

О свободных колебаниях многослойных углеродных нанотрубок, соединенных химической связью

Углеродные нанотрубки склонны слипаться [1], образуя наборы или "канаты" из нанотрубок, если расстояние между нанотрубками в пределах 0,34 нм то нанотрубки склеиваются под действием Ван-дер-Ваальсовых сил, такие связи легко разрушаются (см. введение). На расстоянии между нанотрубками в пределах 0,142 нм при наличии дефектов кристаллической решетки между атомами углерода образуется химическая связь, устойчивая при свободных колебаниях нанотрубок, закрепленных с одного края.

Целью решения данной задачи является определение нижней части спектра собственных частот двух многослойных нанотрубок, соединенных в местах их контакта химической связью.

Этапы решения задачи:

1. Определение адекватности модели многослойной углеродной нанотрубки в виде анизотропной оболочки.
2. Определение в Nanoengineer-1 минимального размера устойчивой области контакта 2-х нанотрубок методом молекулярной динамики.
3. Построение в ANSYS на основе модели, эскортированной из Nanoengineer-1, анизотропных оболочек с заданными областями контакта и определение свободных собственных колебаний системы из двух нанотрубок.
4. Анализ полученных результатов и эффективности работы комплекса программ Nanoengineer-1 и ANSYS, использованного для решения этой задачи.

На первом этапе в ANSYS строится модель одной многослойной углеродной нанотрубки. Несмотря на то, что согласно [2] минимально возможной толщиной нанотрубки для исследования методом механики сплошной среды является 3,4 нм, т.е. состоящей из 10 слоев, далее

рассматривается трехслойная нанотрубка с толщиной 1,02 нм. Выбор такой толщины обусловлен следующими факторами. Во-первых, в отличие от [2], где применяется модель анизотропии твердого тела, здесь будет рассматриваться модель анизотропной, точнее ортотропной, оболочки. Во-вторых, для проверки адекватности модели необходимы теоретические и экспериментальные значения механических свойств нанотрубок других авторов, а для нанотрубок из 10 и более слоев они не известны или недостаточны.

Вычисляются собственные частоты свободных колебаний нанотрубки, закрепленной с двух концов.

Модель оболочки строится с помощью команды препроцессора Modelling>Operate>Extrude>Lines>About Axis.

Исходные параметры [3]:

- Внешний радиус нанотрубки с учетом толщины слоев (0,34 нм) – 0,7 нм.
- Длина равна 14 нанометров.
- Толщина 3хслойной нанотрубки – 0,35 нанометра.

Плотность (DENS) нанотрубок равна 2300 кг/м³, модуль Юнга – 1 ТПа [3].

Сетка конечных элементов SHELL93 многослойной анизотропной оболочки строится с шагом 0,5 нанометров и соответствует предложенной здесь для описания нанообъектов модели, основанной на теории многослойных анизотропных оболочек.

По результатам частотного анализа получены 10 частот и форм свободных колебаний. Полученные собственные частоты и частоты [3] сравниваются в таблице 4. Расхождение результатов, не превосходящее 2 процентов, говорит о достаточной адекватности континуальной модели, не учитывающей поведение отдельных атомов.

Таблица 1. Собственные частоты свободных колебаний углеродной нанотрубки, закрепленной с двух сторон

Номер собственной частоты и формы	ANSYS	[3]	%
1	0,645	0,6487	0,564
2	2,524	2,5321	0,321
3	5,0763	5,0232	1,057
4	7,0651	7,1043	0,552
5	9,3029	9,316	0,14
6	12,203	12,079	1,029
7	15,503	15,504	0,004
8	19,556	19,597	0,209
9	24,301	24,34	0,161
10	29,7	29,714	0,046

Далее рассматриваются более длинные и широкие контактирующие друг с другом углеродные нанотрубки.

