

Исследование механических характеристик многослойных углеродных нанотрубок

02, февраль 2013

DOI: 10.7463/0213.0533309

Белов Ю.С., Вершинин Е.В., Говоров Д.С., Логинов Б.М.,
Пономарев А.В.

УДК. 539.3

Россия, КФ МГТУ им. Н.Э. Баумана

ybs82@mail.ru

yevgeniyv@mail.ru

govorovd12@mail.ru

bloginov@kaluga.ru

panama-aleks@mail.ru

Введение

Углеродные нанотрубки (УНТ) обладают уникальными физическими свойствами. В частности, их жесткость оказывается сравнимой с жесткостью алмаза, а их прочность и гибкость на порядки превышает показатели лучших сортов стали [1-3]. Отмеченные характеристики позволяют рассматривать углеродные нанотрубки в качестве перспективной основы для разработки новых высокопрочных полимерных композиционных материалов (ПКМ) [4-7]. Исследованию микроструктуры и механических свойств ПКМ в настоящее время уделяется большое внимание, как в нашей стране, так и за рубежом [6-12].

Получение УНТ основано на нескольких методах. При использовании наиболее дешевых методов, таких как разрядно-дуговой или метод химического осаждения из пара, образующиеся нанотрубки имеют преимущественно многослойную структуру. В научной литературе механические свойства многослойных УНТ практически не исследованы. Имея целью восполнить данный пробел, в настоящей работе проведен

анализ влияния различных параметров многослойных нанотрубок на их механические свойства.

1. Постановка задачи и метод ее решения

В подавляющем большинстве случаев [13-18] теоретический анализ механических свойств УНТ проводится методами молекулярной динамики на основе потенциала взаимодействия Бреннера-Терсоффа [19, 20]. Данный потенциал наиболее точно воспроизводит особенности взаимодействия атомов углерода на расстояниях, не превышающих $2 \cdot 10^{-10}$ м. Однако учет особенностей взаимодействия атомов на расстояниях, превышающих $2 \cdot 10^{-10}$ м, может иметь существенное значение при изучении механических свойств многослойных УНТ. Известно, что в процессе осевого сжатия однослойных УНТ могут развиваться бифуркационные процессы. Как правило, бифуркационные процессы описываются на основе классической теории оболочек [21-29]. При этом игнорируются характерные особенности, обусловленные дискретным строением углеродной нанотрубки. В работах [24-29] проводился анализ бифуркационных процессов УНТ на основе различных методов. Следует отметить, что в данных исследованиях рассмотренные УНТ были однослойными и характеризовались различными геометрическими параметрами, в том числе и хиральностью. В связи с этим, разброс полученных результатов в работах [24-29] не позволяет установить характерные закономерности в зависимостях критических параметров процессов бифуркации от длины, диаметра и хиральности даже для однослойных УНТ. Подобные результаты, тем более, не могут быть адекватно аппроксимированы на многослойные УНТ.

С учетом отмеченных обстоятельств целью настоящей работы являлось исследование процессов бифуркации многослойных УНТ и установление зависимостей основных характеристик данных процессов от геометрических параметров и хиральности многослойных УНТ.

Анализ равновесных конфигураций нанотрубок проводился на основе комбинационного потенциала [30], задаваемого соотношением:

$$E_{ij}(r_{ij}) = \zeta(r_{ij})E_{ij}^{BT} + \xi(r_{ij})E_{ij}^{MM}(r_{ij}),$$

где E_{ij}^{BT} – потенциал Бреннера-Терсоффа, $E_{ij}^{MM}(r_{ij})$ – модифицированный потенциал Морзе:

$$E_{ij}^{MM}(r_{ij}) = E_{np} + E_{yz},$$

где

$$E_{np} = D_{ij}^{(e)} \{ [1 - e^{-\beta_{ij}(r - R_{ij}^{(e)})}]^2 - 1 \}, \quad E_{yz} = \frac{1}{2} k_{\theta} (\theta_{ijk} - \theta_{ijk}^{(e)})^2 [1 + k_s (\theta_{ijk} - \theta_{ijk}^{(e)})^4].$$

В приведенных выражениях ступенчатые функции $\zeta(r_{ij})$ и $\xi(r_{ij})$ обеспечивают доминантные роли потенциалу Бреннера-Терсоффа при $r_{ij} < 1,7 \cdot 10^{-10}$ м, модифицированному потенциалу Морзе при $2 \cdot 10^{-10} \text{ м} < r_{ij} < 1 \cdot 10^{-9} \text{ м}$ и достаточную гладкость перехода потенциала Бреннера-Терсоффа в модифицированный потенциал Морзе в интервале значений от $1,7 \cdot 10^{-10}$ м до $2 \cdot 10^{-10}$ м (рисунок 1). Численные значения параметров выбирались равными: $R_{ij}^{(e)} = 1,315 \cdot 10^{-10}$ м, $D_{ij}^{(e)} = 9,325 \cdot 10^{-19}$ Н·м, $\delta_{ij} = 0,80469$, $S_{ij} = 1,29$, $\beta_{ij} = 1,5 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-1}$, $R_{ij}^{(1)} = 1,7 \cdot 10^{-10}$ м, $R_{ij}^{(2)} = 2,0 \cdot 10^{-10}$ м, $\theta_{ijk}^{(e)} = 2,094$ рад, $k_{\theta} = 0,9 \cdot 10^{-18}$ Н·м/рад², $k_s = 0,754$ рад⁻⁴, $a_0 = 0,011304$, $c_0 = 19$, $d_0 = 2,5$.

