

Саратовский государственный университет
им.Н.Г.Чернышевского

Теоретическое исследование упругости бамбукоподобных углеродных нанотрубок

А.С.Колесникова

Рис.2.Фрагмент фотографии УБНТ, полученной с помощью атомного силового микроскопа (СФ ИРЭ РАН)



Рис. 3. Фрагмент фуллерена C_{240} , $R=0,674$ нм

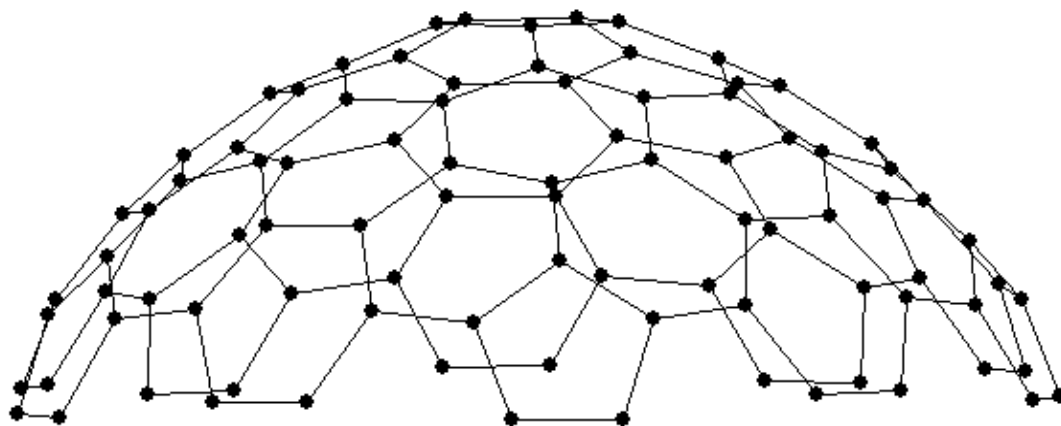


Рис.4. Нанотрубка без перемычек
