

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра математической теории
упругости и биомеханики

Модуль Юнга колонного графена zigzag

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

студентки 2 курса 237 группы

направления 01.04.03 – 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

Введение. Актуальной задачей в области усовершенствования работы наноустройств является создание композитного углеродного материала с уникальными свойствами, который будет использоваться в качестве элементной базы этих устройств. Данные композиты позволят минимизировать электропотребление, уменьшить расход материала и увеличить качество работы наноустройства путем поиска оптимальных геометрических параметров композитов.

Одним из таких материалов является колонный графен – каркасный углеродный композит, состоящий из графена с присоединенными к нему углеродными нанотрубками (УНТ). Колонный графен является гибким [1], характеризуется высокой электрической проводимостью [2-3]. В настоящее время активно изучаются его электронные [2-3], механические [4-15] и теплопроводящие свойства [8-9,16-17].

Известно, что упругие свойства колонного графена в разы могут отличаться для структур с различными киральностью [7,8,15], длиной [10,11,13,15] или диаметром УНТ [7,8,15,10], расстояниями между УНТ [11,13,14]. Использование колонного графена связано с теми или иными деформирующими нагрузками. Для того, чтобы расширить сферы применения колонного графена и увеличить качество работы наноустройств на основе колонного графена, необходимо знать его механические свойства.

Целью данной работы является теоретическое исследование модуля Юнга конечно-размерного колонного графена на основе zigzag-УНТ. Исследованы композиты с учетом и без учета подложки.

В рамках данной магистерской работы решены следующие **задачи**:

1. Оценка современного состояния рассматриваемой области исследований, анализ работ, посвященных изучению перспективных направлений использования колонного графена, а также исследованию его упругих свойств.
2. Построение серии композитов квадратного и ленточного колонного графена с разными структурными параметрами: размеры графенового

композита, изменяющиеся с изменением количества УНТ в композите, длины УНТ, диаметры УНТ.

3. Определение модуля Юнга построенных моделей композитов.
4. Анализ полученных результатов.

Научная новизна.

1. Впервые получены значения модуля Юнга колонного графена zigzag в зависимости от размеров графенового полотна композита и количества УНТ в композите, длин и диаметра УНТ.
2. Выявлено, что для композитов с УНТ диаметрами 5 Å и 10 Å без подложки велико влияние краевых эффектов, которые не позволяют оценить зависимость модуля Юнга от размеров УНТ и графенового полотна композита. Порядок модуля Юнга совпадает для композитов, исследованных с учетом и без учета влияния подложки.
3. Выявлено, что для композитов с УНТ диаметрами 5 Å и 10 Å, исследованных с учетом подложки, модуль Юнга увеличивается с увеличением размеров графенового полотна композита.
4. Установлено, что значения модуля Юнга для квадратных и ленточных композитов для равных длин УНТ и размеров графенового полотна эквивалентны.
5. Установлено, что модуль Юнга увеличивается с увеличением длин УНТ в композите.

Научная значимость. Результаты исследования модуля Юнга конечно-размерного колонного графена zigzag, определена конфигурация композита, позволят использовать колонный графен в элементной базе наноустройств. Использование этого композита обеспечит сокращение расхода материала, увеличение качества работы и срок службы наноустройства.

Структура и объем работы. Магистерская работа состоит из введения, пяти разделов, заключения и содержит 59 страниц текста, включая 61 рисунок, 8 таблиц. Список используемых источников содержит 60 наименований.

Раздел 1. Критический анализ литературы

Раздел 2. Упругие свойства колонного графена

Раздел 3. Объект исследования

Раздел 4. Методология исследования

Раздел 5. Результаты и их обсуждения

Основное содержание работы. Во введении данной магистерской работы представлена актуальность и обоснована необходимость проделанной работы.

В первом разделе проведена оценка современного состояния решаемой проблемы, которая позволила выявить актуальность и новизну данного научного направления. Представлены работы, посвященные применению колонного графена в сорбционной медицине [18-24] и автоэмиссионной электронике [25- 27].

Во втором разделе проведен анализ подходов исследования решаемой проблемы другими авторами [6-15], представлены существующие исследования упругих свойств колонного графена [6-15].

В третьем разделе представлен объект исследования: конечно-размерный колонный графен zigzag (рисунок 1).

