



Конкурс для школьников «Гениальные мысли» Автореферат проекта победителя I степени

Название работы – Исследование механических свойств углеродных нанотрубок.

Автор – Гурьянов Сергей Александрович (10 класс, ГБОУ СОШ № 7 "ОЦ" г. Новокуйбышевска).

Руководитель – Селищева Ольга Михайловна, учитель физики.

Основная идея работы, цели, задачи

В данной работе методом моделирования определялись упругие характеристики УНТ.

Цель работы – определить упругие характеристики УНТ.

Задачи:

- спроектировать и обосновать механическую модель УНТ;
- изготовить механическую модель УНТ;
- определить экспериментально упругие характеристики (модуль Юнга) модели УНТ;
- рассчитать значение модуля Юнга УНТ;
- сравнить полученные результаты с известными данными.

Основные результаты

В ходе подготовки к экспериментальной части данной работы я ознакомился с современными достижениями в областях получения и исследования углеродных наноматериалов [1-3].

Упругие свойства различных материалов характеризуются такими величинами, как модуль Юнга, модуль сдвига, модуль кручения, коэффициент Пуассона. Эти параметры обычно используются для характеристики сплошных тел в классической механике. Однако аналогичные характеристики применимы для описания упругих свойств наноструктур [4]. Обычно для измерения упругих характеристик для УНТ (коэффициента упругости, модуля Юнга и других) используют косвенные методы. Например, вычисляют упругие характеристики УНТ по спектрам излучения или поглощения, по амплитуде колебаний изолированных УНТ, определяемой с помощью просвечивающего электронного микроскопа, по величине силы, прикладываемой на разных расстояниях от точки закрепления изолированной УНТ иглой атомного силового микроскопа. Измеренные или рассчитанные теоретически значения модуля Юнга для однослойных УНТ находятся в широких пределах от 0,9 до 5,5 ТПА. Столь широкий диапазон значений говорит о том, что вопрос об определении упругих характеристик УНТ еще окончательно не решен.

Прямые измерения являются более наглядными. Поэтому для измерения упругих характеристик нанотрубок можно попытаться использовать метод моделирования, то есть изготовить механическую модель в задаваемом масштабе из материала с известными упругими характеристиками. Тогда для области упругих деформаций в силу линейности закона Гука можно ввести коэффициент подобия и по измеренным упругим характеристикам механической модели посчитать упругие характеристики УНТ.

Рассмотрим график зависимости потенциальной энергии двух атомов углерода от расстояния между их ядрами (рис. 1). По графику видно, что потенциальная энергия связи

достигает минимума, когда расстояние между ядрами атомов составляет 154 пм (или $1,54 \cdot 10^{-10}$ м).

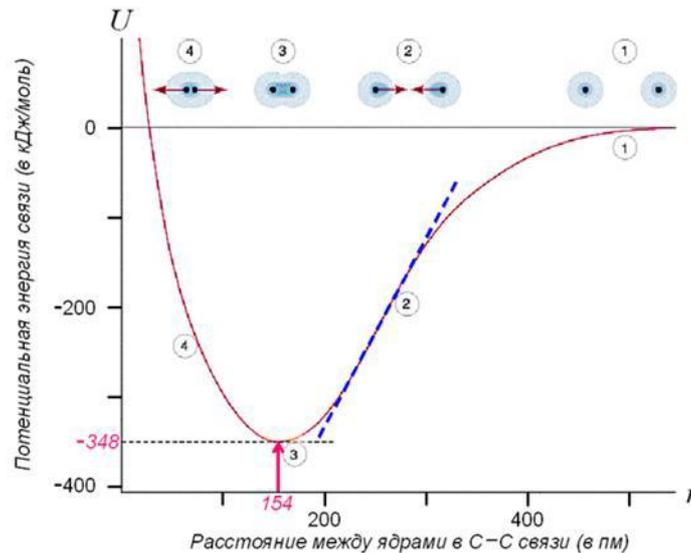


Рис. 1. Зависимость потенциальной энергии связи двух атомов углерода от расстояния между их ядрами, приведенная к одному молю углерода.

Тангенс угла наклона касательной к правой ветви кривой пропорционален силе, необходимой для того, чтобы удерживать атомы на данном расстоянии r .

