболочка в недеформированном состоянии; б) разрез оболочки на две равные части плоскостью, содержащей ось Ox_3

При шарнирном закреплении точек оболочки, лежащих в плоскости разреза, сдвиг вдоль оси Ox_3 верхней боковой поверхности как абсолютно жёсткого целого на малое расстояние Δx_3 приведёт к одинаковому наклону всех точек рассматриваемой части основания, определяемому тем же углом γ . Но в отличие от материала сплошного стержня сдвиговая деформация точек основания не будет однородной. Дело в том, что наклон образующих оболочки с исходными координатами $(x_1 = 0, x_2 = \pm R)$ не приведет к деформации сдвига графена, тогда как наклон образующих с исходными координатами $(x_1 = \pm R, x_2 = 0)$ вызовет в полотне графена деформацию сдвига, равную γ .

Если от декартовой системы координат перейти к цилиндрической с отсчитываемой от оси Ox_3 угловой координатой φ в плоскости x_1Ox_2 , то изменение деформации сдвига полотна графена будет описывать зависимость $\gamma^*(\varphi) = \gamma \cos\varphi$.

Чтобы вызвать в графене деформацию $\gamma^*(\varphi)$, необходимо в направлении оси Ox_3 приложить касательное напряжение

$$\tau_{13}^*(\varphi) = \mu\gamma^*(\varphi)\cos\varphi = \mu\gamma\cos^2\varphi.$$

Для этого к верхней боковой поверхности оболочки следует приложить распределённые по боковой поверхности касательные напряжения

$$Q^* = Rh \int_0^{\pi} \tau_{13}^*(\varphi) d\varphi = Rh\mu\gamma \int_0^{\pi} \cos^2\varphi d\varphi = \frac{\pi}{2} Rh\mu\gamma. \quad (18)$$

Тогда из формул (17) и (18) при условии $Q = Q^*$ получим

$$C_{44} = C_{55} = \mu \frac{4Rh}{D^2} = 2\mu\eta(1 - \eta). \quad (19)$$

Приближённость приведённого решения связана с рядом принятых допущений, которые в дальнейшем требуют уточнения на основе более строгой постановки задачи. Одно из допущений связано с предположением об однородности сдвиговой деформации в таблетке, соответствующей фрагменту сплошного стержня. Второе допущение игнорирует искажение первоначально круглого верхнего поперечного сечения оболочки из графена при нагружении распределёнными по боковой поверхности касательными напряжениями. Это допущение можно оправдать выбором весьма малого значения ΔL , что снижает искажение верхнего сечения оболочки благодаря жёсткому закреплению ей нижнего поперечного сечения, но тогда возникают сомнения в правомерности замены $\operatorname{tg} \gamma$ углом γ .

Сопоставив формулы (16) и (19), можно увидеть, что они эквивалентны. Следовательно, можно сделать вывод, что касательные напряжения τ_{31} вызывают такую же деформацию, что и касательные напряжения τ_{13} .

Элементы $C_{44} = C_{55}$ матрицы коэффициентов упругости связаны с элементами $S_{44} = S_{55}$ матрицы коэффициентов податливости соотношением [26]

$$S_{44} = S_{55} = \frac{1}{C_{44}} = \frac{1}{C_{55}}. \quad (20)$$

Конфигурация ОУНТ. Для реализации количественного анализа полученных соотношений (3), (4), (7), (12), (13) и (19), связывающих продольный модуль упругости E ,

коэффициент Пуассона ν и модуль сдвига μ однослойного графена с элементами матрицы податливости ОУНТ, рассмотрим два типа ОУНТ: Armchair («кресло») и Zigzag («зигзаг»). Идеальная ОУНТ – свёрнутая в цилиндр графеновая плоскость, то есть поверхность, выложенная правильными шестиугольниками, в вершинах которых расположены атомы углерода. Результат такой операции зависит от угла ориентации графеновой плоскости относительно оси нанотрубки. Угол ориентации, в свою очередь, задаёт хиральность нанотрубки, которая определяет её характеристики [27]. Хиральность нанотрубок обозначается набором символов (n, m) , указывающих координаты шестиугольника, который в результате сворачивания плоскости должен совпадать с шестиугольником, находящимся в начале координат.