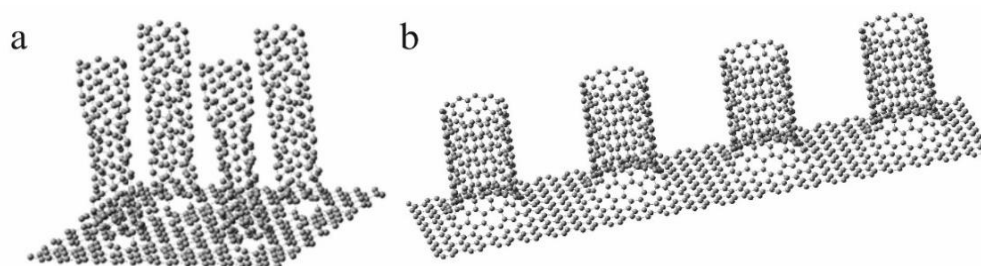


Рисунок 1 - Модели колонного графена, построенные в GaussView: а – квадратная модель; б – ленточная модель

Атомарная структура построенных моделей (рисунок 1) соответствует атомарной структуре синтезированных композитов [28-29]. Края УНТ в композите остаются открытыми, в графеновом полотне образуются отверстия, по форме и размеру соответствующие УНТ [28-29].

Проведена оценка влияния структурных параметров колонного графена на его модуль Юнга. Исследование проведено на серии численных экспериментов. У квадратных композитов количество УНТ вдоль armchair торца графенового

полотна соответствует количеству УНТ вдоль zigzag торца. В ленточных композитах вдоль торца графенового полотна zigzag располагалась одна УНТ, вдоль торца armchair количество УНТ изменялось.

В пределах каждого композита длина и диаметр УНТ оставались постоянными. Расстояние между стенками УНТ составило 12 Å. Диаметры УНТ в исследованных композитах составили 5 Å, 10 Å и 15 Å. Длины УНТ изменялись от 3.2 Å до 31 Å. Размеры графенового полотна изменялись в соответствии с изменением количества УНТ в композите.

В четвертом разделе приведено описание методологии исследования модуля Юнга. Оценка модуля Юнга проведена для композитов с учетом и без учета влияния подложки.

Определение значения полной энергии проводилось в программном пакете Gaussian'09 с использованием метода молекулярной-механики на основе энергетического потенциала Universal Force Field (UFF). Величина модуля Юнга определялась с помощью известной методологии [30].

В пятом разделе представлены результаты исследования зависимости модуля Юнга колонного графена zigzag от длин и диаметров УНТ, размеров и формы графенового полотна композита.

Результаты исследования модуля Юнга для квадратных композитов без учета подложки с диаметрами УНТ 5 Å и 10 Å представлены на рисунках 2-3.

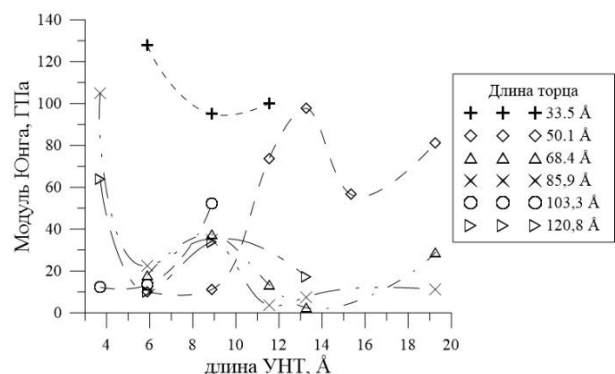


Рисунок 2 - Величина модуля Юнга для композитов с УНТ диаметром 5 Å

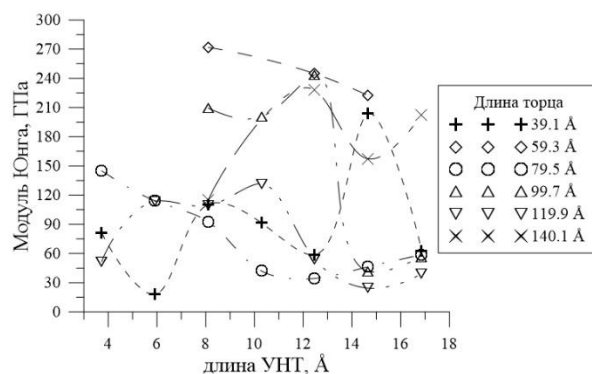


Рисунок 3 - Величина модуля Юнга для композитов с УНТ диаметром 10 Å

В представленных композитах велико влияние краевых эффектов. Расстояние между УНТ в композите мало в сравнении с длинами УНТ. Атомы,

расположенные на открытых торцах УНТ, начинают притягиваться, поднимая незакрепленное графеновое полотно композита и вызывая сворачивание композита. Свернутость композита увеличивается с увеличением длин УНТ и уменьшается с увеличением размеров графенового полотна в композите.