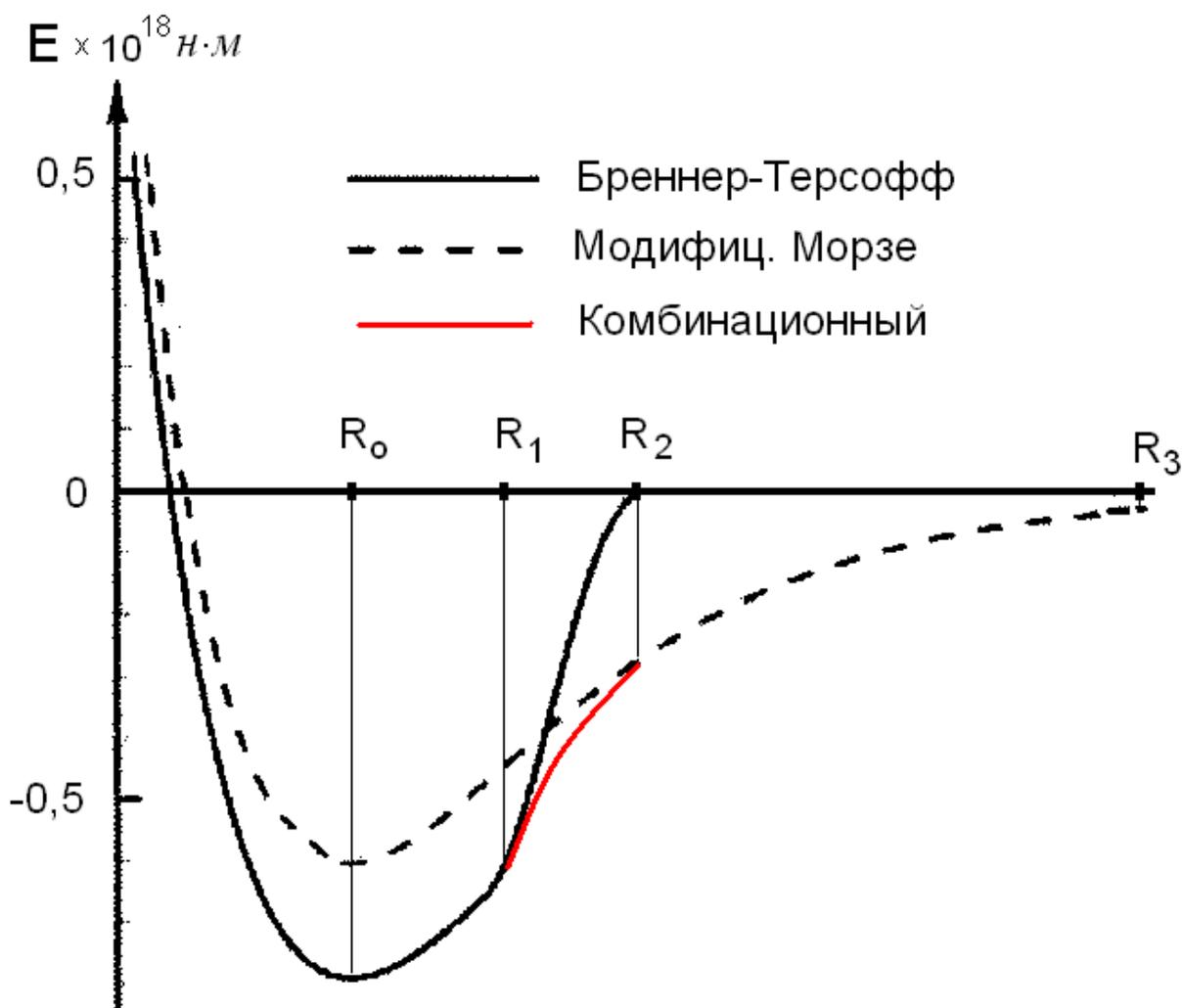


Рисунок 1 – Комбинационный потенциал взаимодействия

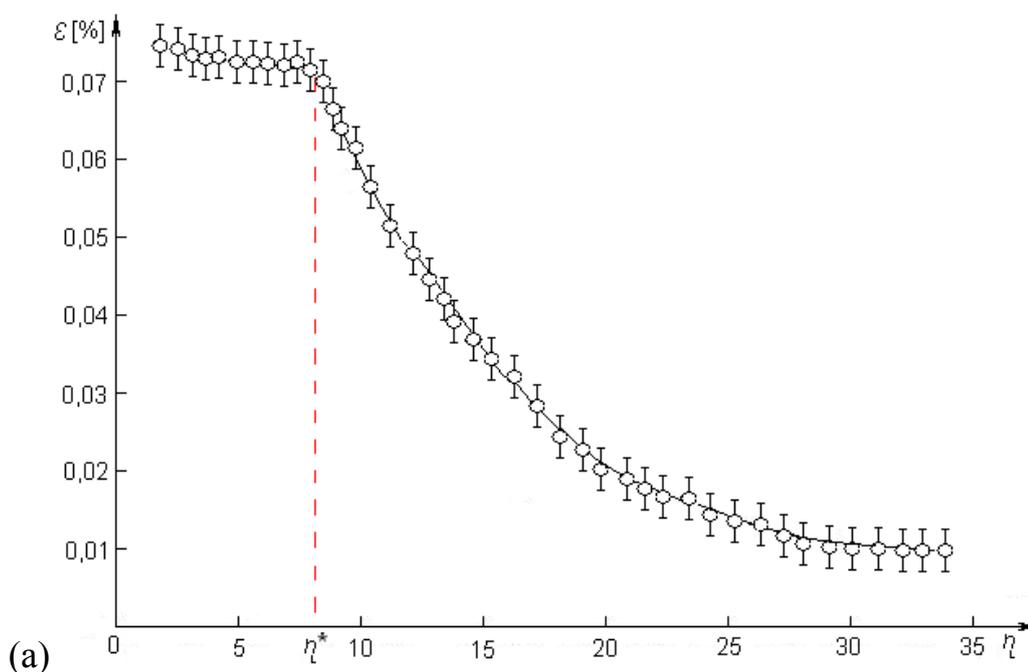
Исследование влияния структурных нарушений УНТ на ее упругие характеристики проводилось на основании методики разработанной в [31]. Данная методика, в соответствии с нотацией послойного прохождения атомов углерода и разработанного критерия определения области учета влияния ближайших соседей, позволяет записать систему уравнений баланса сил для атомов углерода в каноническом виде. Следует отметить, что получаемые дифференциально-матричные операторные уравнения приводятся к ленточному типу. Ширина ленты ζ зависит от степени рассматриваемого приближения и равняется числу атомов УНТ, заключенных в соответствующем круге приближения [31]. Подобное

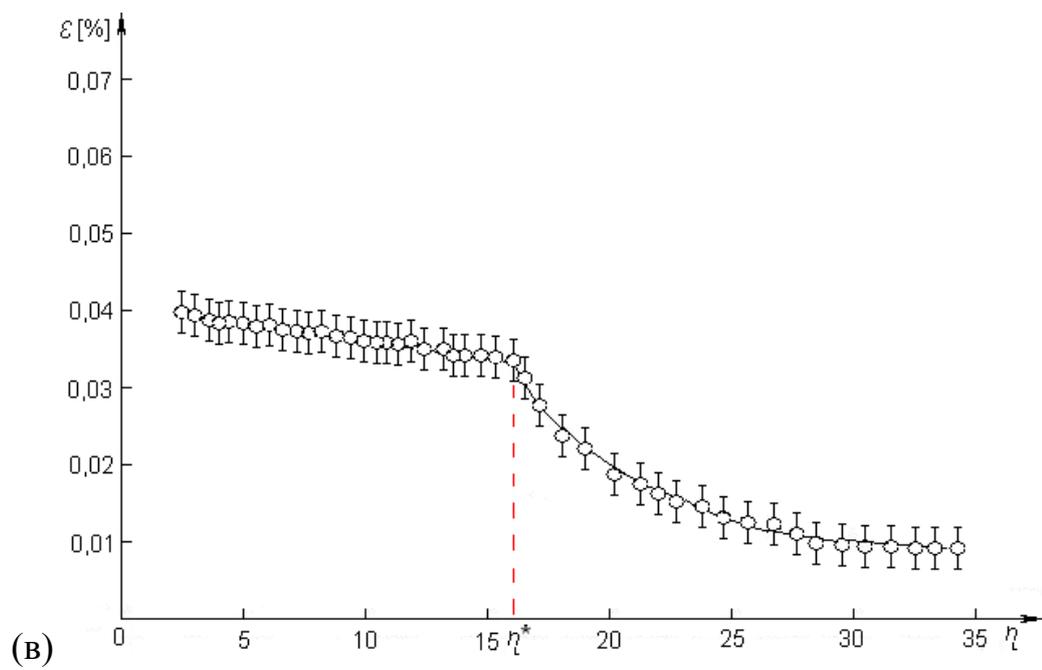
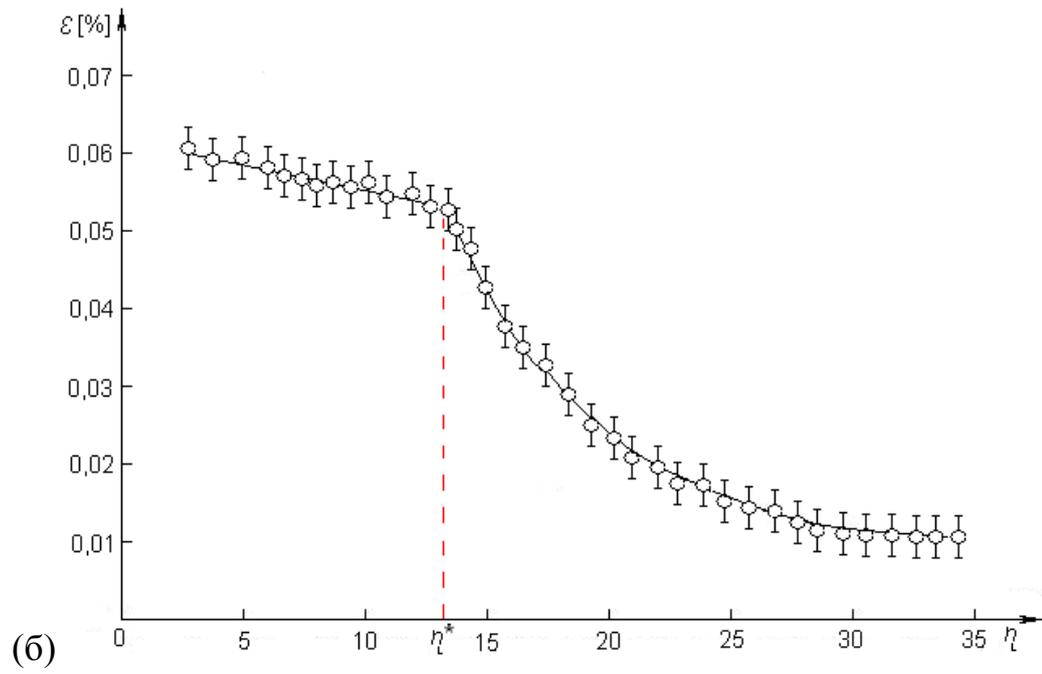
преобразование системы уравнений баланса сил существенно снижает вычислительную сложность задачи.

