

Министерство образования и науки Российской Федерации

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра математической теории
упругости и биомеханики

Управление механическими свойствами углеродного колонного графена

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студентки 4 курса 431 группы

направления 01.03.03 – Механика и математическое моделирование

механико-математического факультета

Мазепа Маргариты Михайловны

Научный руководитель
доцент, к.ф.-м.н.



подпись, дата

А.С. Колесникова

Зав. кафедрой
д.ф.-м.н., профессор



подпись, дата

Л.Ю. Коссович

Саратов 2017

Введение

Актуальной задачей в области усовершенствования работы современных наноустройств является создание композитного материала с уникальными свойствами, который будет использоваться в качестве элементной базы этих наноустройств. Новый виток в области развития таких материалов связан с синтезом и исследованием свойств композитных углеродных наноструктур на основе углеродных нанотрубок (УНТ) и графена. Углеродный композит, состоящий из графенового листа и присоединенных к нему, вертикально ориентированных УНТ, называют колонным графеном [1].

В настоящее время синтезируемые и моделируемые композитные виды колонного графена отличаются конфигурацией структурных элементов и способом их соединения [2-6]. Подобные соединения уже используются в суперконденсаторах, в качестве материала для очистки воды и материала для хранения водорода. В рамках данной бакалаврской работы осуществляется исследование колонного графена, структурное звено которого образуется графеновым листом, перпендикулярно которому располагаются углеродные нанотрубки, присоединенные к графеновому листу химическими связями. При образовании композита края УНТ остаются открытыми, а в графеновом листе образуется отверстие. Выбор в качестве исследуемого материала данного композита обусловлен тем, что научных работ по исследованию свойств колонного графена мало [7-10]. Исследованные в данной бакалаврской работе свойства композитных материалов являются абсолютно новыми.

Одним из важнейших свойств, которым должен обладать материал, используемый при конструировании наноустройств, являются прочностные свойства. Прочностные свойства являются характеристикой стабильности материала.

Целью данной работы является поиск способа управления механическими свойствами колонного графена. Проводилась оценка влияния длин и диаметров нанотрубок, входящих в состав композита, на модуль Юнга и коэффициент Пуассона двумерно протяженного колонного графена. В данной

работе исследовался колонной графен, состоящий из протяженного в своих направлениях графенового листа с присоединенными к нему перпендикулярно с помощью химических связей углеродными нанотрубками. Исследование механических свойств нанокомпозитов осуществлялось при использовании минимального структурного звена (элементарной ячейки) с использованием периодических граничных условий.

Структура и объем работы. Бакалаврская работа состоит из введения, трех разделов, заключения, списка используемых источников и приложения; содержит страниц 42 текста (включая 36 рисунков), список литературы из 35 наименований.

Раздел 1. Критический анализ

Раздел 2. Численное молекулярное моделирование

Раздел 3. Результаты и их обсуждения

Основное содержание работы

Во введении данной бакалаврской работы идет речь об актуальности и необходимости проделанной работы. Необходимость определения механических свойств углеродных композитов вызвана тем, что именно механические свойства являются залогом стабильности углеродных композитов.

В первой главе проведена оценка современного состояния области теоретического и экспериментального исследования механических свойств углеродных композитов, которая позволила выявить актуальность и новизну данного научного направления.

В работе [7] методом конечных элементов рассчитывались модуль Юнга и коэффициент Пуассона для многослойных углеродных композитов. Выявлено, что компоненты модуля Юнга при растяжении вдоль графенового листа уменьшаются с увеличением длин УНТ, входящих в состав композита, а при растяжении вдоль УНТ компонента модуля Юнга увеличивается. При этом метод конечных элементов не может дать качественной картины изменения компонент модуля Юнга вдоль графеновых листов в связи с тем, что не дает возможности учитывать киральность структуры в выбранном направлении.

В работе [8] исследовалась зависимость величины модуля Юнга от хиральности УНТ, входящих в состав композита. Расчет проводился при помощи моделирования наноиндентирования. Особенность данной работы заключается в том, что механические характеристики исследуются при действии давления со стороны индентора в область между нанотрубками.

В работе [10] исследовались упругие свойства углеродных композитов при допировании их бором и азотом. Исследовались углеродные структуры, состоящие из двух протяженных графеновых листов и заключенных между ними УНТ, перпендикулярно ориентированных относительно графеновых листов. Один торец протяженного композита фиксировался, а за другой производилось растяжение. В ходе исследования было выявлено, что недопированные углеродные структуры выдерживают большие нагрузки, чем структуры, допированные азотом или бором. Наибольший модуль Юнга, по результатам исследований, так же зафиксирован у композитов, допированных азотом и бором.