Исходные параметры для расчета свободных колебаний двух нанотрубок, закрепленных с одного конца в недеформируемой неподвижной пластине:

- Нанотрубки хиральностью (100,100) (диаметр – 13.56 нм).
- Длина каждой нанотрубки равна 1000 нанометров.
- Толщина 3хслойной нанотрубки равна 1,02 нанометра.
- Расстояние между нанотрубками вне зоны контакта – 6 нм, что соответствует расстоянию между нанотрубками в [4].

Для определения размера устойчивой зоны контакта проводится анализ в Nanoengineer-1 места контакта двух нанотрубок. Для моделирования нанотрубок длиной 1000 нанометров из-за большого числа составляющих их частиц требуется суперкомпьютер, поэтому далее рассматривается участок

нанотрубки длиной 10 нанометров (рис.1), а размер контактирующей зоны варьируется от 1 до 0,3 нанометров.

Контакт между нанотрубками моделируется путем разрушения связей между атомами каждой нанотрубки (создаются дефекты) и соединения всех разорванных связей попарно между нанотрубками.

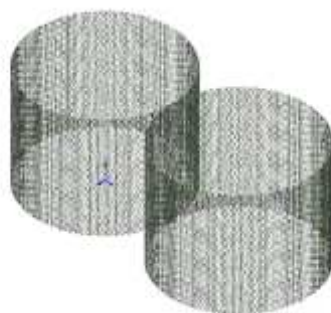


Рис.1. Атомарная модель участка контактирующих нанотрубок
(всего 34400 атомов)

В результате моделирования методом молекулярной динамики с помощью потенциала ОФФ и соответствующего численного алгоритма установлено (рис.2), что для устойчивости зоны контакта достаточно объединения атомов двух нанотрубок на участке длиной 1 нанометр.

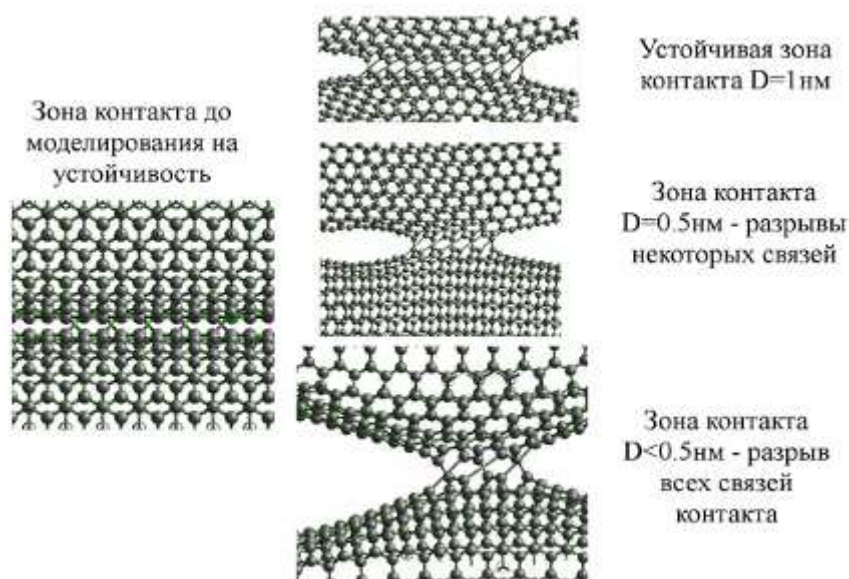


Рис.2. Моделирование и исследование устойчивости зоны контакта двух нанотрубок в Nanoengineer-1

На следующем этапе решения задачи с помощью функции передачи модели из Nanoengineer-1 в ANSYS строятся опорные точки, предназначенные для формирования модели нанотрубок в виде анизотропных оболочек.

Таким образом, благодаря созданию единого комплекса программ не требуется тратить время на отдельный запуск ANSYS, на определение и установки в нем необходимого наномасштаба, формы и расположения нанообъектов.

Строится сетка конечных элементов (КЭ) с шагом 0.5 нм в зоне контакта и 20 нм на остальных частях поверхностей нанотрубок (рис.3), затем вычисляются собственные частоты свободных колебаний двух скрепленных нанотрубок и определяются формы свободных колебаний.