Другой способ обозначения хиральности состоит в указании угла θ между направлением сворачивания нанотрубки и направлением, в котором соседние шестиугольники имеют общую сторону (рис. 7).

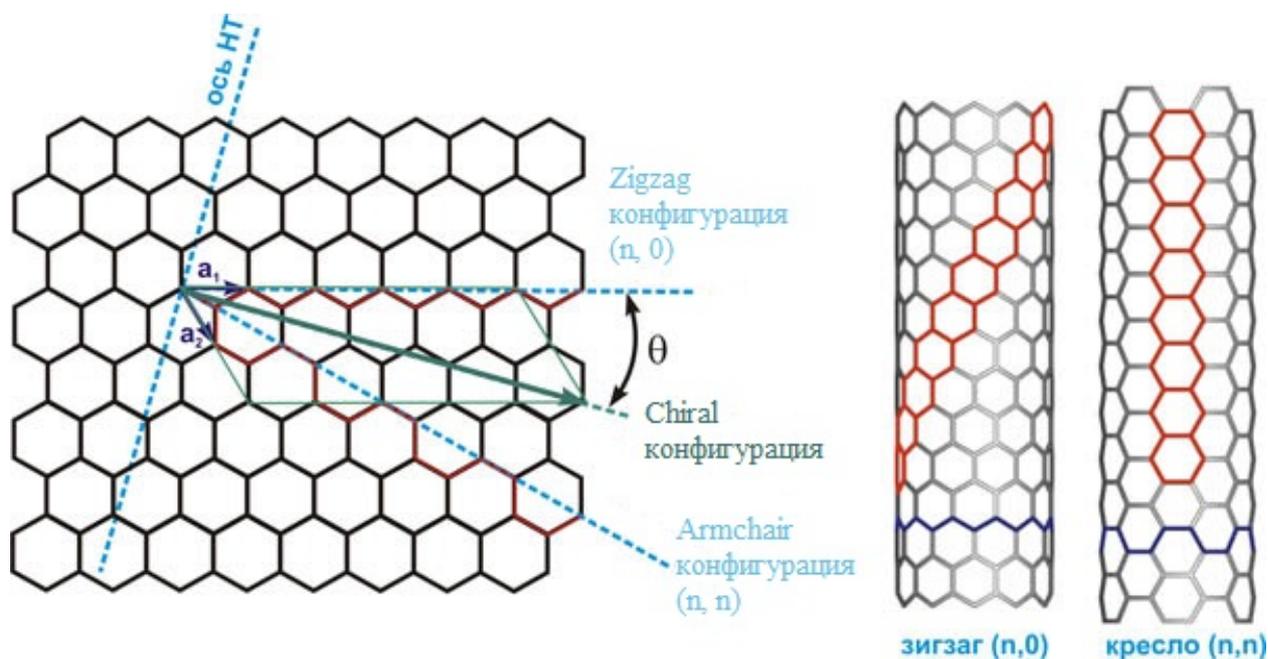


Рис. 7. Представление вектора, по которому осуществляется скручивание листа графена в виде линейной комбинации базисных векторов

Однако в этом случае для полного описания геометрии нанотрубки необходимо указать её диаметр [28]. Индексы хиральности однослойной нанотрубки (n, m) однозначным образом определяют её диаметр D [28]

$$D = \frac{\sqrt{3}d_0}{\pi} \sqrt{m^2 + n^2 + mn},$$

где $d_0 = 0,142$ нм – расстояние между соседними атомами углерода в графеновой плоскости.

Связь между индексами хиральности (n, m) и углом θ даётся соотношением

$$\sin \theta = \frac{n\sqrt{3}}{2\sqrt{m^2 + n^2 + mn}}.$$

Среди различных возможных направлений сворачивания нанотрубок выделяются те, для которых совмещение шестиугольника (n, m) с началом координат не требует искажения его структуры. Этим направлениям соответствуют, в частности, углы $\theta = 0^\circ$ (Zigzag конфигурация) и $\theta = 30^\circ$ (Armchair конфигурация). Указанные конфигурации отвечают хиральностям $(n, 0)$ и (n, n) соответственно. Остальные комбинации индексов (рис. 8) хиральности описывают конфигурацию Chiral [29].

Анализ данных из источников. Рассмотрим несколько значений модуля Юнга E и соответствующие им значения коэффициента Пуассона ν графена (табл. 1).