Среди композитов с диаметром УНТ 5 Å наибольший модуль Юнга зафиксирован у композита с длиной УНТ 6 Å, длиной торца графенового полотна 33.5 Å, в состав композита вошли 4 УНТ. Среди композитов с диаметром УНТ 10 Å наибольший модуль Юнга зафиксирован у композита с длиной УНТ 8 Å, длиной торца графенового полотна 59,3 Å, в состав композита вошли 9 УНТ.

Результаты исследования модуля Юнга для квадратных композитов без учета влияния подложки с УНТ диаметром 15 Å представлены на рисунке 4.

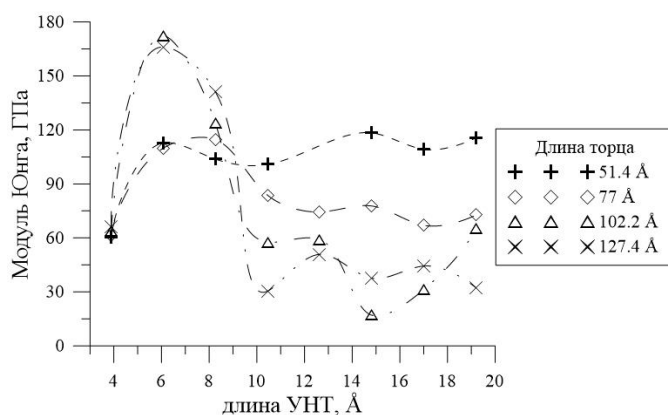


Рисунок 4 - Величина модуля Юнга для композитов с УНТ диаметром 15 Å

В композитах с диаметром УНТ 15 Å влияние краевого эффекта не наблюдается. В этом случае можно оценить влияние структурных параметров композита: начиная с длин УНТ 10 Å модуль Юнга композита монотонно уменьшается с увеличением размеров графенового полотна. Полученный результат в порядках совпал с результатами, полученными для протяженного колонного графена на основе armchair-УНТ [15].

В процессе синтеза колонного графена формирование колонного графена осуществляется на многослойном графене [1]. Моделирование многослойного графена осуществляется путем создания жестко закрепленного однослойного графена в качестве подложки. Подложка размещена на расстоянии 3.2 Å от

графенового полотна композита. Размер подложки превосходит размер графенового полотна композита.

В рамках данной магистерской работы проводились исследования ленточных композитов и квадратных композитов с УНТ диаметром 5 Å с учетом влияния подложки. Проведена оценка влияния формы композита на его модуль Юнга.

Зависимость модуля Юнга zigzag-колонного графена с УНТ диаметром 5 Å от длин УНТ и размеров графенового полотна для квадратного композита с учетом влияния подложки представлена на рисунке 5. Зависимость модуля Юнга zigzag-колонного графена с УНТ диаметром 5 Å от длин УНТ и размеров графенового полотна для ленточного композита с учетом влияния подложки представлена на рисунке 6. Среди квадратных композитов с УНТ диаметром 5 Å наибольшей прочностью обладает композит с длиной УНТ 31 Å, длиной торца 103,5 Å, в состав которого вошли 36 УНТ. Его модуль Юнга составил 190 ГПа. Среди ленточных композитов с УНТ диаметром 5 Å наибольшей прочностью обладает композит с длиной УНТ 31 Å, длиной торца 138,5 Å, в состав которого вошли 8 УНТ. Его модуль Юнга составил 180 ГПа.