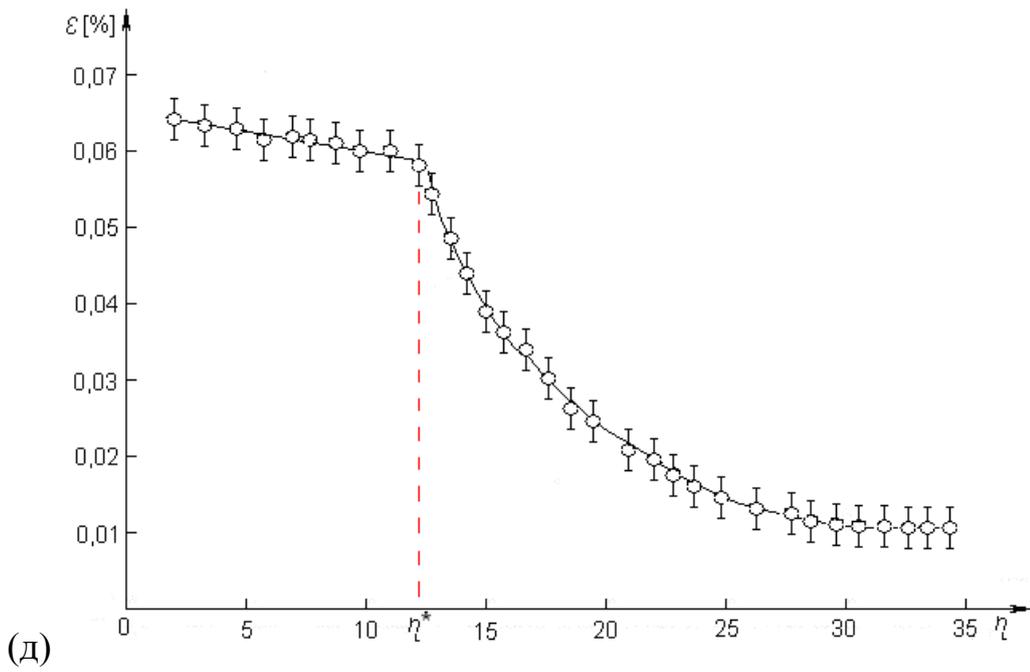
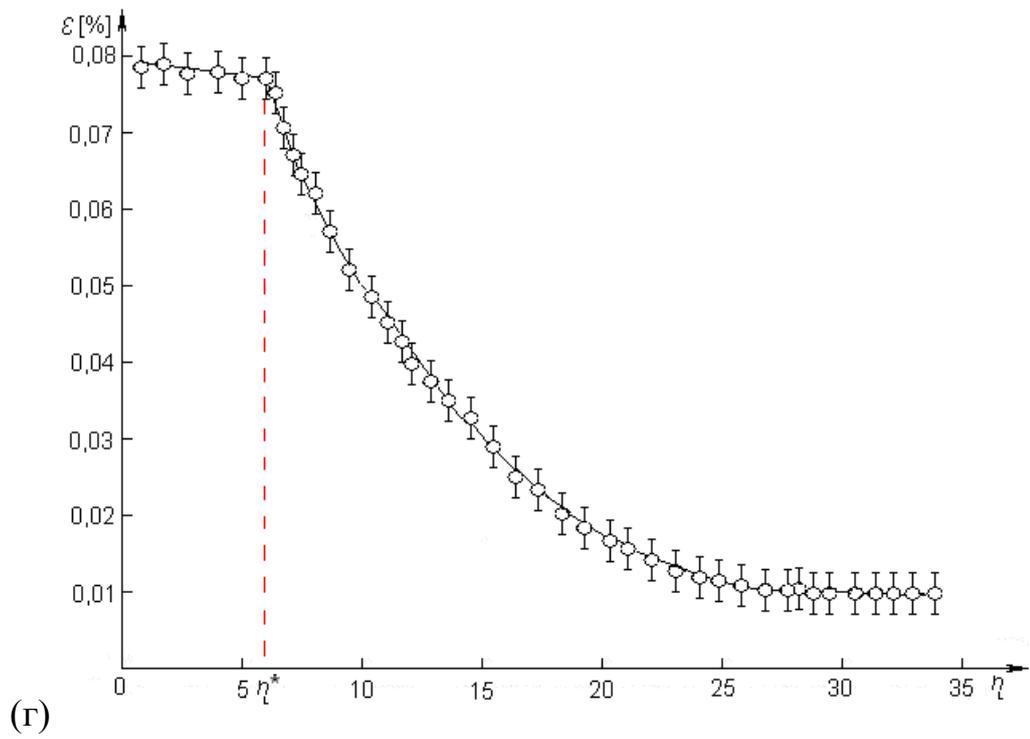
2. Результаты исследования и их обсуждение

Для проведения исследования и сравнительного анализа процессов бифуркации однослойной УНТ с различными геометрическими характеристиками введем безразмерный параметр η , определив его как отношение длины нанотрубки к ее радиусу.

На рисунке 2 для различных типов однослойных УНТ представлены зависимости от параметра η величин критической деформации ε , при которой реализуется бифуркационный процесс. Можно видеть, что во всех случаях, независимо от хиральности, характер данных зависимостей обнаруживает две области значений η , в пределах которых зависимость ε от η качественно отличается.







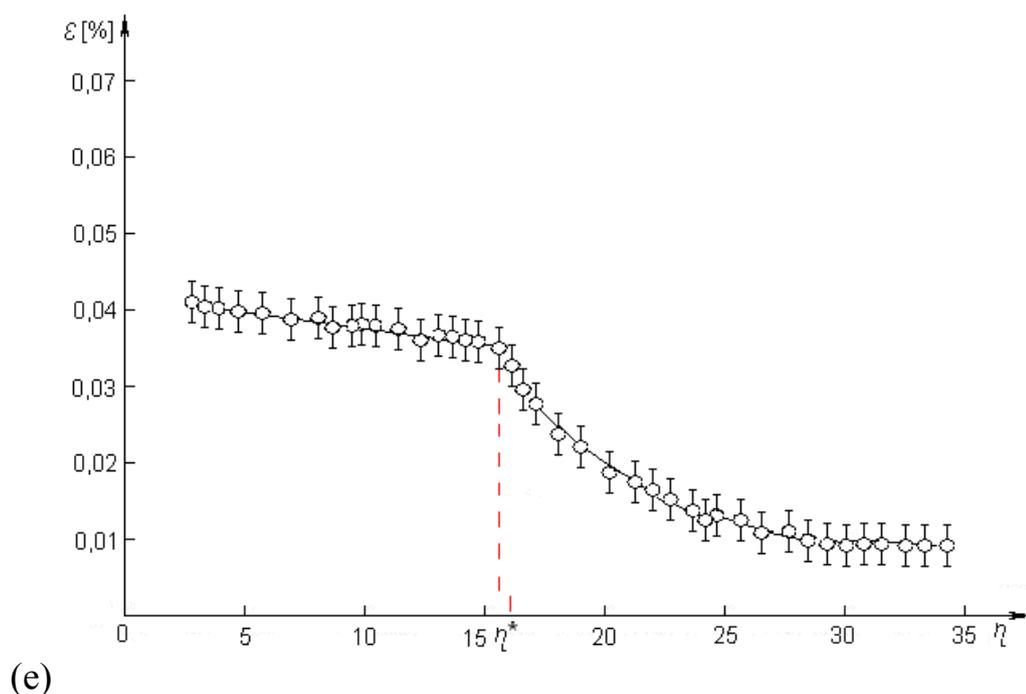


Рисунок 2 – Зависимость от η относительной величины критической деформации для однослойных УНТ с различными значениями хиральности: (5,5) (а); (10,10) (б); (15,15) (в); (7,0) (г); (16,0) (д); (25,0) (е)

В первой области значений зависимость критической деформации ε от η во всех случаях практически линейна. Во второй – характер изменения ε от η имеет экспоненциальный характер. Не зависимо от хиральности, критическое значение параметра η^* , который служит разделом между полученными закономерностями, увеличивается по мере увеличения диаметра нанотрубки. Детальный анализ структурных изменений однослойной нанотрубки позволил установить следующие характерные особенности. Во всех случаях для критических значений деформации в первой области значений η ($\eta < \eta^*$), бифуркационный переход сопровождается сплющиванием однослойной нанотрубки вдоль ее оси симметрии. Для второй области значений $\eta > \eta^*$ нанотрубка прогибается как стержень. Подобное поведение углеродной нанотрубки является результатом бифуркационного перехода.

Полученные результаты показывают независимость наблюдаемых

закономерностей от хиральности нанотрубки и явную зависимость наблюдаемых структурных изменений от параметра η . Менее очевидно влияние диаметра однослойной нанотрубки на специфику поведения рассматриваемых процессов. Для выяснения данных особенностей было проведено дополнительное исследование, для которого были выбраны различные однослойные нанотрубки, характеризуемые различной хиральностью и разными значениями диаметра, но одинаковым значением параметра $\eta=6,2$. Полученные результаты, которые отражают зависимость значения критической деформации от диаметра УНТ, представлены на рисунке 3. Можно видеть, что независимо от хиральности, по мере роста диаметра нанотрубки значения критической деформации ε убывают.