armchair (10,10), $R=0,674$ нм, $L=40,51$ Å

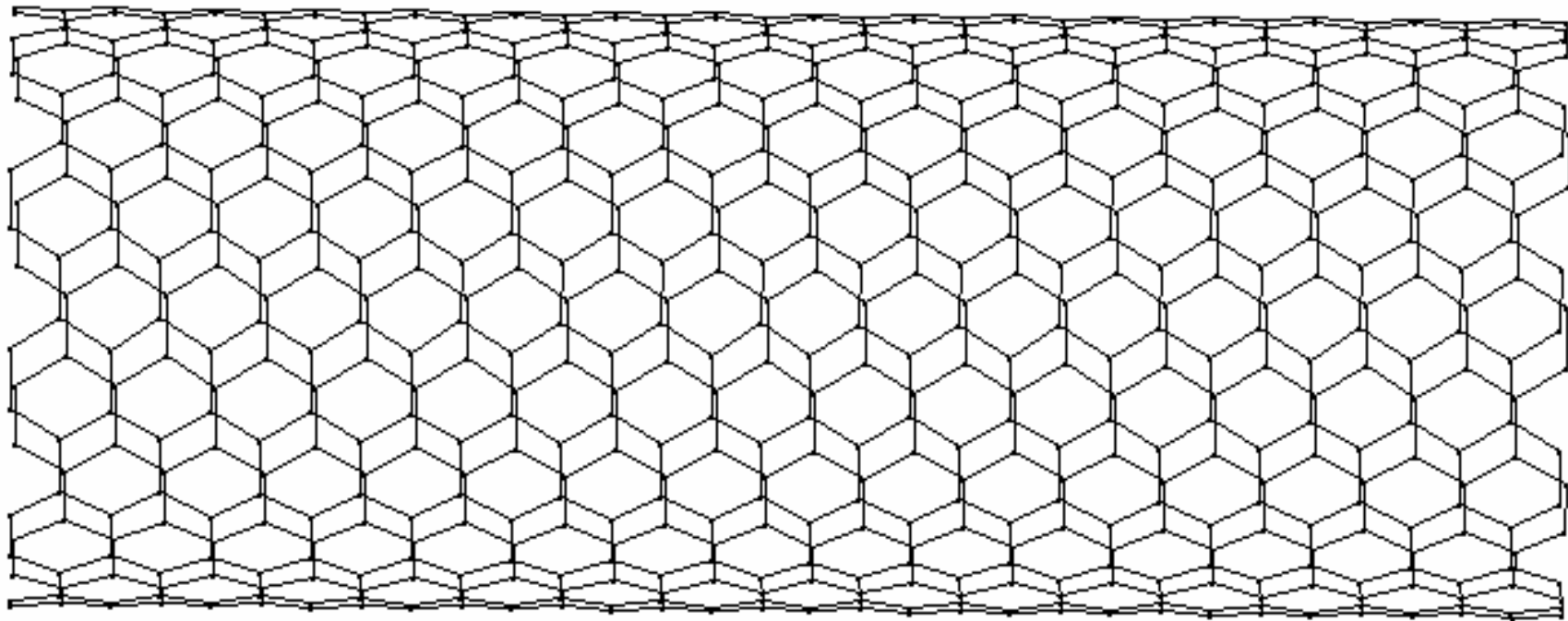


Рис. 5. УБНТ с одной перемычкой,
 $R=0,674\text{нм}$, $L=37,72\text{ \AA}$

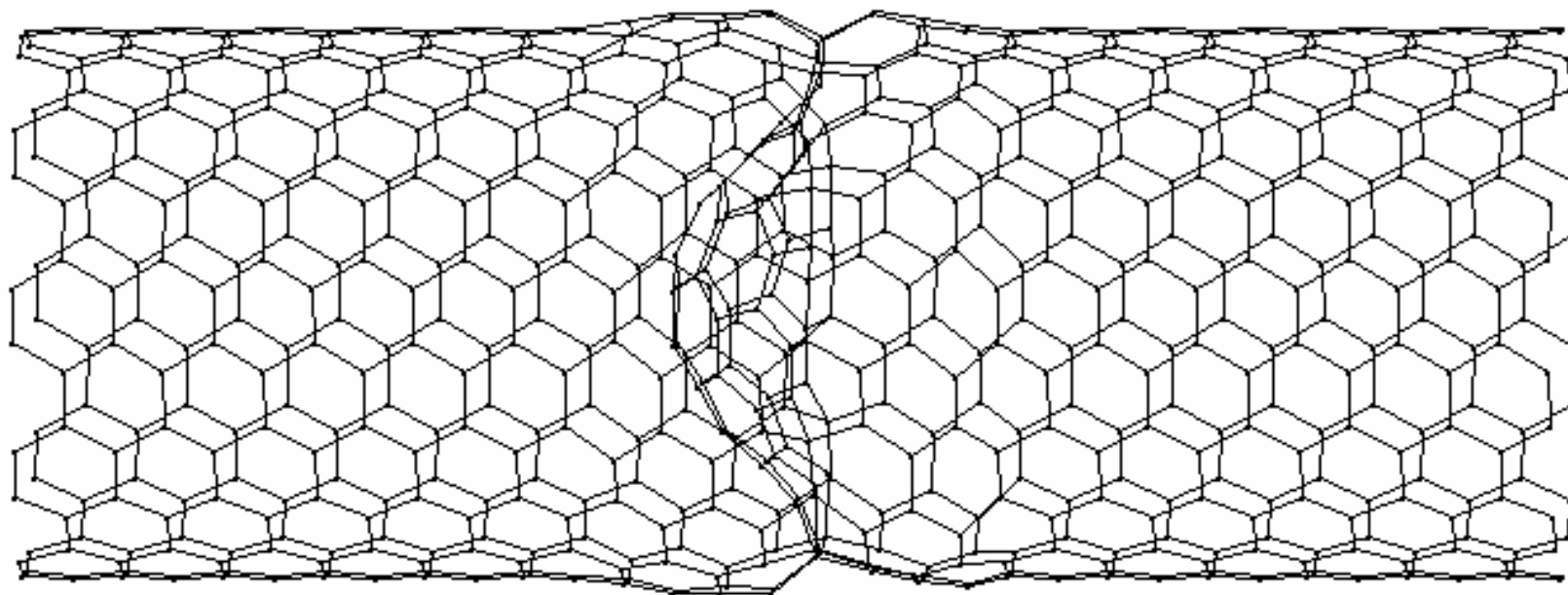


Рис. 6. УБНТ с четырьмя перемычками, $R=0,674$ нм, $L=44,26$ Å

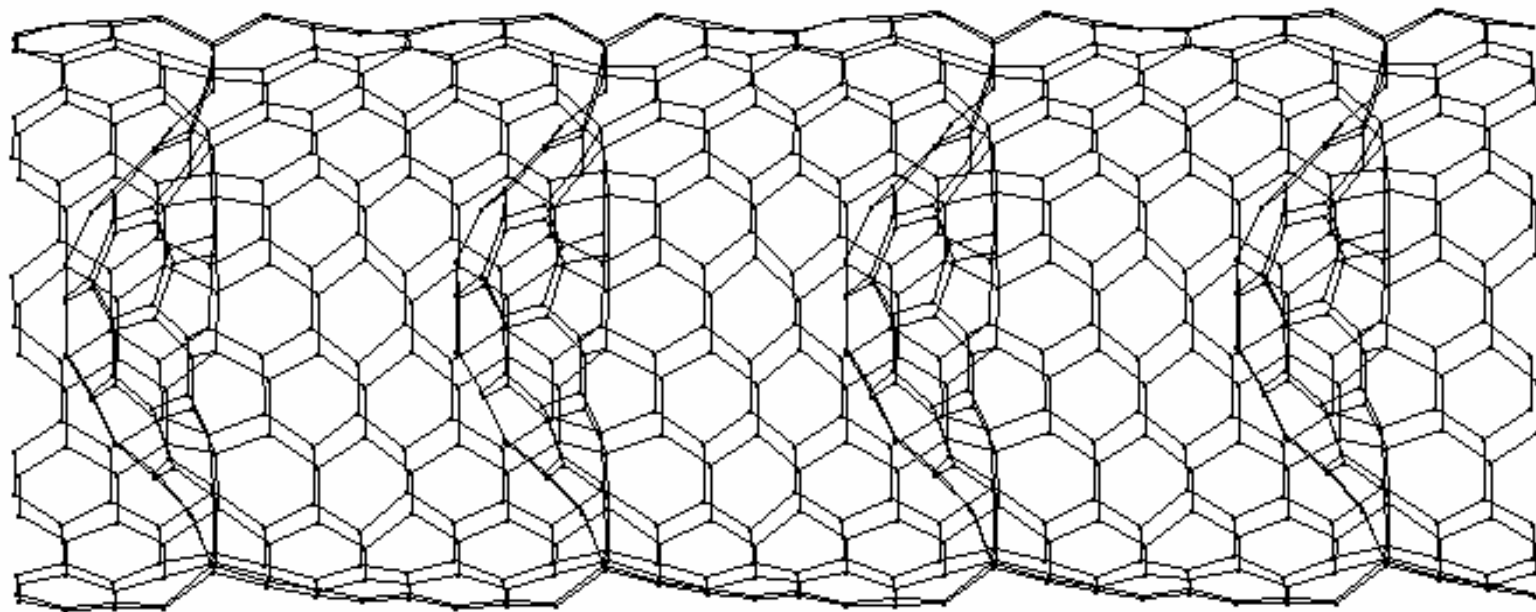


Рис.7. УБНТ с одной перемычкой,