Во второй главе рассматривается метод функционала плотности, с помощью которого находится значение внутренней энергии. Так же, в этой главе рассказывается о процессе периодических граничных условий.

В третьей главе данной работы обсуждается объект исследования, методология и результаты. В данной бакалаврской работе проведены численные эксперименты по исследованию упругих свойств протяженного колонного графена. Проведены теоретические расчеты модуля Юнга и коэффициента Пуассона колонного графена с различными структурными параметрами. При этом, исходя из внешнего вида протяженного углеродного полотна можно сделать вывод об ортотропности исследуемого объекта. В связи с этим, исследование будет проводится в трех направлениях: вдоль торца zigzag, вдоль торца armchair, вдоль нормали к поверхности графенового листа (normal).

Существует допущение, согласно которому структуры, образованные атомами, представляют из себя сплошную среду без промежутков [11]. Это допущение объясняется тем, что в любой момент времени между функциями,

описывающими взаимодействия между атомами, должна существовать определённая зависимость для предотвращения разрыва сплошности среды. Такой функцией является энергетическая функция (1), описывающая взаимодействие между атомами в структуре, а сила воздействия соседних атомов между собой описывается через закон Ньютона (2). Сила взаимодействия между атомами находится по формуле (3).

$$H\Psi = \left[\sum_i^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_i^N V(\vec{r}_i) + \sum_{i<j}^N U(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \right] \Psi \quad (1)$$

$$m_i \bar{a}_i = \bar{F}_i \quad (2)$$

$$\bar{F}_i = -grad E_i \quad (3)$$

где $\bar{F}_i$ – сила, с которой все соседние атомы воздействуют на i -й;

E_i – энергия i -го атома (углерода);

m_i – масса i -го атома;

$\bar{a}_i$ – ускорение i -го атома.

Следовательно, требования непрерывности, используемые в гипотезе сплошности соблюдаются для атомарных тел, а значит к подобным атомарным структурам можно использовать такие физические параметры как модуль Юнга и коэффициент Пуассона, характеризующие свойства материала сопротивляться растяжению, сжатию при упругой деформации. Результаты вычислений, полученные при использовании этого основного допущения, в большом числе случаев хорошо согласуются с результатами соответствующих наблюдений и измерений [12].

Объектом исследования в данной работе выступил протяженный углеродный композит. Расчеты проводились на элементарной ячейке с периодическими граничными условиями, заданными векторами трансляции (Рисунок 1).

Исследования проводились для серии композитов. В рамках одного протяженного полотна длина и диаметр композита оставались постоянными. В различных углеродных композитах диаметры УНТ составили 5.47 Å, 8.01 Å и 12.12 Å. Длины трубок в различных углеродных композитах варьировались в

пределах от 3 Å до 14 Å. Для всей серии композитов расстояния между стенками УНТ составило 15 Å.

Для поиска равновесного положения и нахождения значения полной энергии использовался квантово-химический метод Density Field Theory (DFT) [13] с базисом STO-3G в программном пакете Gaussian'09. Метод DFT основывается на решении уравнения Кона-Шэма.

Алгоритм расчета модуля Юнга и коэффициента Пуассона заключался в следующем. Осуществлялся поиск равновесного состояния структуры по координатам атомов. После чего проводилось растяжение углеродного композита на 3% относительно первоначальной длины вдоль определенной оси симметрии (zigzag, armchair, normal). Производился поиск равновесного состояния деформированной структуры.