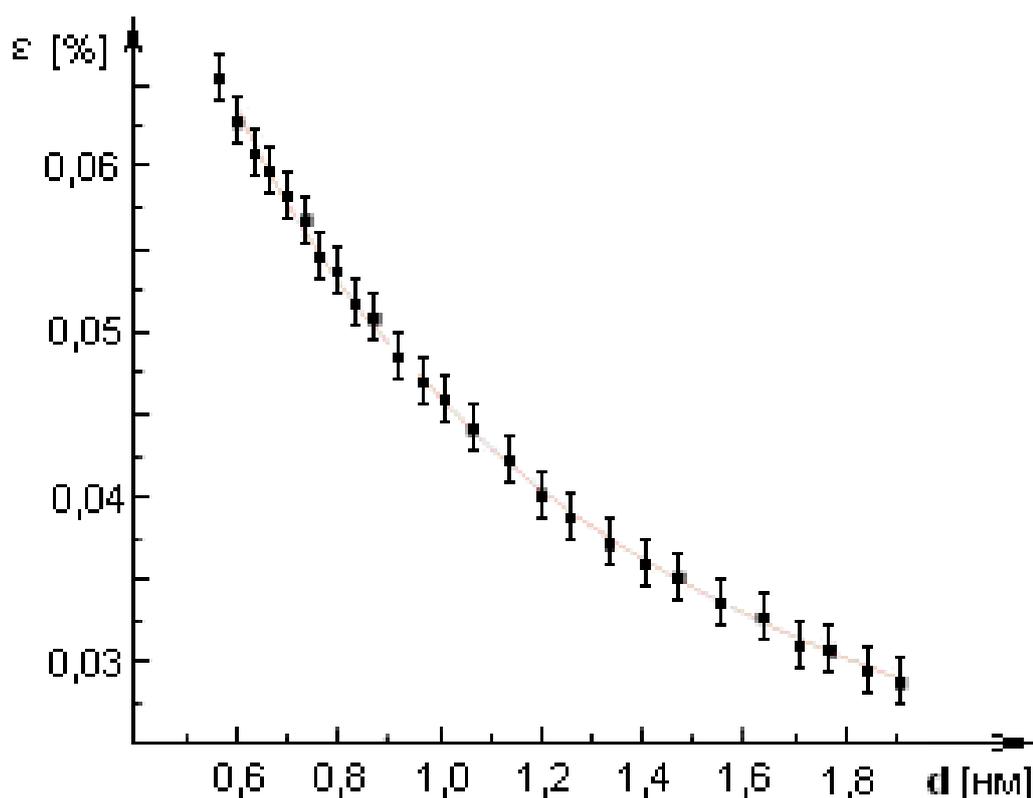
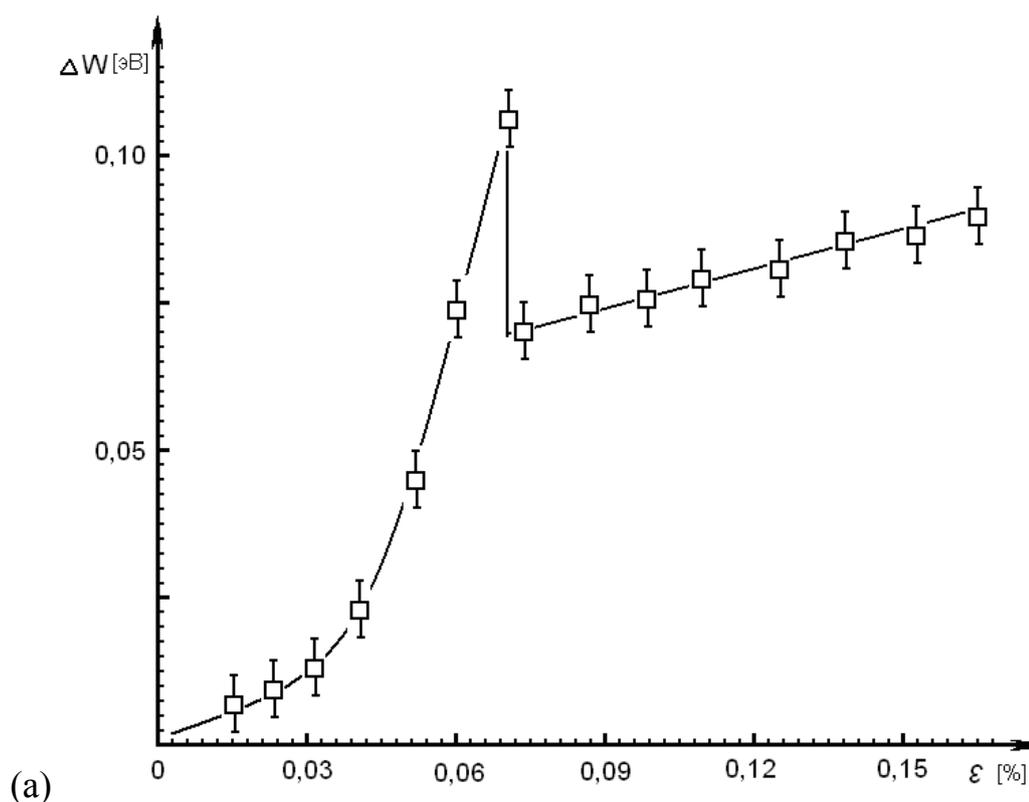
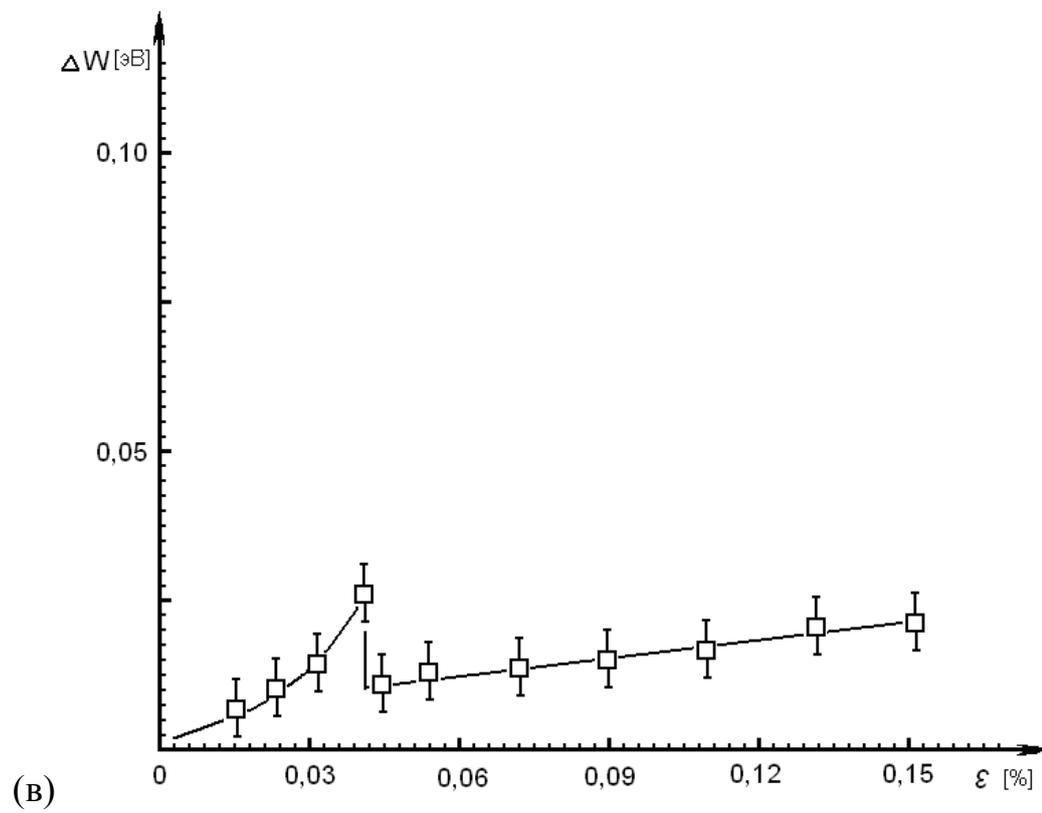