 $R=0,337\text{нм}$, $L=37,30\text{ \AA}$

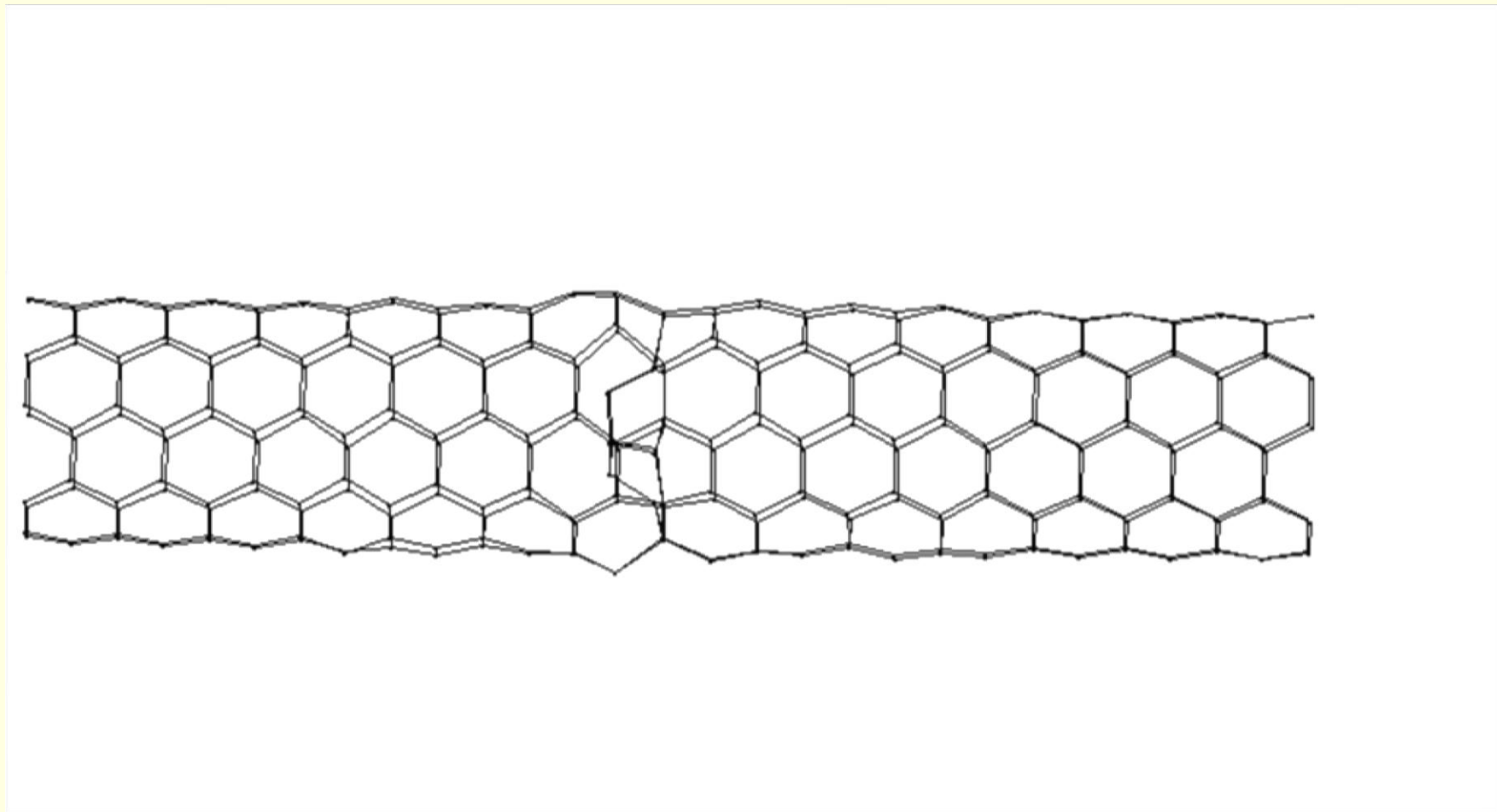


Рис.8. УБНТ с тремя перемычками,
 $R=0,337\text{нм}, L=35,86\text{ \AA}$

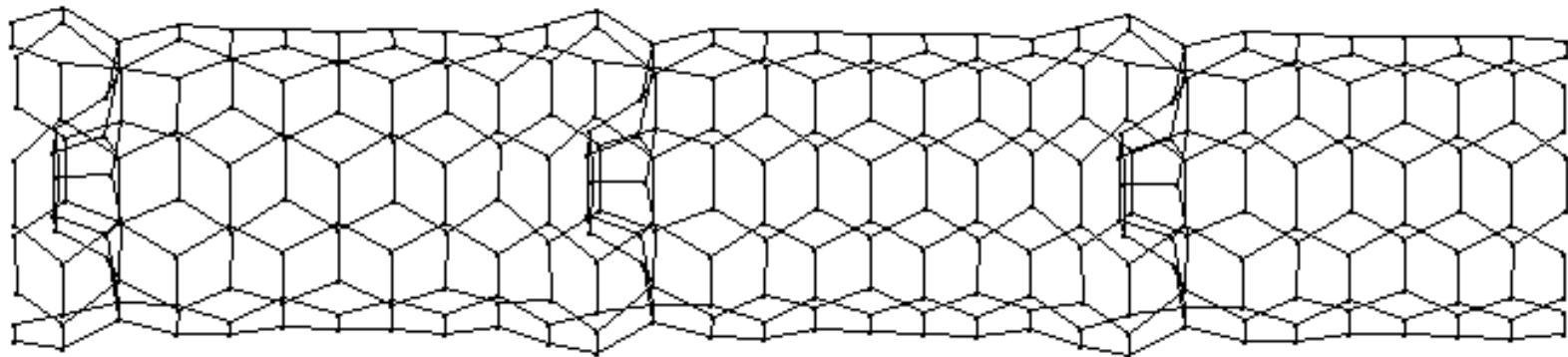


Таблица 1. Геометрические и энергетические параметры УБНТ

Число перемыч ек	R, nm	L, nm	E_g , eV	E_b , eV	ΔH_f° , $\frac{\text{kcal}}{\text{mole} \cdot \text{atom}}$	IP, eV
УБНТ на основе трубки (5,5)						
0	0,337	3,785	0,26	7,03	9,11	6,19
1	0,337	3,730	0,2	6,77	15,16	6,24
2	0,337	3,462	0,38	6,27	21,67	6,48
3	0,337	4,05	0,1	7,13	6,83	6,5
УБНТ на основе трубки (10,10)						
0	0,674	3,749	0,02	6,94	11,34	6,1
1	0,681	3,728	0,12	6,84	13,42	6,3
2	0,679	3,705	0,63	6,64	18,23	6,1
3	0,690	3,728	0,12	6,84	13,42	6,23
4	0,678	3,705	0,63	6,64	18,23	6,69