Рис.3. Сетка КЭ системы, состоящей из двух контактирующих нанотрубок.

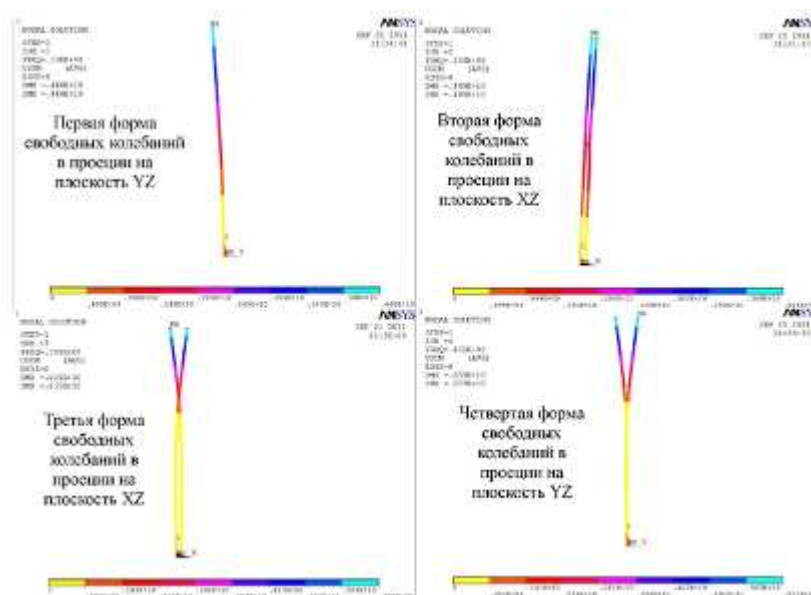


Рис.4. 4 первые формы свободных колебаний двух контактирующих нанотрубок.

На рис.4 представлены 4 формы свободных колебаний.

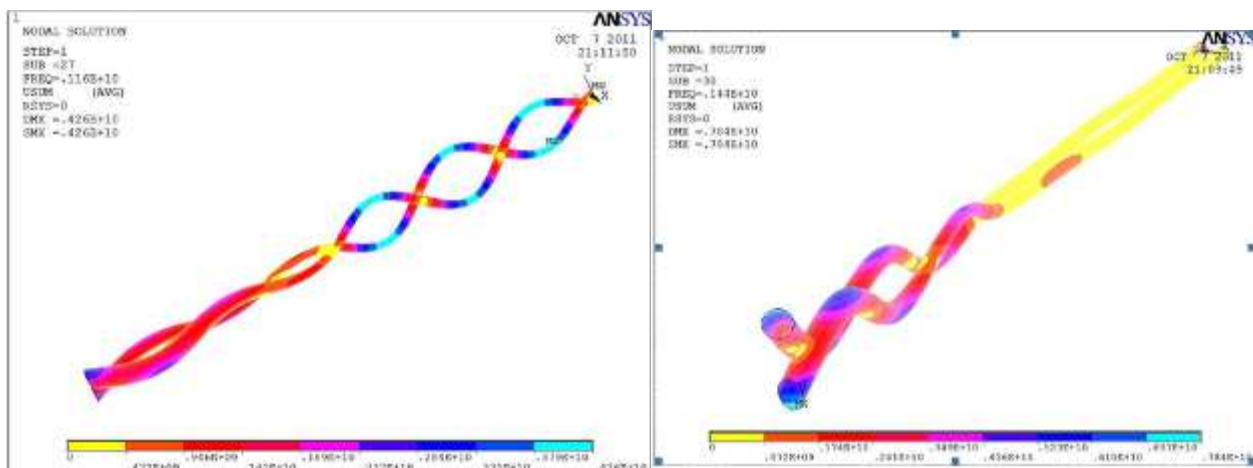


Рис.5. 27 и 30 формы свободных колебаний двух контактирующих нанотрубок.