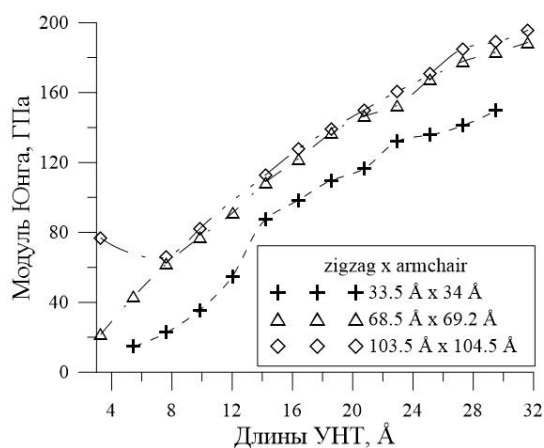


Рисунок 5 - Величина модуля Юнга для квадратных композитов с УНТ диаметром 5 Å

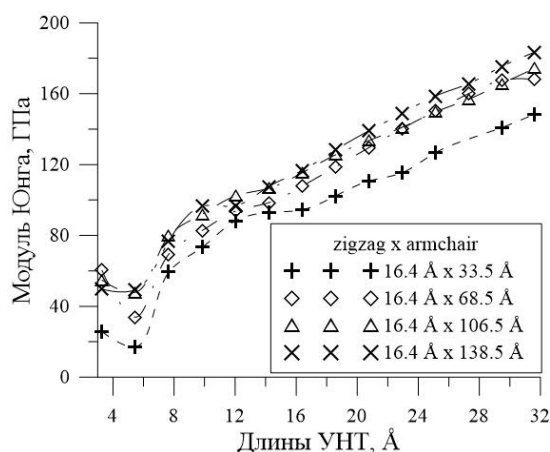


Рисунок 6 - Величина модуля Юнга для ленточных композитов с УНТ диаметром 5 Å

Полученные результаты качественно и в порядках совпали с результатами для многослойных столбчатых композитов, многослойных протяженных

armchair-композитов [10-11], для однослойных протяженных armchair-композитов [15].

Исследованы ленточные структуры с учетом влияния подложки на основе УНТ диаметром 10 Å и 15 Å (рисунки 7-8).

Среди композитов с УНТ диаметром 10 Å наибольшей прочностью обладает композит с длиной УНТ 31 Å, длиной торца 173,5 Å, в состав которого вошли 8 УНТ. Его модуль Юнга составил 100 ГПа. Среди композитов с УНТ диаметром 15 Å наибольшей прочностью обладает композит с длиной УНТ 31 Å, длиной торца 51,1 Å, в состав которого вошли 2 УНТ. Его модуль Юнга составил 164 ГПа.

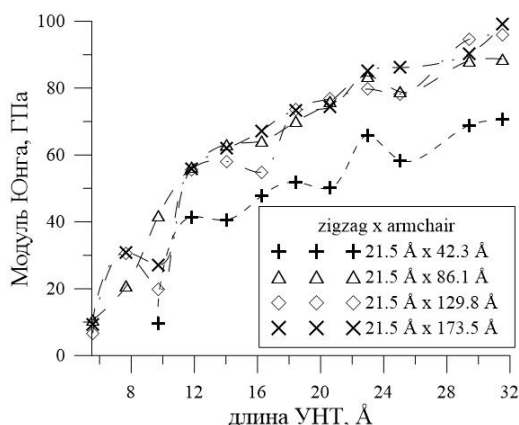


Рисунок 7 - Величина модуля Юнга для ленточных композитов с УНТ диаметром 10 Å

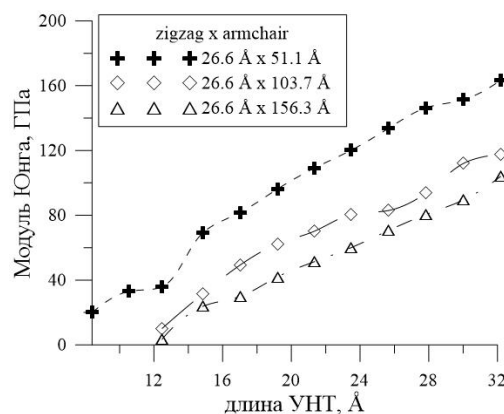


Рисунок 8 - Величина модуля Юнга для ленточных композитов с УНТ диаметром 15 Å

Полученные результаты качественно и в порядках сходятся с результатами для многослойных протяженных armchair-композитов [10-11], для однослойных протяженных armchair-композитов [15].

Заключение. В рамках данной работы впервые осуществлялось исследование модуля Юнга конечно-размерного zigzag-колонного графена в зависимости от длин и диаметров УНТ, размеров графенового полотна. Исследование проведено для квадратных и ленточных композитов с УНТ диаметром 5 Å, 10 Å и 15 Å, длины УНТ изменялись в пределах от 3.2 Å до 31 Å. Размеры графенового полотна изменялись в соответствии с изменением количества УНТ в композите.