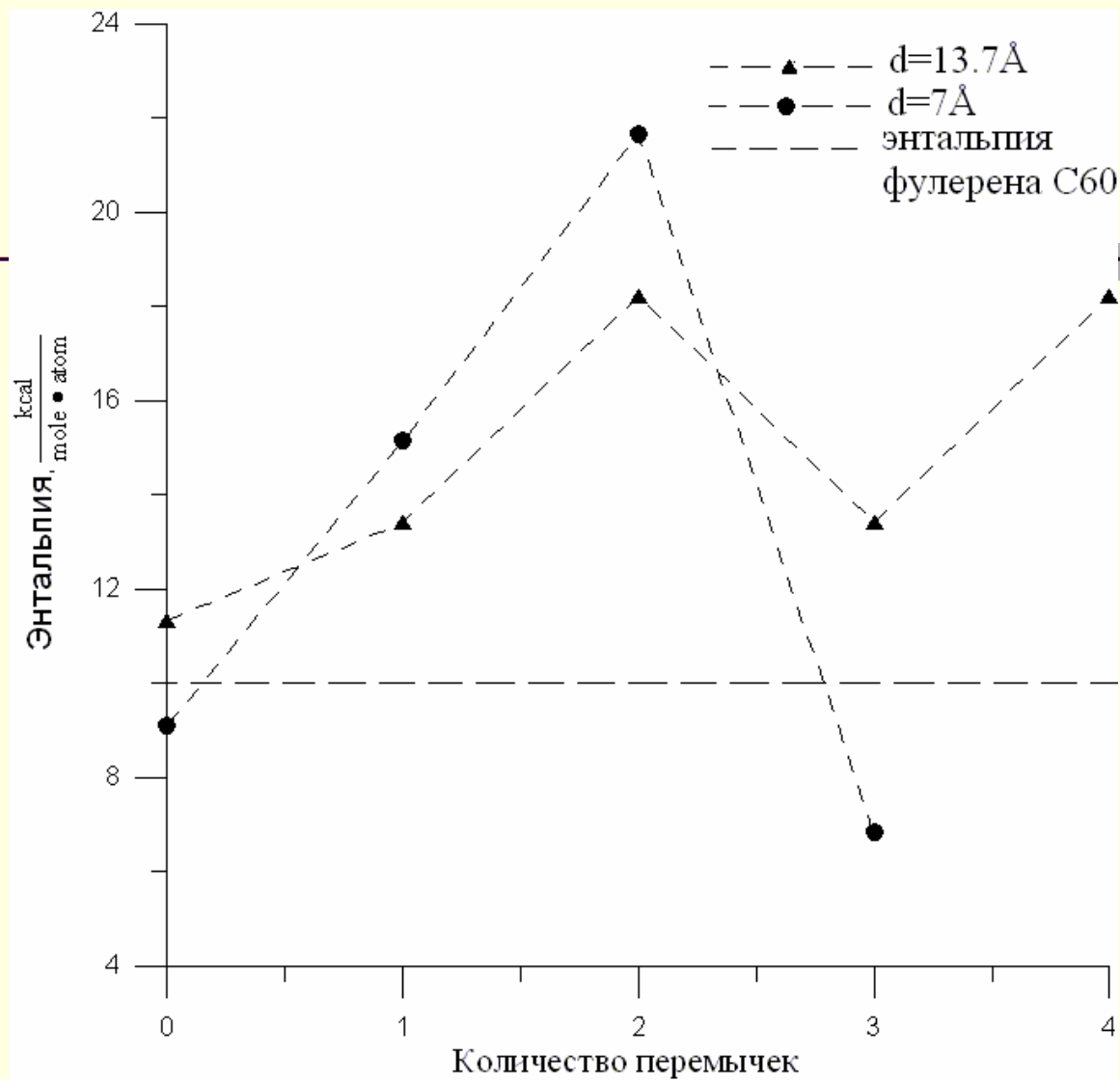


Рис.9. Зависимость энthalпии от количества перемычек

Расчет модуля Юнга

$$Y = \frac{F}{S} \cdot \frac{L}{\Delta L} \quad (1)$$

где F – деформирующая сила, ΔE – изменение полной энергии нанотрубки, ΔL – удлинение трубки.

$$F = \frac{2 \cdot \Delta E}{\Delta L} \quad (2)$$

Расчет модуля кручения

$$f_{\Delta E} = \frac{2\Delta E}{\varphi^2} \quad (3)$$

Здесь φ – угол поворота концов нанотрубки относительно друг друга, ΔE – изменение полной энергии нанотрубки; обозначение для модуля кручения $f_{\Delta E}$.

Таблица 2. Характеристика бамбукоподобных нанотрубок (10,10)

Число перемычек	R, nm	L, nm	Y, TPa	f, keV *rad ⁻²
без перемычек	0,674	4,051	2,251	0,298
1 перемычка	0,674	3,772	2,593	0,306
2 перемычка	0,674	3,752	2,710	0,454
3 перемычка	0,674	3,961	2,862	0,535