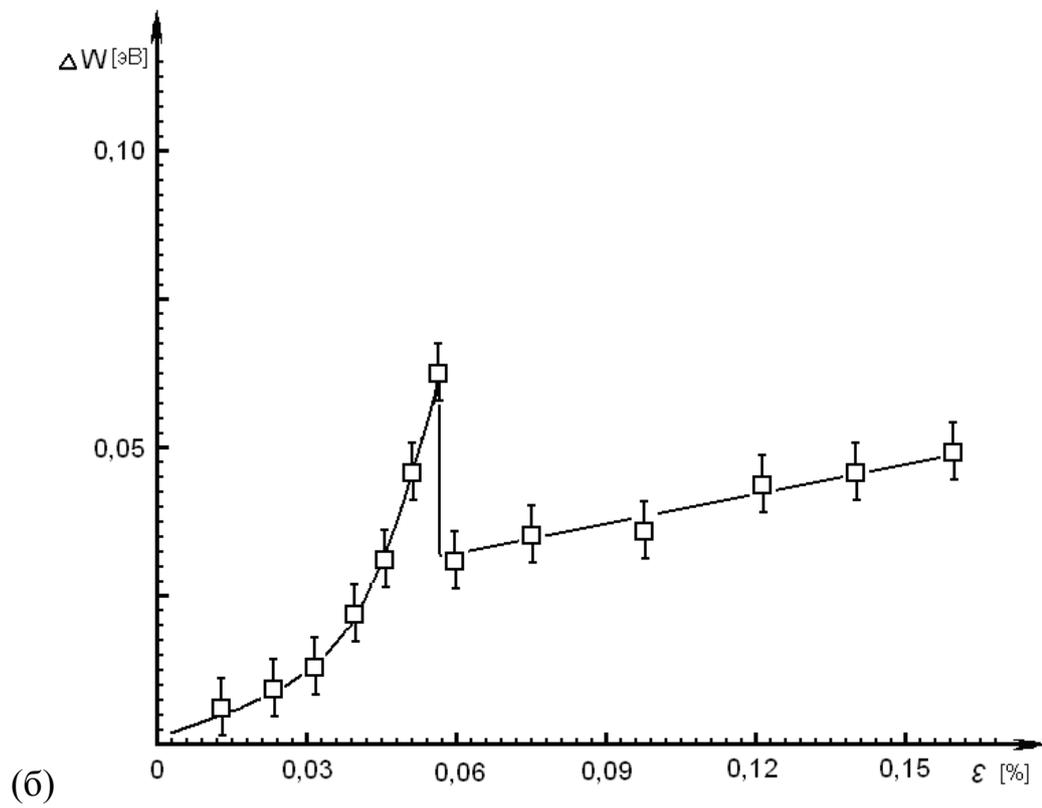
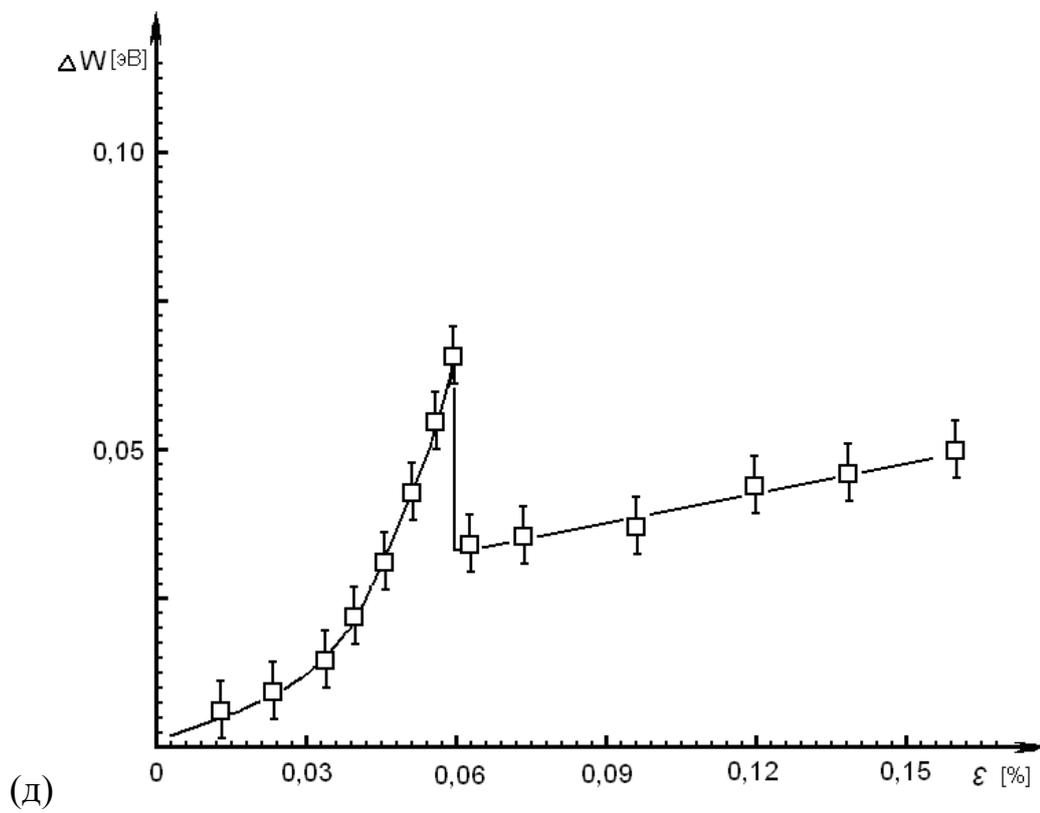
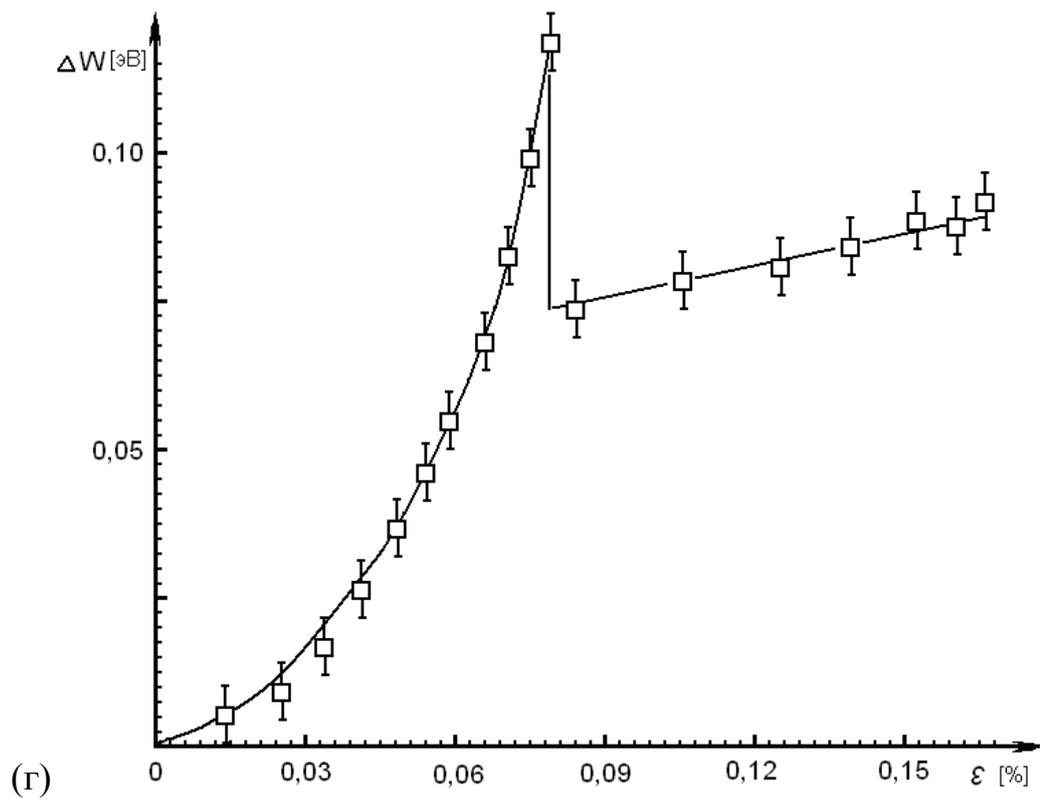