Получены теоретические значения модуля Юнга при растяжении исследованных структур на 3% вдоль нормали к центру графенового полотна для свободных композитов и композитов, стоящих на подложке.

Получены следующие результаты:

1. Во всех композитах, исследованных с учетом влияния подложки, величина модуля Юнга увеличивалась с увеличением длин УНТ в композите. Кривые представленные на графиках для каждого размера графенового полотна приближаются друг к другу. Можно предположить, что при существенном увеличении размеров графенового полотна в композите, величина модуля Юнга не будет от него зависеть.
2. При исследовании композитов с диаметрами 5 Å, 10 Å без учета подложки выявлено, что в таких моделях велико влияние краевых эффектов, которые не позволяют оценить зависимость величины модуля Юнга от структурных параметров. Порядок модуля Юнга композитов, исследованных с учетом и без учета влияния подложки, сохраняется. При исследовании композитов с диаметрами 5 Å, 10 Å с учетом подложки выявлено, что величина модуля Юнга увеличивается с увеличением размеров графенового полотна в композите.
3. При исследовании композита с диаметром 15 Å без учета подложки краевой эффект не оказывает влияния. Результаты, полученные при исследовании зависимости модуля Юнга от размеров графенового полотна, качественно эквиваленты для композитов, исследованных с учетом и без учета подложки. При увеличении размеров графенового полотна композита модуль Юнга уменьшается.

Наибольшая механическая прочность зафиксирована у композита с диаметром УНТ 5 Å и длиной 31 Å, в состав которого вошли 36 УНТ, размеры графенового полотна которого составили 103.5 Å x 104.5 Å; его модуль Юнга составил 190 ГПа.

Исходя из полученных результатов, можно сделать вывод, что все поставленные задачи решены. Наблюдается высокое совпадение полученных результатов качественно и численно с предыдущими исследованиями [10-

11,13,15], в том числе, зарубежных авторов [11,13]. С учетом полученных данных, исследованные композиты являются перспективным материалом для использования в автоэмиссионной электронике, сорбционной медицине.

Список используемых источников:

- 1 Vertically Aligned Carbon Nanotubes/Graphene Hybrid Electrode as a TCO- and Pt-Free Flexible Cathode for Application in Solar Cells / P. Dong [et al.] // J. Mater. Chem. A. - 2014. – V. 2. – P. 20902.
- 2 Перспективный композитный материал на основе нанотрубок и графена для эмиссионной электроники / О.Е. Глухова [и др.] // Радиотехника. – 2015. – Т. 7. – С. 64 -69.
- 3 Shahsavari, R. Junction configuration-induced mechanisms govern elastic and inelastic deformations in hybrid carbon nanomaterials / R. Shahsavari, N. Sakhavand // Carbon. – 2015. – V. 95. – P. 699 – 709.
- 4 Kolesnikova, A.S. Pillared graphene on the basis of zigzag carbon nanotubes for adsorption in medicine: mechanical properties / A.S. Kolesnikova, M.M. Mazepa // Proc. SPIE. - 2018. - V. 10508. - P. 105080N.
- 5 Moradi, M. Mechanical behavior of carbon nanotube and graphene junction as a building block for 3D carbon nanostructures / M. Moradi, J. A. Mohandesi // AIP Advanced. – 2015. – V. 5. – P. 117143.
- 6 Pillared graphene as excellent reinforcement for polymer-based nanocomposites / K. Duan [et al.] // Materials and Design. – 2018. – V. 147. – P. 11–18.
- 7 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.
- 8 Molecular dynamics study of the tensile behavior of pillared graphene nanostructures / T.-H. Fang [et al] // Japanese Journal of Applied Physics. – 2016. – V. 55. – P. 040301-1 – 040301-4.
- 9 Tensile properties of a boron/nitrogen-doped carbon nanotube-graphene hybrid structure / K. Xia [et al.] //Beilstein Journal of Nanotechnology. – 2014. – V. 5. – P. 329-336.