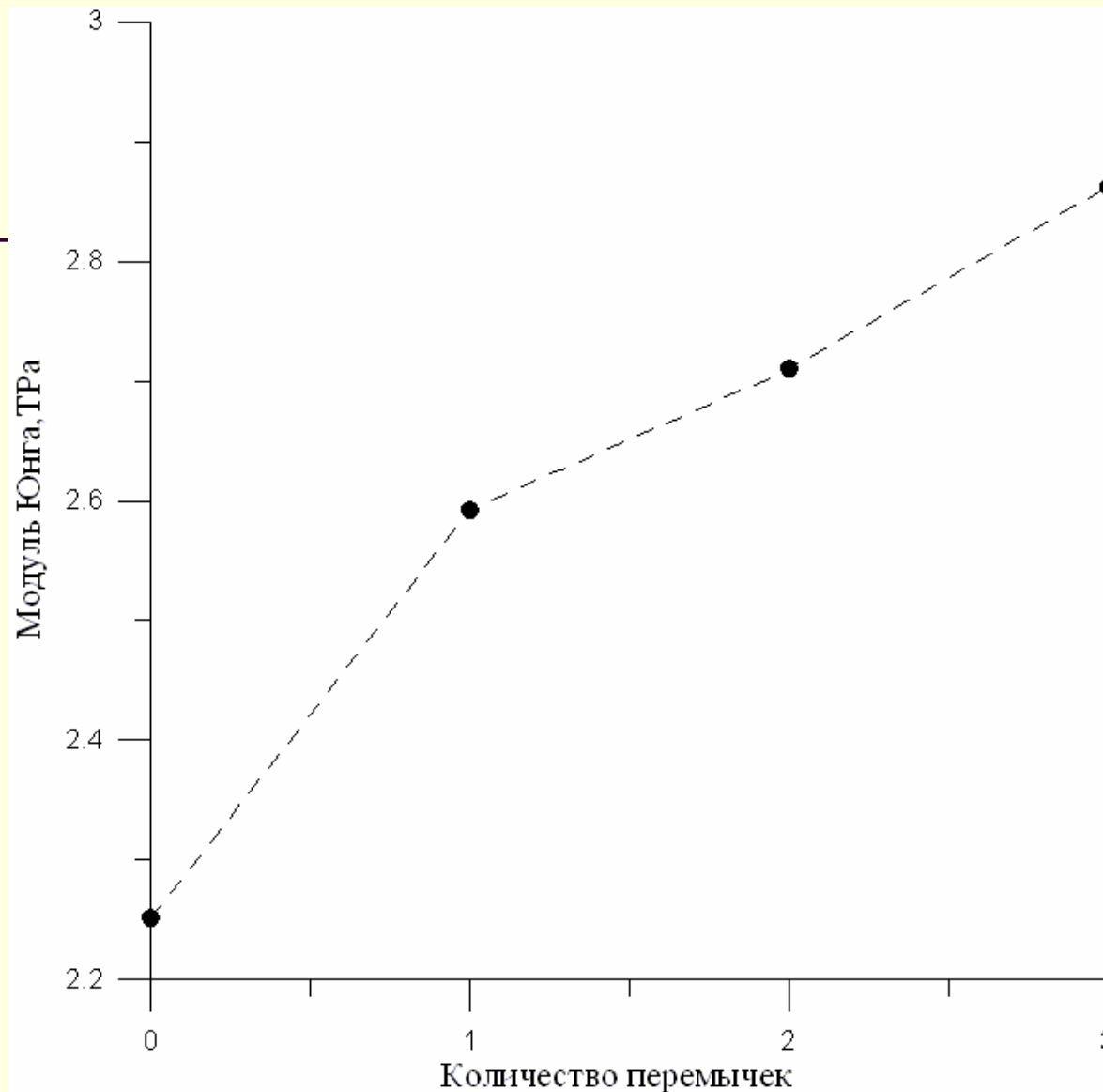


Рис. 10. Изменения модуля Юнга бамбукообразных нанотрубок с увеличением количества перемычек