Таким образом, с помощью комплекса программ Nanoengineer-1 и ANSYS было проведено комплексное исследование свободных колебаний системы из двух углеродных нанотрубок, соединенных химической связью в зоне контакта. Определен размер устойчивой зоны контакта двух нанотрубок методом молекулярной динамики с помощью нового потенциала и соответствующего численного алгоритма, и при минимально возможном размере устойчивой зоны контакта между нанотрубками определены собственные частоты и формы свободных колебаний системы из двух нанотрубок. Данные о собственных частотах необходимы при разработке новых наноэлектромеханических систем (НЭМС). Основа НЭМС на основе нанотрубок – это механическая энергия, выделяемая при подаче на нанотрубки тока с переменным напряжением, при частоте изменения напряжения, близкой к собственной частоте колебаний нанотрубки, амплитуда колебания максимальна. Пример такой НЭМС представлен в работе [5].

При совпадении частоты колебаний переменного электрического тока с одной из частот свободных колебаний посредством пондеромоторных сил возникает резонанс механических колебаний и, как следствие, увеличение амплитуды колебаний. В одних случаях, с таким явлением следует бороться, например, в антенных конструкциях, в других случаях это явление может

служить источником механических движений наноконструкции, направленных на достижение определенных целей.

С целью учета поперечных сил здесь предложена следующая математическая модель. Уравнения равновесия многослойной анизотропной оболочки [6]:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial(BT_1)}{\partial\alpha} - \frac{\partial B}{\partial\alpha}T_2 + \frac{\partial(AS_{21})}{\partial\beta} + \frac{\partial A}{\partial\beta}S_{12} + ABk_1N_1 &= -ABX, \\
 \frac{\partial(AT_2)}{\partial\beta} - \frac{\partial A}{\partial\beta}T_1 + \frac{\partial(BS_{12})}{\partial\alpha} + \frac{\partial B}{\partial\alpha}S_{21} + ABk_2N_2 &= -ABY, \\
 -(k_1T_1 + k_2T_2) + \frac{1}{AB} \left(\frac{\partial(BN_1)}{\partial\alpha} + \frac{\partial(AN_2)}{\partial\beta} \right) &= -Z, \\
 \frac{\partial(BM_1)}{\partial\alpha} + \frac{\partial(AM_{21})}{\partial\beta} + \frac{\partial A}{\partial\beta}M_{12} - \frac{\partial B}{\partial\alpha}M_2 &= ABN_1, \\
 \frac{\partial(AM_2)}{\partial\beta} + \frac{\partial(BM_{12})}{\partial\alpha} + \frac{\partial B}{\partial\alpha}M_{21} - \frac{\partial A}{\partial\beta}M_1 &= ABN_2, \\
 S_{12} - S_{21} + M_{12}/R_1 - M_{21}/R_2 &= 0
 \end{aligned}$$

(1)

Соотношения упругости [6]:

$$T_1 = C_{11}\varepsilon_1 + C_{12}\varepsilon_2 + K_{11}\xi_1 + K_{12}\xi_2,$$

$$T_2 = C_{12}\varepsilon_1 + C_{22}\varepsilon_2 + K_{12}\xi_1 + K_{22}\xi_2,$$

$$S = S_{12} = S_{21} = C_{66}\omega + K_{66}\tau,$$

$$M = M_{12} = M_{21} = K_{66}\omega + D_{66}\tau,$$

$$M_1 = D_{11}\xi_1 + D_{12}\xi_2 + K_{11}\varepsilon_1 + K_{12}\varepsilon_2,$$

$$M_2 = D_{12}\xi_1 + D_{22}\xi_2 + K_{12}\varepsilon_1 + K_{22}\varepsilon_2,$$

(2)

здесь T_i , S_{ij} , N_i – внутренние мембранные и перерезывающие силы; M_i , M_{ij} – изгибающие и крутящие моменты, ε_i , ξ_i , ω , τ – деформации; C_{ij} , K_{ij} , D_{ij} – коэффициенты жесткости оболочки, учитывающие многослойность и свойства анизотропии оболочки; A , B – коэффициенты Ляме криволинейной системы

координат α, β ; X, Y, Z – компоненты вектора внешней нагрузки; k_1, k_2 – главные кривизны, а R_1, R_2 – радиусы линий главных кривизн срединной поверхности оболочки.