Из графика видно, что в области расстояний между атомами углерода вблизи минимального значения потенциальная энергия зависит от расстояния пропорционально его квадрату. Отсюда можно найти коэффициент упругости связи двух атомов углерода

$$k = \frac{2U}{r^2 N_A}, \tag{1}$$

где N_A – число Авогадро. После подстановки соответствующих значений потенциальной энергии связи и расстояния между ядрами, взятых из графика, можно получить значение коэффициента упругости связи двух атомов углерода.

$$k \approx 60 \frac{H}{м}. \tag{2}$$

Построим механическую модель УНТ, используя материал с известными упругими характеристиками. На этой модели измерим величину коэффициента упругости и по нему рассчитаем упругие характеристики УНТ. Этот подход мотивируется линейным характером закона Гука.

В качестве материала для изготовления механической модели УНТ были использованы железо и ABS-пластик для 3D-печати. Для этих материалов известен модуль Юнга E . Это позволяет рассчитать коэффициент упругости для образца известной длины и сечения по формуле

$$k = \frac{ES}{l}. \tag{3}$$

Значения модуля Юнга для железа и ABS-пластика известны и соответственно равны $2 \cdot 10^{11}$ Па и $1,6 \cdot 10^9$ Па.

Если построить зависимость величины абсолютного сжатия от величины приложенной силы, то в случае, когда эта зависимость является линейной, можно по наклону графика найти коэффициент жесткости. Для расчета использовался метод наименьших квадратов [5]. Поскольку теоретически исследуемая зависимость должна проходить через начало координат, то для нахождения коэффициента жесткости можно воспользоваться формулой [5]:

$$k = \frac{\sum_{i=1}^n x_i F_i}{\sum_{i=1}^n x_i^2}, \quad (4)$$

где x_i – величина абсолютного сжатия, F_i – величина приложенной силы, i – порядковый номер экспериментальной точки, n – количество экспериментальных точек.

Была собрана экспериментальная установка для измерения степени деформации объекта в зависимости от приложенного воздействия (рис. 2). Установка представляет собой жесткую конструкцию с закрепленной на шарнире с одной стороны балкой. Сверху на эту балку помещались грузы. Сила давления грузов передавалась объекту, находящемуся под балкой. Деформация модели нанотрубки (изменение линейных размеров или абсолютное сжатие) измерялась с помощью индикатора линейных перемещений часового типа. Цена одного деления индикатора равна 1 мкм.

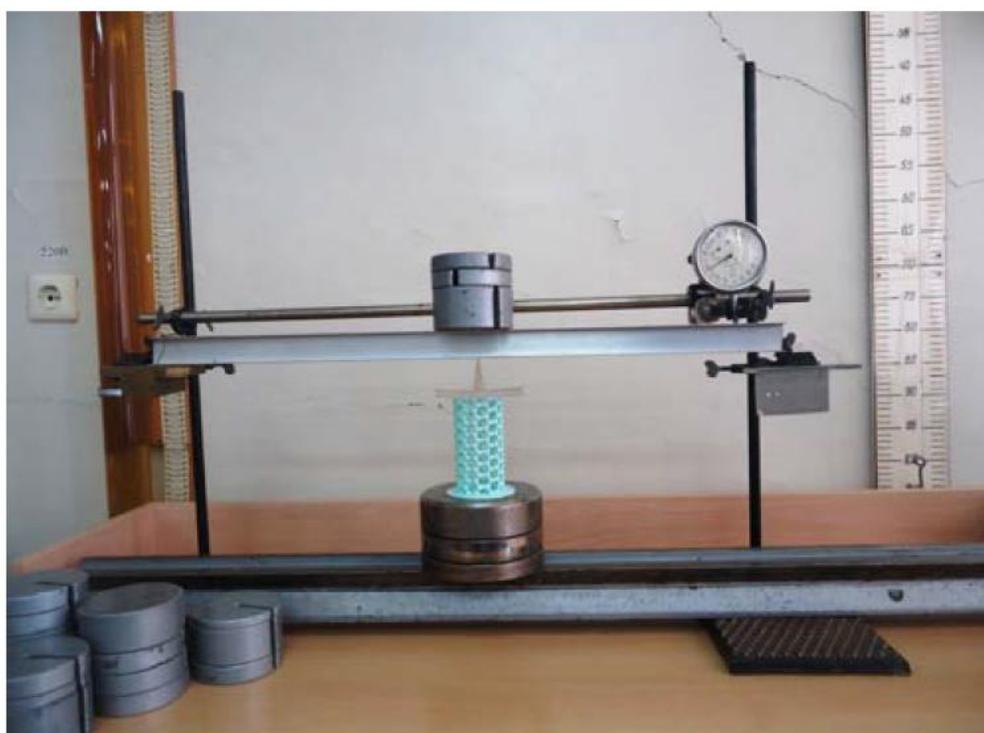


Рис. 2. Экспериментальная установка для проведения измерений с моделью УНТ.