- 10 Колесникова, А. С. Прогнозирование модуля упругости и коэффициента Пуассона углеродного нанокompозита / А. С. Колесникова, Р. А. Сафонов, М. М. Мазепа // Нано- и биомедицинские технологии. Управление качеством. Проблемы и перспективы. Сборник научных статей. – 2016. – С. 41-47.
- 11 Prediction of 3D elastic moduli and Poisson's ratios of pillared graphene nanostructures / S. Sangwook [et al.] // Carbon. – 2012. – V. 50. – P. 603–611.
- 12 Super-elasticity and deformation mechanism of three-dimensional pillared graphene network structures / Y. Wang [et al.] // Carbon. – 2017. – V. 118. – P. 588-596.
- 13 Graphene-nanotube 3D networks: intriguing thermal and mechanical properties / L. Xu [et al.] // J. Mater. Chem. – 2012. – V. 22. – P. 1435-1444.
- 14 A finite element method to investigate the elastic properties of pillared graphene sheet under different conditions / L. Song [et al.] // Carbon. – 2018. – V. 140. – P. 210-217.
- 15 Колесникова, А.С. Модуль Юнга и коэффициент Пуассона двумерно растянутого колонного графена / А.С. Колесникова, М.М. Мазепа // ФТТ. – 2018. – Т. 60, 9. – С. 1781-1784.
- 16 Thermal transport across carbon nanotube-graphene covalent and van der Waals junctions/ J. Shi [et al.] // Journal of Applied Physics. – 2015. – V. 118. – P. 044302.
- 17 Modeling of Thermal Transport in Pillared-Graphene Architectures / V. Varshney [et al.] // ACS Nano. – 2010. – V. 4,2. – P. 1153–1161.
- 18 Mahdizadeh, S.J. Seawater Desalination Using Pillared Graphene as Novel Nano-Membrane in Reverse Osmosis Process: A Nonequilibrium MD Simulation Study / S.J. Mahdizadeh, E.K. Goharshadi, G. Akhlagi // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2018. – V.20. – P. 22241-22248.
- 19 Multiwalled carbon nanotube membranes for water purification / C. Rizutto [et al.] // Separation and Purification Technology. – 2018. – V. 193 – P. 378-385.
- 20 Hsiao, J.-W. Adsorption of H₂, CO, CO₂, N₂, O₂ and CH₄ on Pillared Graphene / J.-W. Hsiao, C.-C. Huang, T.-H. Fang // J. Nanosci. Nanotechnol. – 2018. – V. 18,1. – P. 39-43.

- 21 Improvement of methane storage in nitrogen, boron and lithium doped pillared graphene: A hybrid molecular simulation / A. Hassani [et al.] // Journal of Natural Gas Science and Engineering. – 2017. – V. 46. –P. 265-274.
- 22 Jiang, H. Simulations on methane uptake in tunable pillared porous graphene hybrid architectures / H. Jiang, X.-L. Cheng // Journal of Molecular Graphics and Modelling. – 2018. – V. 85. – P. 223- 231.
- 23 Highly durable and cycle-stable lithium storage based on MnO nanoparticles-decorated 3D interconnected CNT/graphene architecture // J. Wang [et al.] // Nanoscale. – 2018. – V.10. –P. 13140-13148.
- 24 Dimitrakakis, G. K. Pillared Graphene: A New 3-D Network Nanostructure for Enhanced Hydrogen Storage. / G. K. Dimitrakakis, E. Tylianakis, G. E. Froudakis // Nano letters. – 2008. – V. 8,10. – P. 3166-3170.
- 25 Fabrication and electrochemical characterization of super-capacitor based on three-dimensional composite structure of graphene and a vertical array of carbon nanotubes / D. Choi [et al.] // Journal of Composite Materials. – 2018. – V. 52,22. – P. 3039-3044.
- 26 Improved field emission of few-layer graphene–carbon nanotube composites by high-temperature processing / J.-H. Deng [et al.] // Materials Letters. – 2014. – V. 124. – P. 15–17.
- 27 Highly improved field emission from vertical grapheneecarbon nanotube composites / J.-H. Deng [et al.] // Journal of Alloys and Compounds. – 2017. – V. 723. – P. 75-83.
- 28 A seamless three-dimensional carbon nanotube graphene hybrid material / Y. Zhu [et al.] // Nature Communications. – 2012. – V. 3. – P. 1225.
- 29 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.
- 30 Синтез и теоретическое исследование упругих и электростатических свойств бамбукоподобных углеродных нанотрубок / О.Е. Глухова [и др.] // ФТТ. – 2010.–Т.52,6. – С.1240-1244.