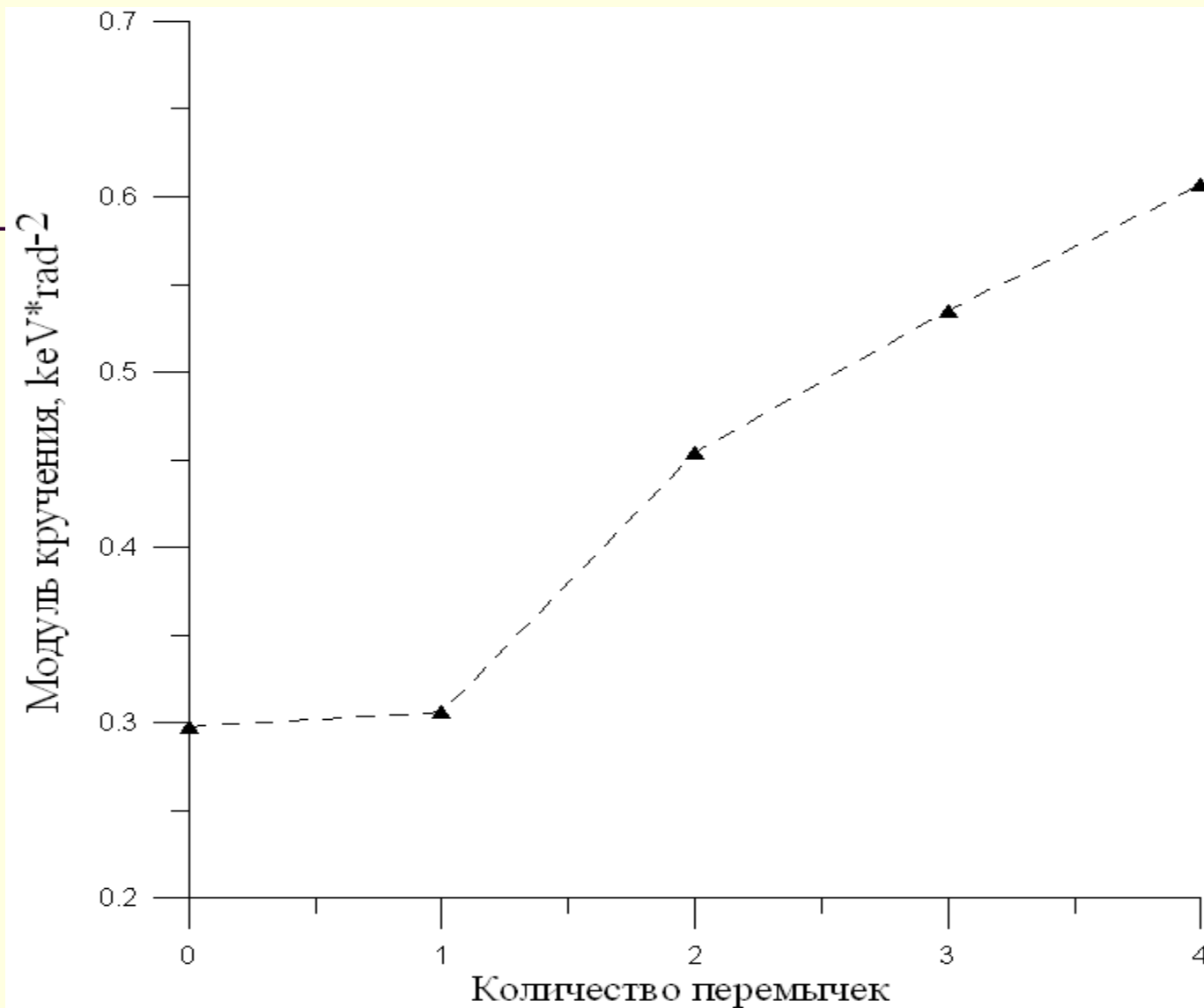


Рис. 11. Изменения модуля кручения бамбукообразных нанотрубок с увеличением количества перемычек

Таблица 3. Дипольный момент бамбукоподобных нанотрубок второго типа на основе трубки (10,10)

Дипольный момент	$\mu \cdot 10^{30}$, Кл·м	$\mu_x \cdot 10^{30}$, Кл·м	$\mu_y \cdot 10^{30}$, Кл·м	$\mu_z \cdot 10^{30}$, Кл·м
без перемычек	0	0	0	0
1 перемычка	96,97	-0,33	0,22	96,94
2 перемычки	489,51	0,24	-0,24	489,21
3 перемычки	80,70	-2,61	0,78	80,67
4 перемычки	87,20	-1,70	1,20	87,18

Выводы

- Бамбукоподобные трубки превосходят трубки без перемычек по упругости в случае деформации растяжения и кручения. Модуль Юнга ОУБНТ составляет $2\div 3$ ТПа, в то время как модуль Юнга трубок без перемычек равен $1,3^{-0,4}$ ТПа [Krishnan A., Dujardin E., Ebbesen T.W., Yianilos P.N. and Treacy M.M.G. Phys. Rev.B. V. 58. № 20. P. 14013.(1998)]. Бамбукоподобные нанотрубки могут применяться там, где необходима повышенная механическая прочность.
- Бамбукоподобные трубки обладают собственным дипольным моментом, что позволяет рекомендовать их в качестве наполнителей композитных материалов, способных ориентироваться в одном направлении, определяемым силовыми линиями внешнего электростатического поля.
- Бамбукоподобные трубки могут применяться в качестве отдельных наноавтоэмиттеров с высокими автоэмиссионными свойствами, а пленки с подобными структурами могут применяться в качестве катодов, обеспечивающих стабильный ток при малых напряжениях, в приборах нано- и микроэлектроники.

Спасибо

за

внимание!

Для сравнения модуль Юнга
однослойных углеродных нанотрубок
(без внутренних перегородок)

$$Y=1.3 \text{ -}0.4/\text{+}0.6 \text{ ТПа}$$

A.Krishnan, E.Dujardin, T.W.Ebbesen, P.N.Yianilos and
M.M.J.Treacy, “**Young’s modulus of single-walled
nanotubes**”, Phys. Rev. B 58, № 20, 1998