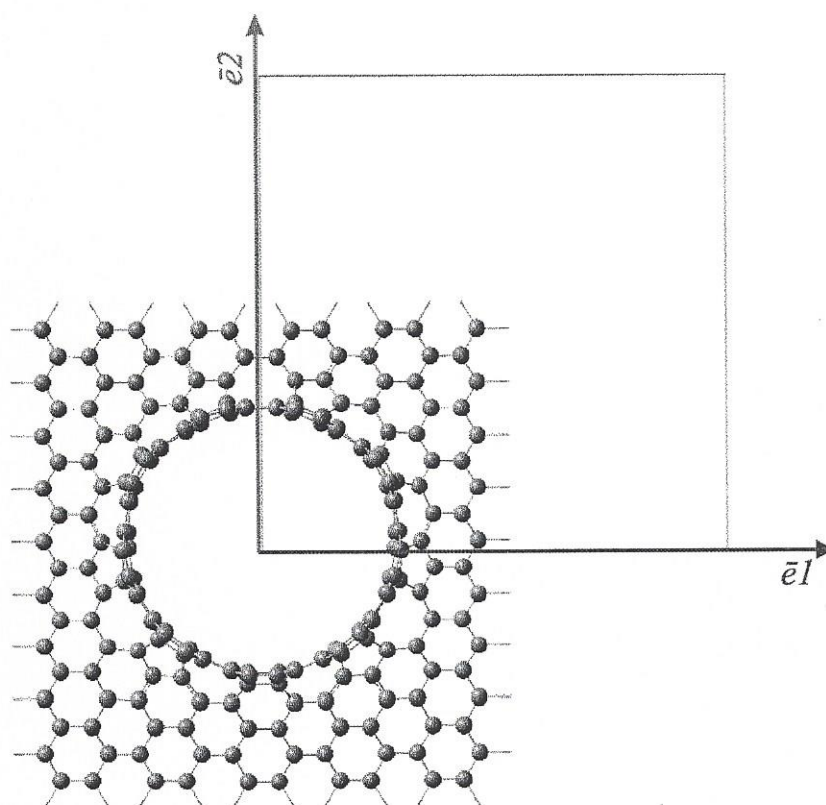


Рисунок 1 – Исследуемая элементарная ячейка протяженного углеродного полотна с заданными векторами трансляции $\bar{e}_1$, $\bar{e}_2$.

Все расчеты производились на вычислительном кластере. Кластер состоит из 40 узлов, каждый из которых оснащен двумя процессорами IntelXeon E5-2670

(в сумме 16 физических ядер) и 128 гигабайтами оперативной памяти. Для согласования узлов используется внутренняя сеть InfiniBand QDR 40 Гб/с.

Исходя из разницы численного значения полной энергии структуры (до растяжения и после), были получены следующие величины: значение силы, необходимое для растяжения вдоль каждого из направлений, рассчитанной по формуле (4); модуль Юнга для каждого из направлений растяжения, рассчитанный по формуле (5); коэффициент Пуассона, рассчитанный по формуле (6).

$$F = \frac{2\Delta E}{\Delta l}, \quad (4)$$

$$Y = \frac{Fl}{S \Delta l}, \quad (5)$$

$$\nu = \frac{\Delta x}{x} \times \frac{l}{\Delta l}, \quad (6)$$

где l – начальная длина растягиваемого торца;

Δl – удлинение растягиваемого торца;

x – начальная длина сжимающегося торца;

Δx – сжатие сжимающегося торца;

ΔE – приращение численного значения полной энергии;

S – площадь поперечного сечения

F – величина силы, необходимой для растяжения композита на 3%;

Y – модуль Юнга;

ν – коэффициент Пуассона.

Результаты расчета компоненты модуля Юнга при растяжении в направлении zigzag представлены на рисунке 2а, в направлении armchair - 2б, вдоль направления нанотрубок – 2с. По результатам исследований можно сделать следующие выводы. При растяжении вдоль направлений графенового листа (zigzag, armchair) численное значение компонент модуля Юнга уменьшалось при увеличении длин УНТ, входящих в состав углеродного композита. При растяжении вдоль нормального направления результаты

получились обратные: численное значение компоненты модуля Юнга возрастало с увеличением длин УНТ, входящих в состав углеродного композита.

Данные результаты по исследованию компонент модуля Юнга качественно согласуются с результатами для многослойных углеродных композитов аналогичной архитектуры, рассчитанных методом конечных элементов [7] и методом молекулярной динамики [14].

Рассчитаны компоненты коэффициента Пуассона для композитов с различными структурными параметрами (длина и диаметр УНТ, входящей в состав углеродного композита). Динамика компонент коэффициента Пуассона при различных структурных параметрах минимальна. Во всех направлениях коэффициент Пуассона составил 0,025.