Рисунок 3 – Зависимость относительной величины критической деформации от диаметра однослойной нанотрубки

Самостоятельный интерес представляет анализ изменения энергетического состояния однослойной УНТ в процессе бифуркационных изменений. На рисунке 4 для однослойных УНТ с различными геометрическими параметрами и хиральностью, представлены зависимости величин избыточной энергии деформации, приходящейся на один атом УНТ – величины ΔW от механической деформации ε . В данном исследовании величина ΔW вычисляется как разность упругой энергии деформированной и исходной нанотрубки. Полученные результаты позволили установить, что в процессе бифуркации происходит скачкообразное изменение величины ΔW . Исследование показало, что независимо от хиральности, по мере увеличения диаметра нанотрубки величина механической деформации, при которой происходит скачек амплитуды величины ΔW уменьшается, а численное значение амплитуды скачка также снижается.







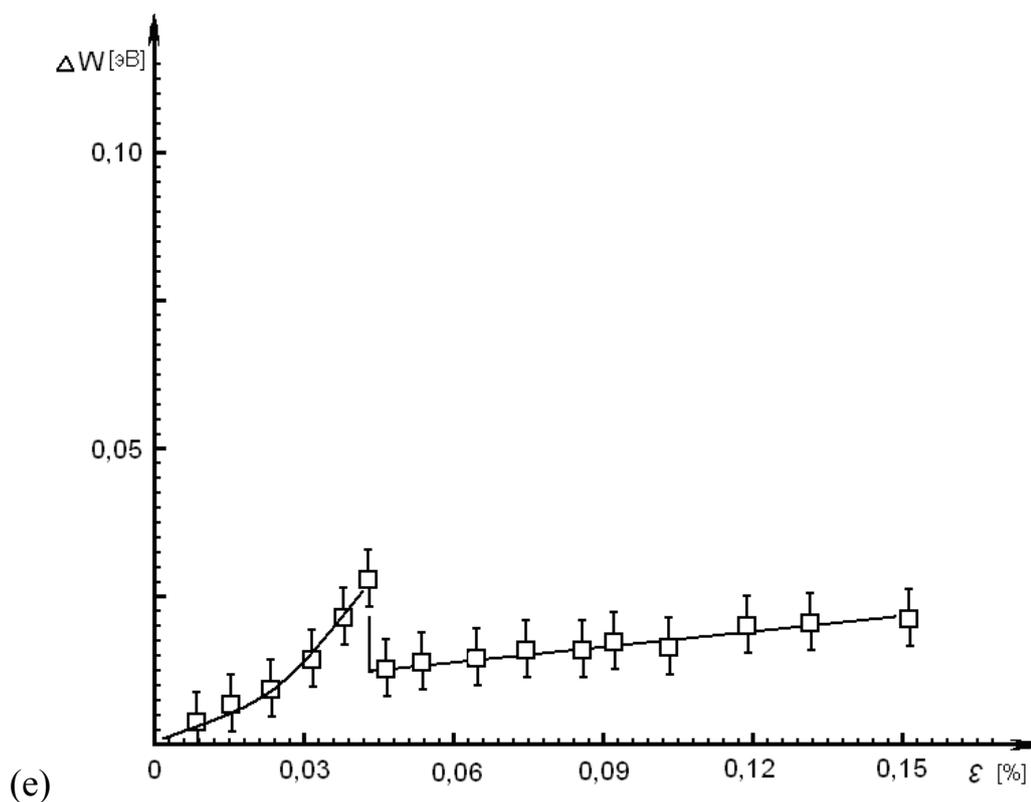


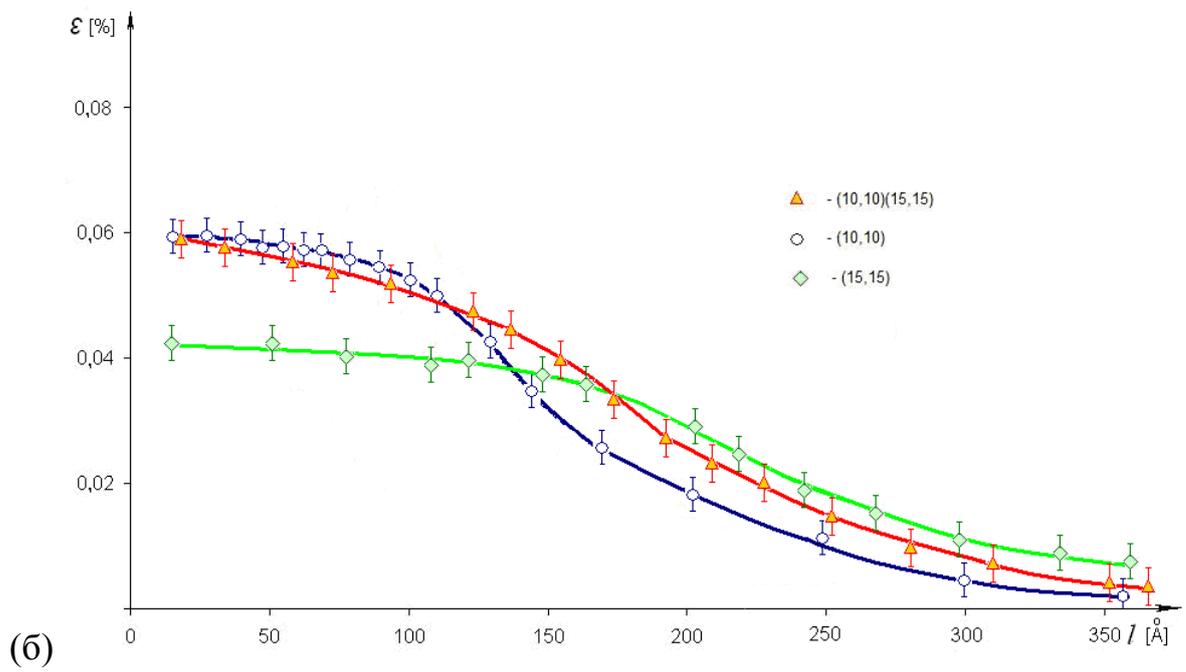
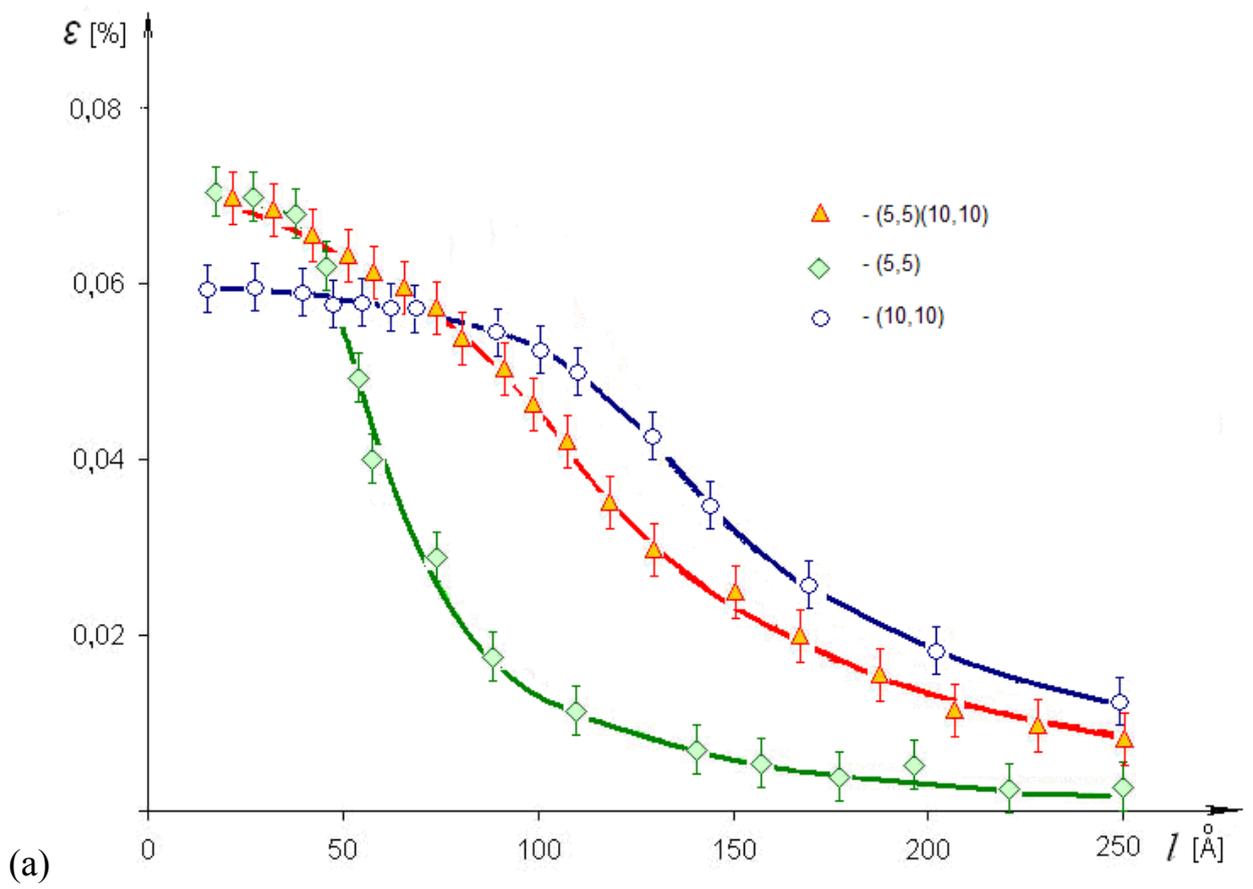
Рисунок 4 – Зависимость от деформации ε величины избыточной энергии деформации ΔW для однослойных УНТ с различными значениями хиральности: (5,5) (а); (10,10) (б); (15,15) (в); (7,0) (г); (16,0) (д); (25,0) (е)

Комплексный анализ результатов исследования позволил выявить и обосновать следующие закономерности в поведении однослойной УНТ при осевой деформации. В процессе сжатия однослойной УНТ бифуркационные процессы могут развиваться по двум сценариям. В одном случае нанотрубка изгибается как стержень, выходя за пределы своей оси симметрии, в другом случае, нанотрубка, сохраняя свою ось симметрии, формирует выпуклости и вогнутости на поверхности. Развитие сценария бифуркационных процессов для однослойной нанотрубки определяется ее геометрическими параметрами: диаметром и отношением длины к диаметру. Для однослойных углеродных нанотрубок не наблюдается явной зависимости бифуркационных процессов от хиральности.

Для многослойных нанотрубок параметр η не имеет однозначной

интерпретации, поэтому для многослойных нанотрубок анализ влияния геометрических параметров на особенности бифуркационных процессов проводился в абсолютных значениях длины нанотрубки.

На рисунке 5 для различных двухслойных УНТ представлены зависимости величин критической деформации ε от длины нанотрубок. На данном рисунке для сравнения приведены зависимости критической деформации для соответствующих однослойных УНТ, из которых состоят двухслойные УНТ. Детальный анализ структурных изменений, происходящих в двухслойных УНТ в процессе сжатия, позволил установить ряд закономерностей. Соотношение диаметров нанотрубок, составляющих двухслойную УНТ, определяют три зоны длин двухслойных нанотрубок, в пределах которых структурные бифуркационные изменения при достижении критической деформации имеют следующие характерные особенности. В области больших значений длин запуск прогиба двухслойной нанотрубки реализуется за счет прогиба внутренней нанотрубки, которая начинает прогибаться первой. В этом случае, как было установлено ранее, бифуркация каждой из нанотрубок протекает по типу стержневого прогиба. Важной особенностью при этом является значение уровня критической деформации двухслойной УНТ, который оказывается выше соответствующего значения для внутренней однослойной УНТ и ниже соответствующего значения для внешней однослойной УНТ. Данная зона длины двухслойной УНТ характеризуется тем, что внутренняя однослойная УНТ стимулирует прогиб внешней, в то время как внешняя нанотрубка тормозит прогиб внутренней.