Таблица 1

Значения модуля Юнга E и коэффициента Пуассона ν графена

Экспериментально полученные данные			Данные, полученные численно		
№	E , ТПа	ν	№	E , ТПа	ν
1	1,1 [30]	0,125 [30]	4	1,2 [33, 34]	0,412 [33,34]
2	1,1 [31]	0,170 [31]	5	0,7 [33, 34]	0,397 [33, 34]
3	1,0 [32]	0,249 [32]	6	0,7 [33]	-0,158 [33]

Как следует из таблицы 1, расхождение между экспериментальными и теоретическими данными весьма существенно. Парадоксальным является факт, что один из методов анализа (потенциал Терзоффа [33]) дает отрицательное значение ν , но для полноты анализа данных из источников рассмотрим и это значение коэффициента Пуассона однослойного графена. Также интересным является тот факт, что другой метод

анализа (потенциал Бреннера 1-го поколения [33]) дает значение $\nu = 0,412$, близкое к максимально возможному 0,5.

Результаты расчетов. Найдем значения элементов матрицы коэффициентов податливости для ОУНТ с индексами хиральности (4, 4) (Armchair структура) и (4, 0) (Зигзаг структура). В качестве исходных возьмем данные из табл. 1. Для удобства анализа зависимости упругих характеристик ОУНТ от характеристик однослойного графена для исследуемых типов ОУНТ вычислим модуль Юнга E_N .

Модуль Юнга ОУНТ можно вычислить по формуле [35]

$$E_N = C_{11} - \frac{2C_{12}^2}{C_{11} + C_{23}},$$

где [26]

$$C_{11} = \frac{\frac{S_{33}}{S_r} + 1/(S_{11} - S_{12})}{2},$$

$$C_{12} = \frac{\frac{S_{33}}{S_r} - 1/(S_{11} - S_{12})}{2},$$

$$C_{13} = -\frac{S_{13}}{S_r},$$

$$S_r = S_{33}(S_{11} + S_{12}) - 2S_{12}^2.$$

Результаты расчётов приведены в таблице 2.

Таблица 2

Зависимость значений модуля Юнга E_N ОУНТ от хиральности ОУНТ и значений упругих характеристик однослойного графена

Тип ОУНТ	Индексы хиральности	Модуль Юнга E_N ОУНТ, ТПа					
		Упругие характеристики однослойного графена (нумерация из табл. 1)					
		1	2	3	4	5	6
Armchair	(4, 4)	0,43	0,44	0,41	0,54	0,31	0,23
	(6, 6)	0,30	0,31	0,29	0,38	0,22	0,16
	(8, 8)	0,23	0,24	0,23	0,29	0,17	0,12
	(10, 10)	0,19	0,19	0,18	0,24	0,14	0,09
Zigzag	(4, 0)	0,69	0,70	0,66	0,85	0,49	0,37
	(6, 0)	0,49	0,50	0,47	0,60	0,35	0,27
	(8, 0)	0,38	0,39	0,36	0,47	0,28	0,20
	(10, 0)	0,31	0,32	0,29	0,39	0,23	0,17

По данным из таблицы 2 построим график зависимость модуля Юнга E_N ОУНТ от хиральности ОУНТ и значений упругих характеристик однослойного графен (рис. 8).