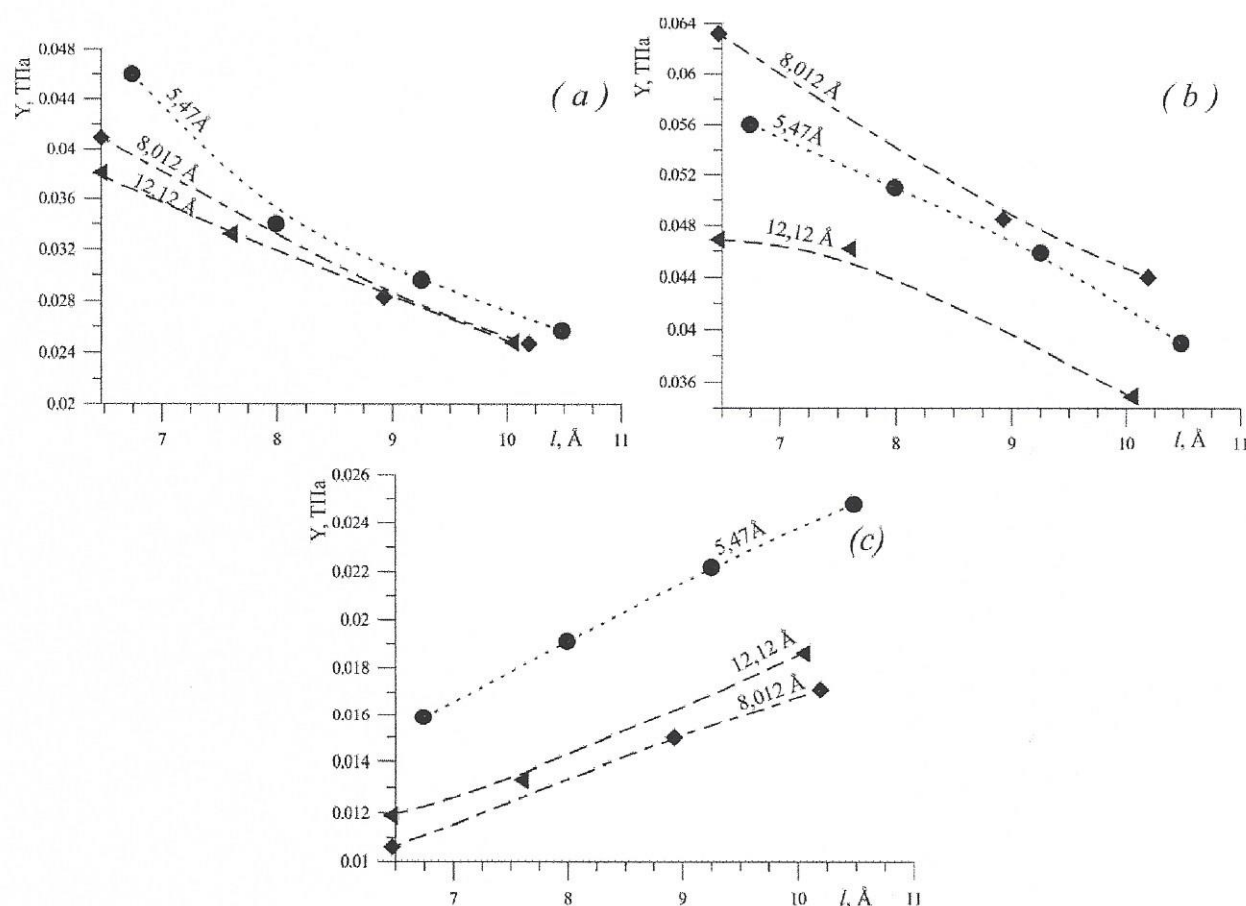


Рисунок 2 – Результаты расчета модуля Юнга: а – в направлении zigzag; б – в направлении armchair; с – в направлении normal.

Заключение

В рамках данной работы впервые осуществлялось исследование механических свойств колонного графена в зависимости от длины и диаметра armchair нанотрубок в композите с помощью квантово-химический метод функционала плотности (DFT). Исследования осуществлялись на основе элементарной ячейки с учетом периодических граничных условий в двух направлениях в плоскости расположения графенового листа. Исследование проводилось для УНТ с диаметром 5.47 Å, 8.01 Å и 12.12 Å. Длины УНТ изменялись в пределах от 3 Å до 15 Å.

Получены теоретические значения сил, необходимых для растяжения каждого из рассмотренных в данной работе углеродных композитов разной конфигурации на 3% относительно первоначальной длины. Получены теоретические значения модуля Юнга для каждой конфигурации колонного графена, отличающихся геометрическими размерами его составных частей. Проведена апробация подхода используемого для исследования изменения модуля Юнга при изменении конфигурации композита: результаты теоретического исследования совпали с эмпирическими данными.

Для моделирования колонного графена был написан программный код, позволяющий моделировать составные компоненты композита (УНТ и графен), на языке Python 2.7.