Сначала были проведены эксперименты с моделью одной ячейки УНТ. Эта ячейка представляет собой шестигранник. Модель ячейки была изготовлена из подручных средств (рис. 3). Материалом являлось железо.



Рис. 3. Модель ячейки УНТ.

Измерения проводились для двух положений ячейки. В первом положении внешняя сила прикладывалась к вершине шестигранника вдоль его оси симметрии. Во втором положении ячейка была повернута на угол 30° относительно первого. Внешняя сила в этом случае прикладывалась к грани шестигранника вдоль его оси симметрии. По результатам были построены графики (рис. 4). Измерения проводились многократно для нахождения погрешностей. Относительная погрешность измерения величины абсолютного сжатия при внешних нагрузках в проводимых измерениях не превышала 5%.

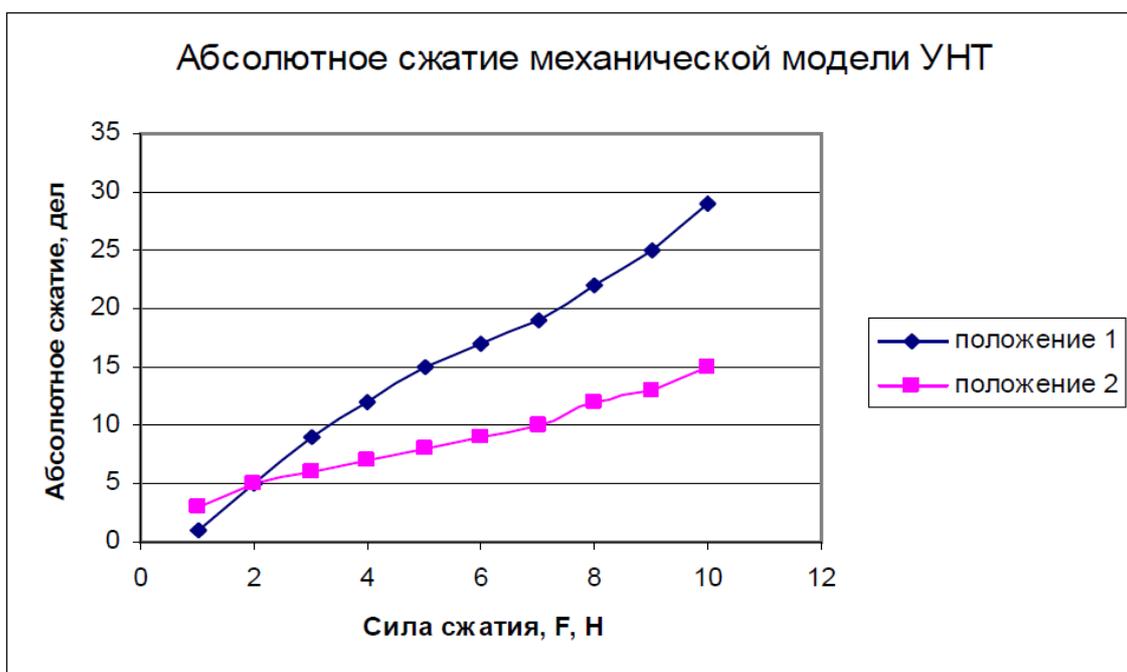


Рис. 4. Зависимость абсолютного сжатия модели ячейки УНТ от приложенной силы.

Для того чтобы убедиться в правомерности модельных представлений и эксперимента, были проведены следующие исследования. На модель ячейки УНТ помещались различные грузы, и измерялась величина соответствующего абсолютного сжатия. После этого ячейка поворачивалась на 60° , и проводились аналогичные измерения. Затем ячейка поворачивалась еще на 60° . Такой опыт был проведен для двух положений модели ячейки УНТ, когда внешняя сила прикладывается к вершине или грани шестигранника. Результаты показаны на графиках (рис. 5 и 6).