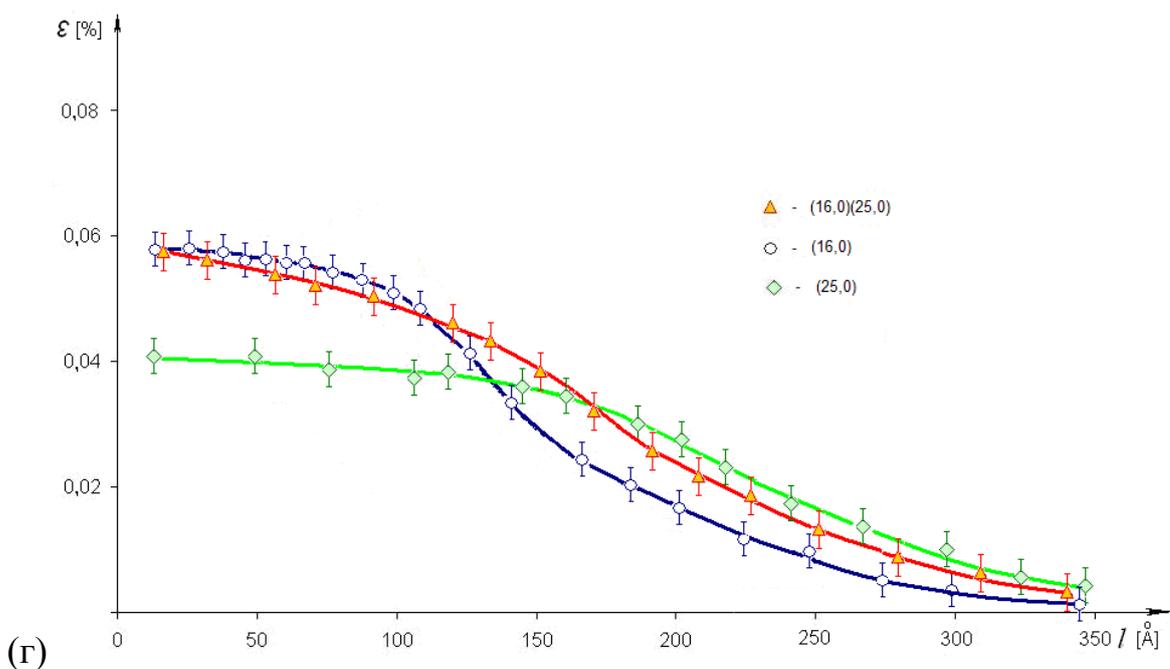
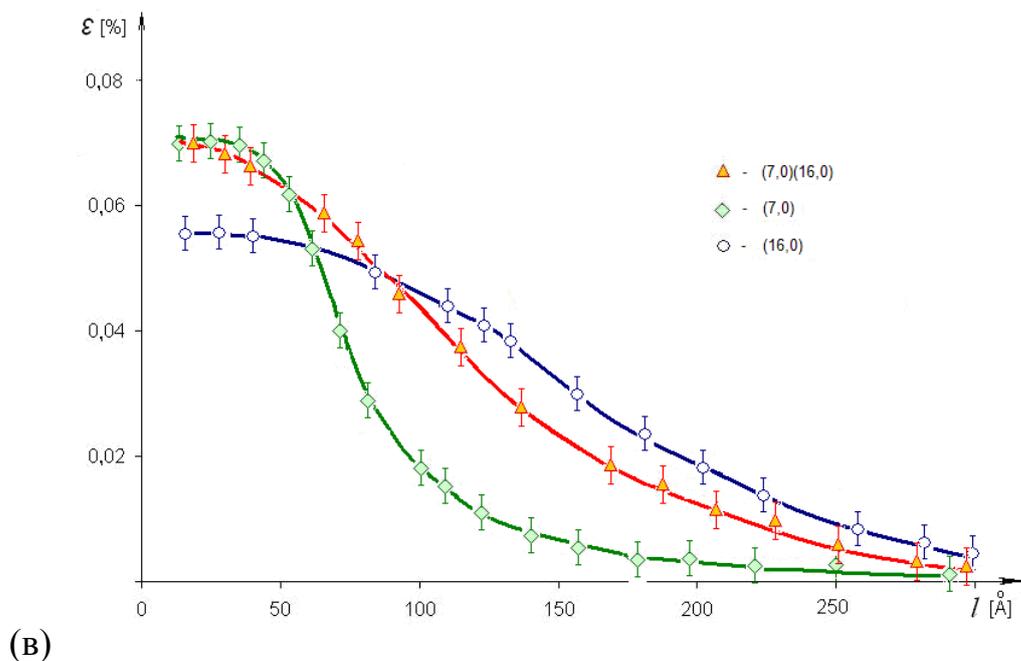


Рисунок 5 – Зависимость критической деформации от длины двухслойных УНТ с различными значениями хиральности: (5,5)(10,10) (а); (10,10)(15,15) (б); (7,0)(16,0) (в); (16,0)(25,0) (г)

Область малых значений длины двухслойной УНТ, характеризуется другими закономерностями. В данном случае бифуркационный процесс запускается внешней нанотрубкой, так как при достижении критической

деформации она первой начинает деформироваться по типу выпуклостей и вогнутостей с сохранением своей первоначальной оси симметрии. Теперь уровень критической деформации двухслойной нанотрубки оказывается выше уровня критической деформации внешней нанотрубки и ниже уровня критической деформации внутренней нанотрубки. В данной области длин двухслойной УНТ запуск бифуркационного процесса осуществляется внешней нанотрубкой.

В центральной области значений длин двухслойной УНТ итоговая бифуркация реализуется по типу образования вогнутостей. Это связано с тем, что в данной области бифуркация однослойной внешней УНТ развивается за счет образования вогнутостей, с сохранением центральной оси первоначальной симметрии, в то время как независимая бифуркация однослойной внутренней УНТ все еще развивается по типу стержневого прогиба. При этом, в зависимости от длины нанотрубки, запуск бифуркационного процесса двухслойной нанотрубки может осуществляться, как за счет внешней нанотрубки, так и за счет внутренней нанотрубки. Данный процесс предопределяется соотношением диаметров однослойных нанотрубок и значением длины двухслойной нанотрубки. Полученные результаты позволили установить, что для двухслойных нанотрубок описанные закономерности бифуркационных процессов оказываются независимыми от хиральности нанотрубок.

Для выяснения влияния роли диаметра двухслойных УНТ было проведено дополнительное исследование. Для анализа были выбраны двухслойные нанотрубки, характеризующиеся различной хиральностью и диаметром. Следует отметить, что во всех случаях отношение длины двухслойной нанотрубки к диаметру внешней однослойной нанотрубки выбиралось одинаковым и составляло значение близкое к пяти. Полученные результаты исследования в виде зависимости значения критической деформации ε от диаметра внешней УНТ представлены на рисунке 6. Можно видеть, что независимо от хиральности, по мере роста диаметра нанотрубки,

значения критической деформации убывают по закону близкому к гиперболическому.