Выявлена следующая зависимость: компоненты модуля Юнга уменьшаются при исследовании в направлениях графенового листа с увеличением длин УНТ, входящих в состав композита. При исследовании в нормальном направлении, компонента модуля Юнга увеличивается с увеличением длин УНТ, входящих в состав. Получено предельное значение коэффициента Пуассона для колонного графена не зависимо от геометрических размеров его составных частей: оно составило 0.025.

С помощью полученных результатов можно управлять механической прочностью колонного графена, т.е. использовать те композиты, механические свойства которых в заданном направлении необходимы.

Можно предположить, что с учетом полученных результатов данные композитные структуры будут являться перспективным материалом для наноустройств.

Список используемых источников:

1. Wesolowski, R.P. Pilaared graphene as a gas separation membrane / R.P. Wesolowski, A.P. Terzyk // Physical Chemistry Chemical Physics. 2011. V. 2011. P. 17027-17029.
2. Zhu, Y. A seamless three-dimensional carbon nanotube graphene hybrid material / Y. Zhu, L. Li, C. Zhang, G. Casillas, Z. Sun, Z. Yan, G. Ruan, Z. Peng, A.R.O. Raji, C. Kittrell, R.H. Hauge, J.M. Tour. // Nature Communications. 2012. V. 3. P. 1225-1–1225-7.
3. Kondo, D. Self-organization of Novel Carbon Composite Structure: Graphene Multi-Layers Combined Perpedicularly with Aligned Carbon Nanotubes // D. Kondo, S. Sato, Y. Awano // Applied Physics Express. 2008. V. 1. P. 074003-1 – 074003-3.
4. Feng, D. Preparation of Tunable 3D Pillared Carbon Nanotube Graphene Networks for High-Performance Capacitance / D. Feng, Y. Dingshan, D. Liming, S. Ganguli, V. Varshney, A. K. Roy // Chemistry of Materials. 2011. V. 23 (21). P. 4810–4816
5. Labunov, V. A. Composite nanostructure of vertically aligned carbon nanotube array and planar graphite layer obtained by the injection CVD method / V.A. Labunov, B.G. Shulitski, A.L. Prudnikava, Y.P. Shaman, A.S. Basaev // semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics. 2010. V. 13. N. 2. P. 137-141.
6. Jousseume, V. Few graphene layers/carbon nanotube composites grown at complementary-metla-oxide-semiconductor compatible temperature / V. Jouseseume, J. Cuzzocrea, N. Bernier, V. T. Renard // Applied Physics Letters. 2011. V. 98. P. 123103-1 – 123103-3.
7. Sangwook, S. Prediction of 3D elastic moduli and Poisson's ratios of pillared graphene nanostructures / S. Sangwook, V. Vikas, K. R. Aji, L. F. Barry // Carbon. 2012. V. 50. P. 603–611.

8. Wang, C.H. Mechanical properties of pillared-graphene nanostructures using molecular dynamics simulations / C.H. Wang, T.H. Fang, W.L. Sun // J. Phys. D: Appl. Phys. 2014. V. 47. P. 405-416.
9. Shahsavari, R. Junction configuration-induced mechanisms govern elastic and inelastic deformations in hybrid carbon nanomaterials / R. Shahsavari, N. Sakhavand // Carbon. V. 95. 2015. P. 699-709.
10. Xia, K. Tensile properties of a boron/nitrogen-doped carbon nanotube-graphene hybrid structure / K. Xia, H. Zhan, Y. Wei, Y. Gu // Beilstein Journal of Nanotechnology. 2014. V. 5. P. 329-336.
11. Слѣзкин, Н. А. Динамика вязкой несжимаемой жидкости / Слѣзкин Н. А. // Государственное издательство технико-теоретической литературы. 1955. 521 С.
12. Елецкий, А. В. Механические свойства углеродных наноструктур и материалов на их основе / А. В. Елецкий // Успехи физических наук. Обзоры актуальных проблем. 2007. Т. 177. № 3. С. 233-274.
13. Rarr, R. G. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules / R.G. Rarr, W. Yang // New York: Oxford University Press. 1989.
14. Колесникова, А. С. Прогнозирование модуля упругости и коэффициента Пуассона углеродного нанокомпозита / А. С. Колесникова, Р. А. Сафонов, М. М. Мазепа // Нано- и биомедицинские технологии. Управление качеством. Проблемы и перспективы. Сборник научных статей. Саратов. 2016. С. 41-47.