Уравнения (1), (2) многослойных анизотропных оболочек дополняются уравнениями Максвелла [7]:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, & \operatorname{div} \vec{B} = 0 \\ \operatorname{rot} \vec{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \vec{j}, & \operatorname{div} \vec{D} = 4\pi\rho_e \end{cases}, \quad (3)$$

где $\vec{B} = \vec{H} + 4\pi\vec{M}$ – вектор магнитной индукции, $\vec{D} = \vec{E} + 4\pi\vec{P}$ – вектор электрической индукции, \vec{H} – вектор магнитной напряженности, \vec{E} – вектор электрической напряженности, \vec{M} – вектор намагниченности, \vec{P} – вектор электрической поляризации, \vec{j} – вектор электрического тока, c – скорость света, ρ_e – плотность распределенных электрических зарядов; а также уравнениями

$$\begin{aligned} R\vec{j} &= \vec{E}, \\ \vec{B} &= \mu\vec{H}, \\ \vec{D} &= \epsilon\vec{E}, \end{aligned} \quad (4)$$

где R – электрическое сопротивление проводника, μ – коэффициент магнитной проницаемости, ϵ – диэлектрическая постоянная.

В уравнениях (1), (2) учитываются также пондеромоторные силы, порожденные влиянием электромагнитного поля, порожденного переменным электрическим током [7]:

$$\vec{F}_{\text{понд}} = \rho_e \vec{E} + \frac{1}{c} \vec{j} \times \vec{B} + \frac{1}{8\pi} (D^\alpha \vec{\nabla} E_\alpha + B^\alpha \vec{\nabla} H_\alpha - E_\alpha \vec{\nabla} D^\alpha - H_\alpha \vec{\nabla} B^\alpha), \quad (5)$$

где α – «немой» индекс суммирования (индекс Эйнштейна), $\vec{\nabla}$ – дифференциальный векторный набла-оператор.

Заключение.

Собственные частоты углеродной нанотрубки используются в [8] [9] [10] для построения нанорадио из одной однослойной углеродной нанотрубки. «Радиоволны, принимаемые нано-антенной, заставляют ее вибрировать, но это происходит только тогда, когда частота радиоволны совпадает с резонансной частотой изгиба нанотрубки-антенны. Таким образом, нанотрубка выступает еще и в роли тюнера, принимая радиоволны строго определенного набора частот» [11]. Набор собственных частот для одиночных однослойных углеродных нанотрубок в [8] [9] [10] варьируется от 10 МГц до нескольких ГГц. Использование многослойных нанотрубок большого диаметра сокращает расходы на производство нанорадио, т.к. однослойные нанотрубки дороже. Кроме того, в процессе производства нанотрубок образуются дефекты кристаллической решетки и несколько нанотрубок слипаются в пучок. Как видно из решения задачи, набор собственных частот двух многослойных нанотрубок, соединенных химической связью, сохраняется в значениях от 10 МГц, что соответствует частотам радиостанций. Использование такого пучка многослойных нанотрубок так же применимо для производства нанорадио, кроме того изменяя место слипания и число нанотрубок можно изменять и собственные частоты, таким образом можно изменять частоты приема нанорадио.

Также решена задача о вероятностном распределении свободных колебаний группы многослойных углеродных нанотрубок, случайным образом соединенных химической связью.