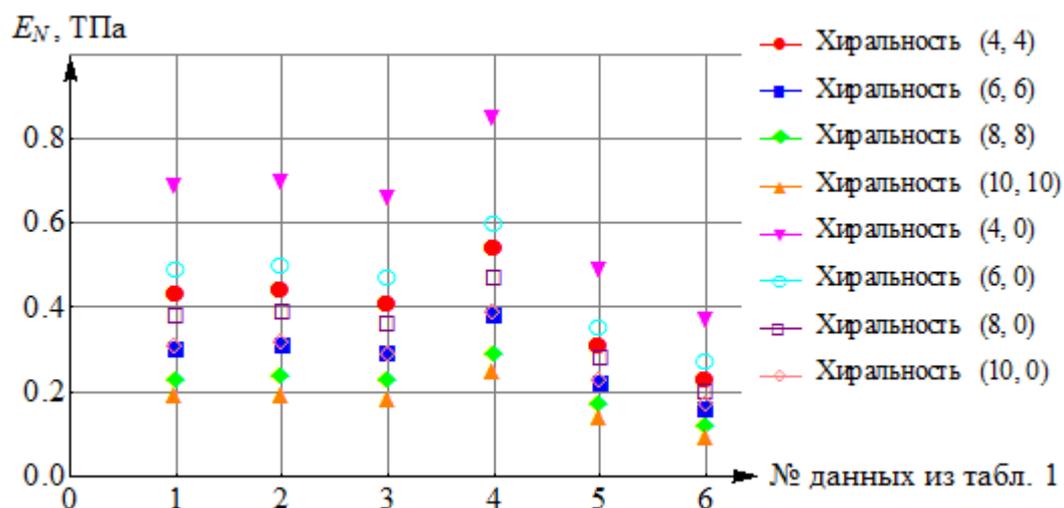


Рис. 8. Зависимость модуля Юнга E_N ОУНТ от хиральности ОУНТ и значений упругих характеристик однослойного графена

Из рис. 8 видно, что при всех значениях упругих характеристик однослойного графена значения модуля Юнга E_N для ОУНТ типа Zigzag, чем значения для ОУНТ типа

Armchair. Также выявлена обратная зависимость между индексами хиральности и значениями модуля Юнга ОУНТ E_N .

Выводы. Выведены зависимости между элементами матрицы коэффициентов податливость ОУНТ и упругими характеристиками однослойного графена. Зависимость элементов $S_{44} = S_{55}$ от упругих характеристик однослойного графена выявлена двумя методами: приложением касательной нагрузки к основаниям ОУНТ и приложением распределённой нагрузки к боковой поверхности ОУНТ. Выявлена обратная зависимость между индексами хиральности и значениями модуля Юнга ОУНТ E_N . Установлен факт того, что значения модуля Юнга E_N для ОУНТ типа Zigzag, чем значения для ОУНТ типа Armchair.

Список литературы.

1. Overney G., Zhong W., Tomanek D.Z. Structural rigidity and low frequency vibrational modes of long carbon tubules // Zeitschrift für Physik D Atoms. Molecules and Clusters. N. 27 (1). P. 93 – 96.
2. Yakobson B.I., Brabec C.J., Bernholc J. Nanomechanics of carbon tubes: Instabilities beyond linear response // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 76. N. 14. P. 2511 – 2519.
3. Treacy M.M.J., Ebbesen T.W., Gibson J.M. Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes // Nature. 1996. N. 381, P. 678 – 680.
4. Krishnan A., Dujardin E., Ebbesen T.W., Yianilos P.N., Treacy M.M.J. Young's modulus of single-walled nanotubes. // Physical Review B. 1998. N. 58. P. 14013 – 14019.
5. Lourie O., Wagner H.D. Evaluation of Young's modulus of carbon nanotubes by micro-Raman spectroscopy. // Journal of Materials Research. 1998. N. 13. P.2418 – 2422.
6. Pan Z.W., Xie S.S., Lu L., Chang B.H., Sun L.F., Zhou W.Y., Wang G., Zhang D.L. Tensile tests of ropes of very long aligned multiwall carbon nanotubes. // Applied Physics Letters. 1999. N. 74. P. 3152 – 3154.
7. Тарасова Е.С. Исследование механических свойств композитов, армированных углеродными нанотрубками // Молодежный научно-технический вестник МГТУ им. Н.Э Баумана. Электрон. журн. 2014. № 7. Режим доступа:<http://sntbul.bmstu.ru/doc/728018.html> (дата обращения 26.02.2015).
8. Микитаев А.К., Козлов Г.В. Эффективность усиления полимерных нанокомпозитов дисперсными наночастицами // Materials Physics and Mechanics. 2014. № 21. P. 51 – 57.

