

УДК 539.3

В.А.Басов (6 курс, каф. ФМиКТМ), А.И.Мелькер, д.ф.-м.н., проф.

СЖАТИЕ ОДНОСЛОЙНЫХ НАНОТРУБОК БЕЗ ХИРАЛЬНОСТИ

Открытие углеродных нанотрубок относится к наиболее значительным достижениям современной науки. Углеродные нанотрубки имеют исключительно высокие механические свойства и являются одним из прочнейших материалов. Однако в количественных показателях нанотрубки до сих пор плохо изучены. В настоящее время нет никакого метода, кроме метода молекулярной динамики, для количественной оценки некоторых свойств нанотрубок.

В связи с этим целью работы являлось проведения компьютерных экспериментов по сжатию однослойной углеродной нанотрубки в диапазоне температур от 100 до 900 К. Для этого была использована модель молекулярной динамики «зарядов на связях», основной особенностью которой является возможность изучения свойств как ионной, так и электронной подсистем. Мы изучили структурные изменения в однослойной нанотрубки без хиральности, а также получили диаграммы растяжения–сжатия для них. Для объяснения полученных результатов мы разработали феноменологическую теорию.

Деформация сжатия проводилась в диапазоне от 100К до 900К, скорость деформации была равна $2.5 \cdot 10^{-7}$ нм/пс.

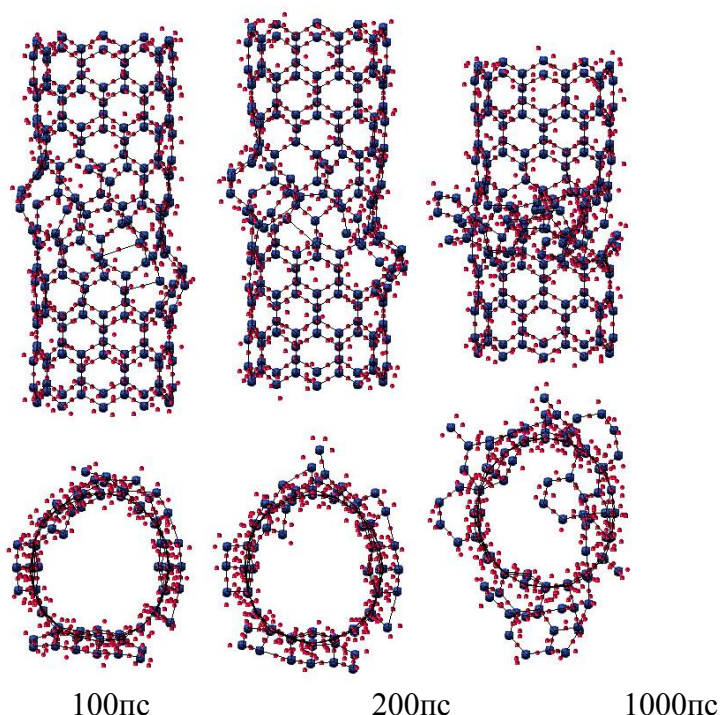


Рис. 1. Структурные изменения в нанотрубке для T=500К.

Для 100 К разрушение развивается через разрыв межатомных связей в центральной части образца и сопровождается в основном вытеснением поврежденной области.

Эволюция структуры нанотрубки для 500К показана на рис. 1. Можно видеть, что для 500К в отличие от низкотемпературного разрушения к вытесненным из образца областям также добавляются и те, которые вдавливаются внутрь образца. По подобному же сценарию развивается разрушение для высокотемпературных измерений (900К). Однако для высоких температур это более ярко выражено.

Структура зоны перелома состоит из набора различных конформаций наблюдаемых нами ранее в фуллеренах и углеводородах. Причина их появления связана с потерей стабильности гексагонов под воздействием внешних сил. Стоит отметить что для всех случаев разрушение развивается под углом в 45° к сжимающей силе. Этот эффект хорошо виден на рис. 1.

Для объяснения этого эффекта существует гипотеза Coulomb-Mohr'a, которая широко используется для объяснения хрупкого разрушения. Согласно этой гипотезе имеют место следующие соотношения:

$$\begin{aligned} |\sigma_{shear}| &= S_{coh} - f \sigma, \\ \theta &= \pi/4 - \varphi/2, \quad \tan \varphi = f, \end{aligned}$$

где $|\sigma_{shear}|$ – касательное напряжение в поверхности разрушения, S_{coh} – когезионная прочность, f – коэффициент трения, σ – сжимающее напряжение, θ – угол между σ и нормалью к поверхности разрушения φ – угол трения. В частном случае при $\varphi=0$ имеем $\theta = \pi/4$ и $|\sigma_{shear}| = S_{coh}$.

Из данных компьютерного моделирования угол θ меняется от $\theta = \pi/4$ почти до нуля откуда :

$$|\sigma_{shear}| = S_{coh} - f(t) \sigma,$$

где t – время, $f(t)$ в первом приближении –линейная функция времени равная 0 в $t=0$ и 1 в $\theta=0$. Это позволяет оценивать сжимающее напряжение σ , действующее в поверхности разрушения в любой момент времени.