В рамках задачи создана параметрическая модель на языке APDL группы многослойных углеродных нанотрубок, случайным образом соединенных химической связью. В модели можно изменять следующие параметры:

KOLICH – количество нанотрубок

DLINA – длина нанотрубок

RADIUS – радиус нанотрубок

DELENIE – место соединения нанотрубок (0,5 – середина, 0 и 1 – края)

OTKLON – отклонение нанотрубок друг от друга

TOLS – толщина нанотрубок

С помощью этой модели проведены расчеты собственных частот группы из 10 трехслойных нанотрубок длиной 1000 нм с отклонением OTKLON в 6 нм, скрепленных по середине (рис. 6) и по краям (рис. 7)

Так же проведен вероятностный анализ пяти трехслойных нанотрубок длиной 300 нм, место соединения которых определяется нормальным законом распределения. Параметр DELENIE задается с матожиданием 0,5 и дисперсией 0,15. В ANSYS получены математическое ожидание и дисперсия максимального напряжения в первой форме собственных частот свободных колебаний (рис. 8).

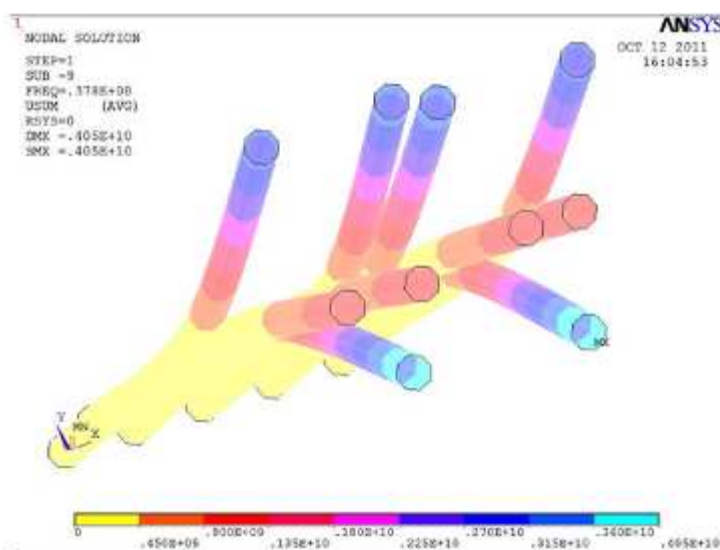


Рис.6. 9-ая форма свободных колебаний десяти контактирующих по середине нанотрубок

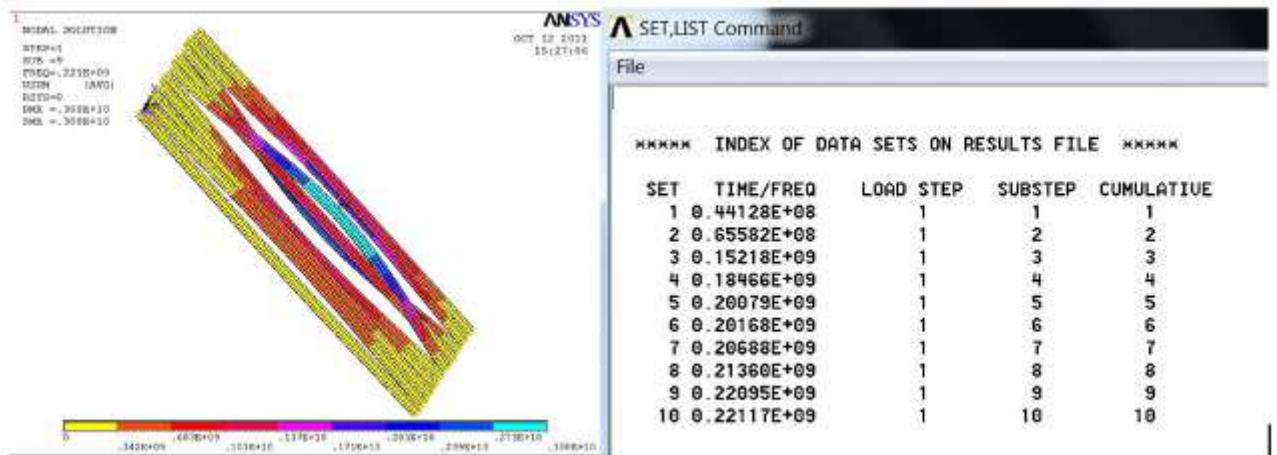


Рис.7. 9-ая форма свободных колебаний десяти контактирующих по краям нанотрубок и список собственных частот