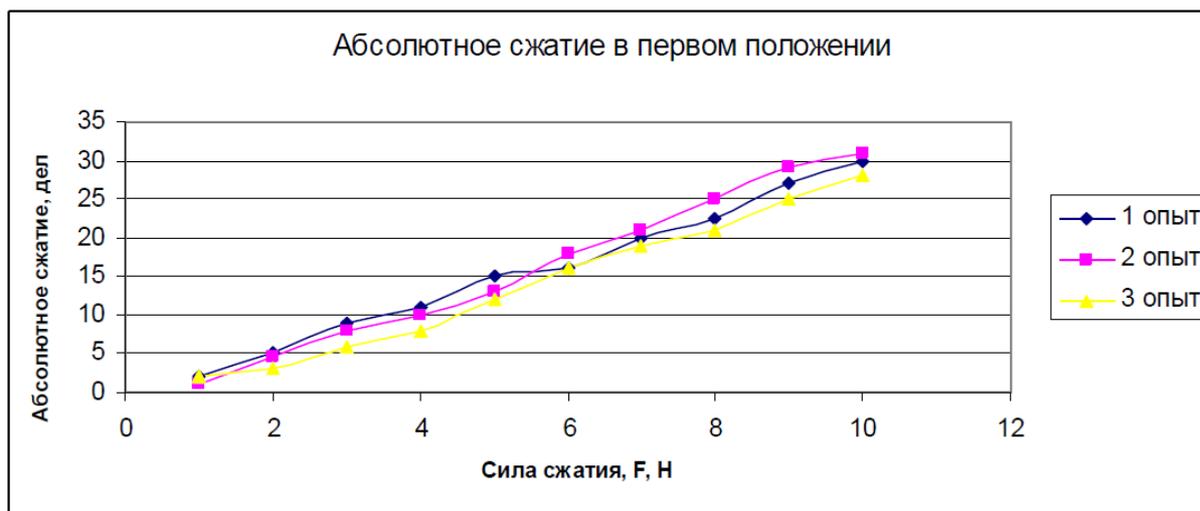


Рис. 5. Зависимость абсолютного сжатия модели ячейки УНТ от приложенной силы (положение 1).

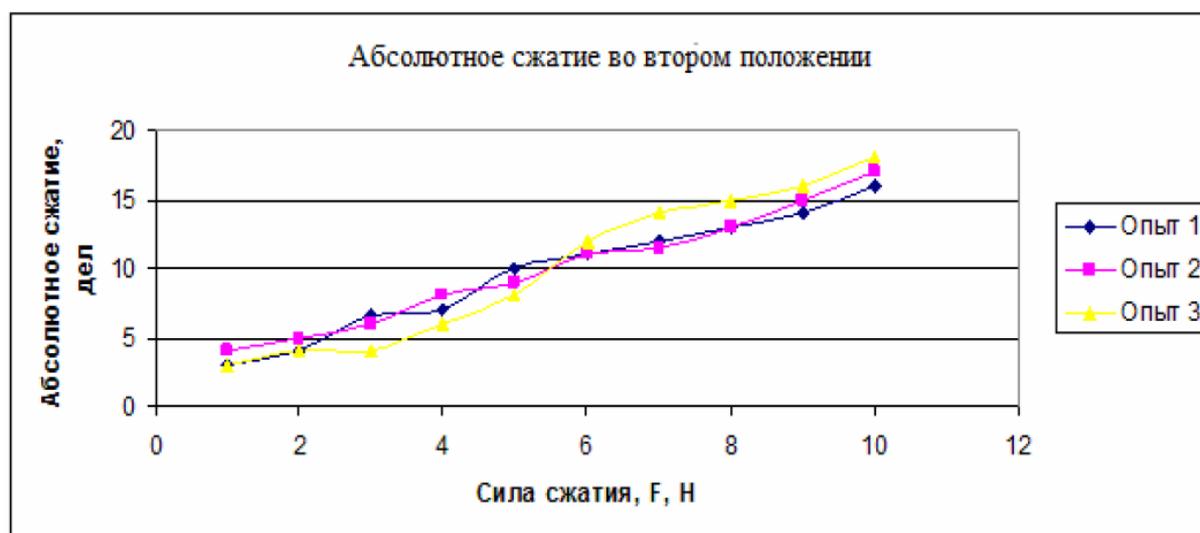


Рис. 6. Зависимость абсолютного сжатия модели ячейки УНТ от приложенной силы (положение 2).

Из проведенных опытов видно, что механическая модель ячейки УНТ подчиняется закону Гука. Все зависимости являются линейными. Также эксперименты показывают на достаточную точность показаний при измерениях. Из полученных графиков (рис. 4-6) по формуле (4) рассчитывался коэффициент упругости ячейки. Он находился в пределах от $3 \cdot 10^5$ Н/м до $5 \cdot 10^5$ Н/м.