9. Микитаев А.К., Козлов Г.В. Перколяционная модель усиления нанокomпозитов полимер/углеродные нанотрубки // *Materials Physics and Mechanics*. 2015. № 22. P. 101 – 106.
10. Елецкий А.В., Искандарова И.М., Книжник А.А., Красиков Д.Н. Графен: методы получения и теплофизические свойства // *Успехи физических наук*. 2011. Т.181. № 3. С. 233 – 268.
11. Сорокин П.Б., Чернозатонский Л.А. Полупроводниковые наноструктуры на основе графена // *Успехи физических наук*. 2013. Т.183. № 2. С. 113 – 132.
12. Антонова И.В. Современные тенденции развития технологий выращивания графена методом химического осаждения паров на медных подложках // *Успехи физических наук*. 2013. Т.183. № 10. С. 1115 – 1122.
13. Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V., Firsov A.A. Electric field effect in atomically thin carbon films // *Science*. 2004. № 306. P. 666 – 669.
14. Novoselov K. S., Jiang D., Schedin F., Booth T. J., Khotkevich V. V., Morozov S. V., Geim A. K. Two-dimensional atomic crystals // *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2005. № 102. P. 10451 – 10453.
15. Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Katsnelson M.I., Grigorieva I.V., Dubonos S.V., Firsov A.A. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene // *Nature*. 2005. № 438. P. 197 – 200.
16. Geim A.K., Novoselov K.S. The rise of graphene // *Nature Mater.* 2007. № 6. P. 183 – 191.
17. Samaei A.T., Aliha M.R.M., Mirsayar M.M. Frequency analysis of a graphene sheet embedded in an elastic medium with consideration of small scale // *Materials Physics and Mechanics*. 2015. № 22. P. 125 – 135.
18. Галашев А.Е., Рахманова О.Р. Устойчивость графена и материалов на его основе при механических и термических воздействиях. // *Успехи физических наук*. 2014. Т.184. № 10. С. 1045 – 1065.
19. Галашев А.Е., Дубовик С.Ю. Молекулярно-динамическое моделирование сжатия однослойного графена // *Физика твердого тела*. 2013. Т. 55. С. 1859 – 1866.
20. Frank O., Tsoukleri G., Parthenios J., Papagelis K., Riaz I., Jalil R., Novoselov K.S., Galiotis C. Compression Behavior of Single-Layer Graphenes // *ACS Nano*. 2010. № 4. P. 3131 – 3138.
21. Вустер У. Применение тензоров и теории групп для описания физических свойств кристаллов: Пер. с англ. М.: Мир, 1977. 384 с.

22. Сиротин Ю.Н., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1979. 640 с.
23. Новосёлов К.С. Графен: материалы Флатландии // Успехи физических наук. 2011. Т. 181. С. 1299 – 1311.
24. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Математические модели механики и электродинамики сплошной среды. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. 512 с.
25. Krishnan A., Dujardin E., Ebbesen T.W., Yianilos P.N., Treacy M.M.J. Young's modulus of single-walled nanotubes. // Physical Review B. 1998. N. 58. P. 14013 – 14019.
26. Зарубин В.С. Прикладные задачи термпрочности элементов конструкций. М.: Машиностроение, 1985. 292 с.
27. Елецкий А.В. Углеродные нанотрубки // Успехи физических наук. 1997. Т.167. № 9. С. 945 – 972.
28. Елецкий А.В. Углеродные нанотрубки и их эмиссионные свойства // Успехи физических наук. 2002. Т.172. № 4, С. 401 – 438.
29. Prabhu S., Shubrajit Bhaumik, Vinayagam B. K. Finite element modeling and analysis of zigzag and armchair type single wall carbon nanotube // Journal of Mechanical Engineering Research. 2012. Vol. 4(8). P.260 – 266.
30. Bosak A., Krisch M., Mohr M., Maultzsch J., Thompsen C. Elasticity of single-crystalline graphite: in-elastic X-ray scattering study // Phys. Rev. B. 2007. V. 75. P. 153408 – 153412.
31. Blakslee O.L., Proctor D.G., Seldin E.J., Spence G.B., Weng T. Elastic constants of compression-an-nealed pyrolytic graphite // J. Appl. Phys. 1970. V. 41. № 8. P. 3373 – 3382.
32. Bowman J.C., Krumhansl J.A. The Low-Temperature Specific Heat of Graphite // J. Phys. Chem. Solids. 1958. V. 6. № 4. P. 367 – 379.
33. Беринский И.Е, Кривцов А.М. Об использовании многочастичных межатомных потенциалов для расчёта упругих характеристик графена и алмаза // Механика твёрдого тела. 2010. № 6. С. 60 – 85
34. Erdemir A., Martin J.-M. Superlubricity. Amsterdam: Elsevier, 2007. 524 p.
35. Кристенсен Р.М. Введение в механику композитов. Мир, 1982. 335 с.