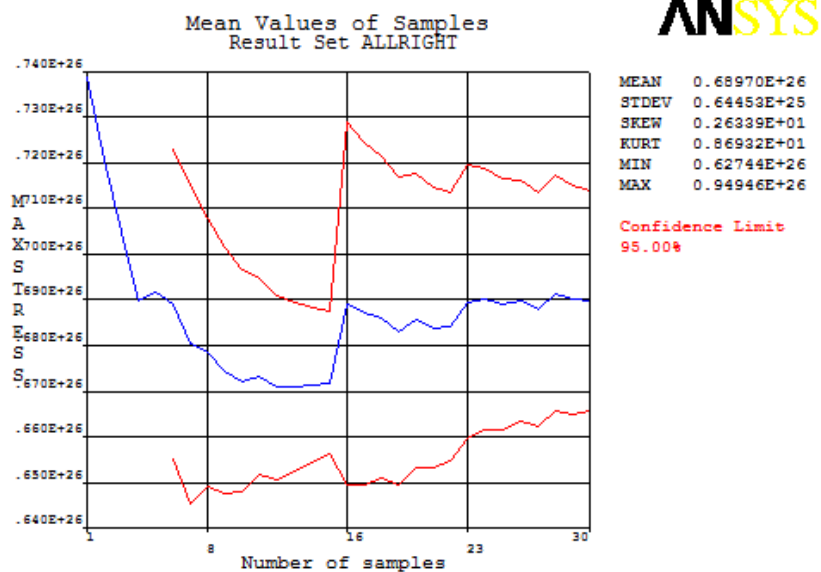


Рис. 8. Математическое ожидание и дисперсия максимального напряжения в первой форме собственных частот свободных колебаний нанотрубок в зависимости от числа экспериментов

Список литературы

1. Юдинцев В. МЭМС-датчики: нанотехнологии наступают // Электроника: наука, технология, бизнес. 2006. № 8. С. 26–30.
2. Лисовенко Д.С. Описание механических свойств углеродных и неуглеродных нанополос и нанотрубок в рамках теории упругости анизотропного тела // Автореферат канд. дисс. М.: ИПМех РАН. 2010. 27 с.
3. Pentaras D. Vibration, buckling and impact of carbon nanotubes // Dissertation Ph.D. Florida Atlantic University. 2009. 136 p.
4. Izadi-Najafabadi A, Futaba DN, Iijima S, et al. Ion Diffusion and Electrochemical Capacitance in Aligned and Packed Single-Walled Carbon Nanotubes // Journal of the American Chemical Society. 2010. V. 132 (51). P. 18017-18019.
5. Sazonova V. et al. A tunable carbon nanotube electromechanical oscillator // Nature. 2004. V. 431. P. 284–287.
6. Амбарцумян С.А. Общая теория анизотропных оболочек. М.: Наука, 1974. 446 с.
7. Седов Л.И. Механика сплошной среды. М.: Наука, 1976. Т. 1. 536 с.
8. Jensen K., Weldon J., et.al. Nanotube radio // Nano Lett. V. 7. № 11. 2007. P. 3508–3511.
9. Koksal C. E., Ekici E. A nanoradio architecture for interacting nanonetworking tasks // Nano Communication Networks. № 1 (1). 2010. P. 63-75 .
10. Chaste J., Lechner L., et.al. Single Carbon Nanotube Transistor at GHz Frequency // Nano Letters. V. 8 (2). P. 525-528.
11. Свидиненко Ю. Нано-радио из одной нанотрубки – прорыв в НЭМС-устройствах [Электронный ресурс]. 2007. URL: <http://www.nanonewsnet.ru/articles/2007/nano-radio-iz-odnoi-nanotrubki-proryv-v-nems-ustroistvakh> (дата обращения: 10.09.2011).