Для исследований была изготовлена модель УНТ, напечатанная на 3D-принтере. Модель была спроектирована в программе Nanotube Modeler Version 1.7.7, имеющейся в свободном доступе. Эта программа позволяет генерировать координаты атомов в УНТ. Файл с координатами экспортировался в программу Polygon 2.0, которая позволяет провести печать на 3D-принтере. Печать модели УНТ проводилась на 3D-принтере Picaso 3D Designer. Распечатанная механическая модель УНТ показана на рис. 7.

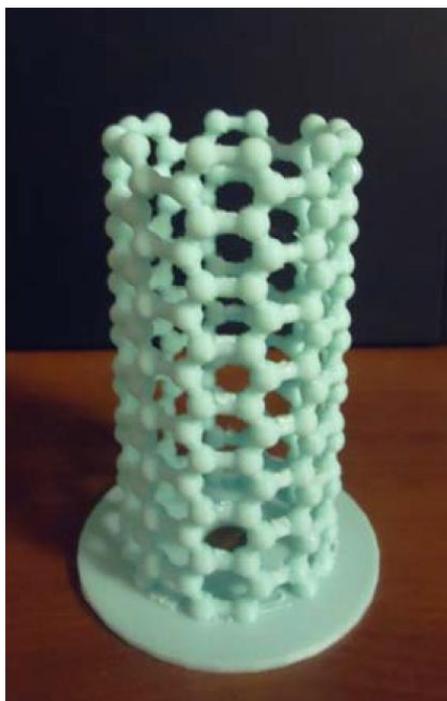


Рис. 7. Механическая модель УНТ.

Измерения упругих характеристик модели УНТ проводились на экспериментальной установке (рис. 2). Проводилось измерение величины абсолютного сжатия модели УНТ при изменении величины внешней нагрузки. По результатам измерений был построен график (рис. 8).



Рис. 8. Зависимость абсолютного сжатия модели УНТ от приложенной силы.

Приведенный на рис. 8 график близок к линейной зависимости между измеряемыми величинами и по формуле (4) можно рассчитать коэффициент упругости модели УНТ. Он оказался равен $9 \cdot 10^5$ Н/м.

В наших исследованиях мы знали все размеры элементов, из которых были изготовлены модель ячейки нанотрубки и сама модель УНТ. Поэтому по известным значениям модуля упругости материала по формуле (3) можно рассчитать коэффициент упругости связи между элементами. Для модели ячейки он оказался равен $2 \cdot 10^7$ Н/м, а для модели УНТ – $2,25 \cdot 10^6$ Н/м. Это позволяет определить коэффициент подобия при переходе на нануровень. Для модели ячейки УНТ из железа он равен $3 \cdot 10^{-6}$, а для модели УНТ из ABS-пластика он равен $2,67 \cdot 10^{-5}$.

Учитывая характерные размеры УНТ, из формулы (3), переписанной в виде

$$E = \frac{kl}{2\pi Rh}, \quad (5)$$

где l – длина УНТ, R и h – соответственно ее радиус и толщина, получаем значения модуля Юнга для УНТ в пределах от $1,5 \cdot 10^{12}$ Па до $3,5 \cdot 10^{12}$ Па. Эти данные согласуются с результатами, приведенными в литературе [4].

Выводы, заключение, перспективы

- Примененный метод моделирования позволил получить числовые значения модуля Юнга для УНТ.
- Согласованность полученных значений модуля Юнга с данными, полученными другими методами, позволяет говорить о правомерности предложенного подхода.

В дальнейшем на основе предложенного подхода мы планируем определить и другие механические характеристики УНТ, такие как модуль сдвига и модуль кручения. Эти характеристики другими известными нам способами измерить очень сложно. Такие исследования позволят уточнить известные данные, полученные в основном теоретически.

Список цитированных источников

1. Колокольцев С.Н. Углеродные материалы. Свойства, технологии, применение. Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2012. 296 с.
2. Дьячков П.Н. Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применения. М.: БИНОМ; Лаборатория знаний, 2006. 293 с.
3. Харрис П. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века. М.: Техносфера, 2003. 336 с.
4. Глухова О.Е., Терентьев О.А. Теоретическое изучение зависимостей модулей Юнга и кручения тонких однослойных углеродных нанотрубок типа zigzag и armchair от геометрических параметров. Физика твердого тела. 2006 г. Том 48, выпуск 7, стр. 1329-1335.
5. Сквайрс Дж. Практическая физика. М.: Мир, 1970. 247 с.