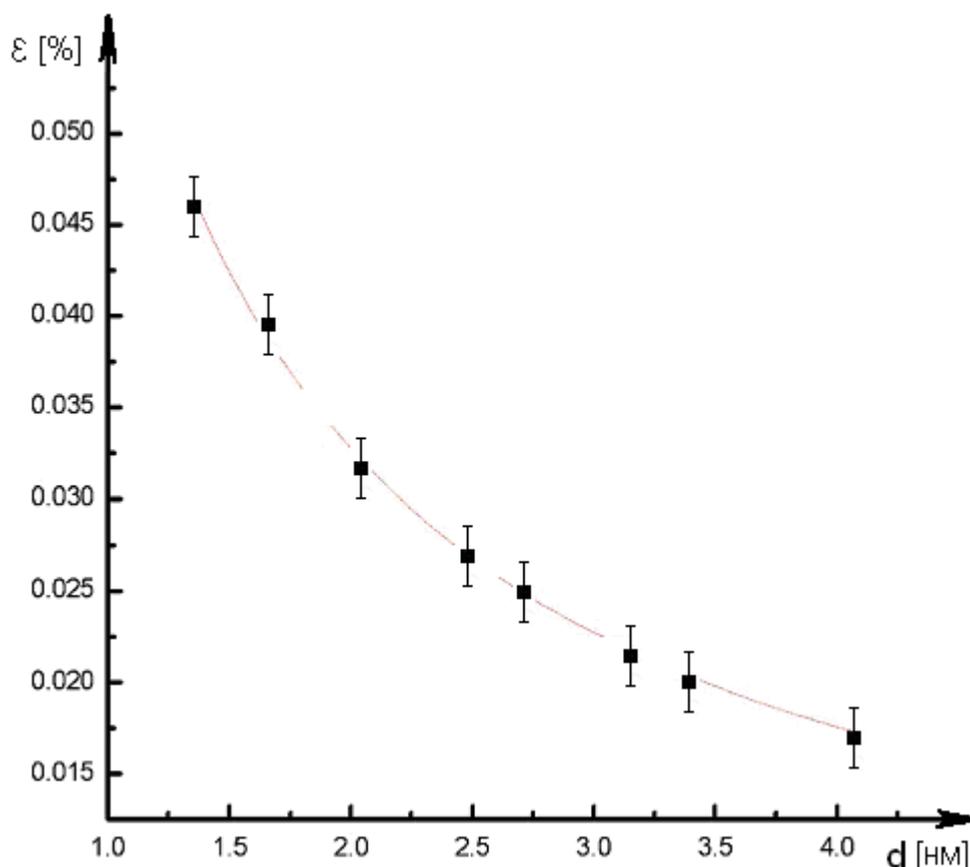
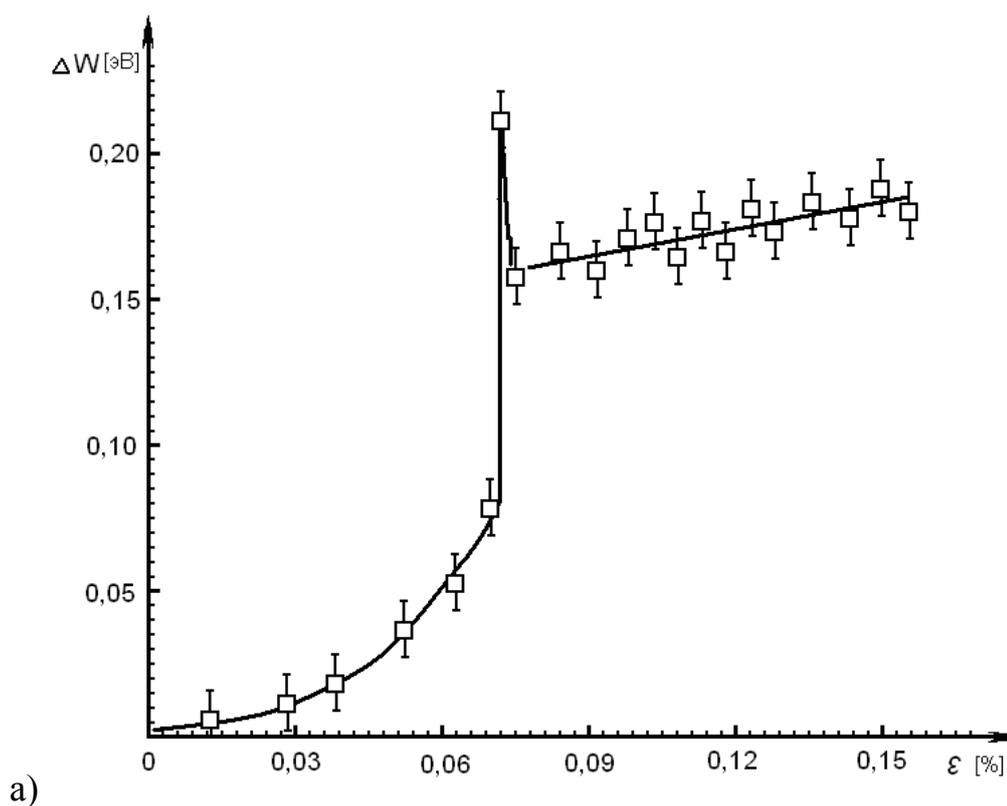
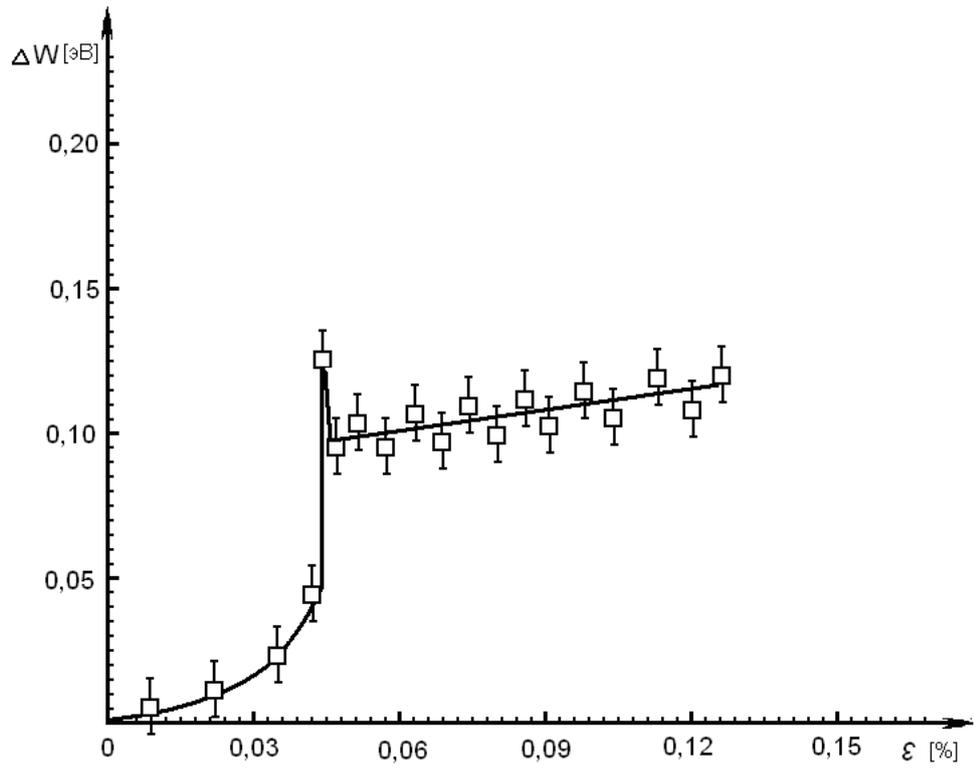


Рисунок 6 – Зависимость критической деформации ε от внешнего диаметра двухслойной нанотрубки

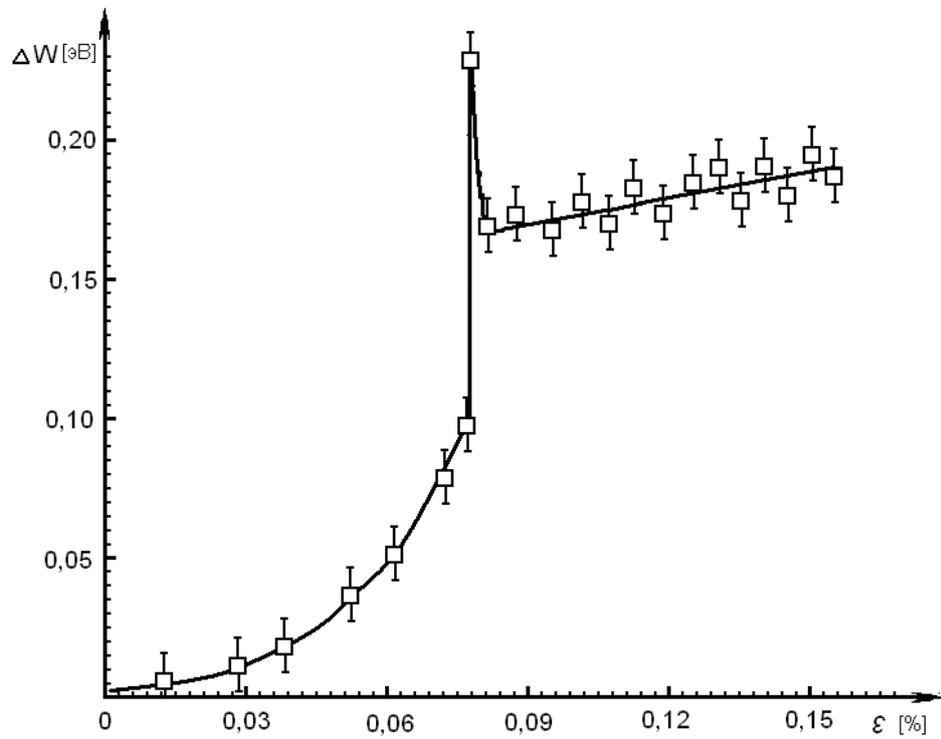
Самостоятельный интерес представляет анализ изменения энергетического состояния двухслойной УНТ в процессе бифуркационных изменений. Данные зависимости для различных двухслойных нанотрубок представлены на рисунке 7. Полученные результаты позволили установить следующие характерные особенности в изменении энергетического состояния двухслойных УНТ. Начало бифуркационного деформирования сопровождается скачкообразным изменением величины ΔW . Причем, если для однослойных нанотрубок данный скачек приводил к снижению величины избыточной энергии деформации, то в данном случае скачек

избыточной энергии соответствует сначала существенному увеличению избыточной энергии, которое впоследствии сопровождается относительно небольшим спадом. Из особенностей также следует отметить, что энергетический скачок осуществляется в более узком диапазоне значений деформации по сравнению с однослойными УНТ.





b)



B)

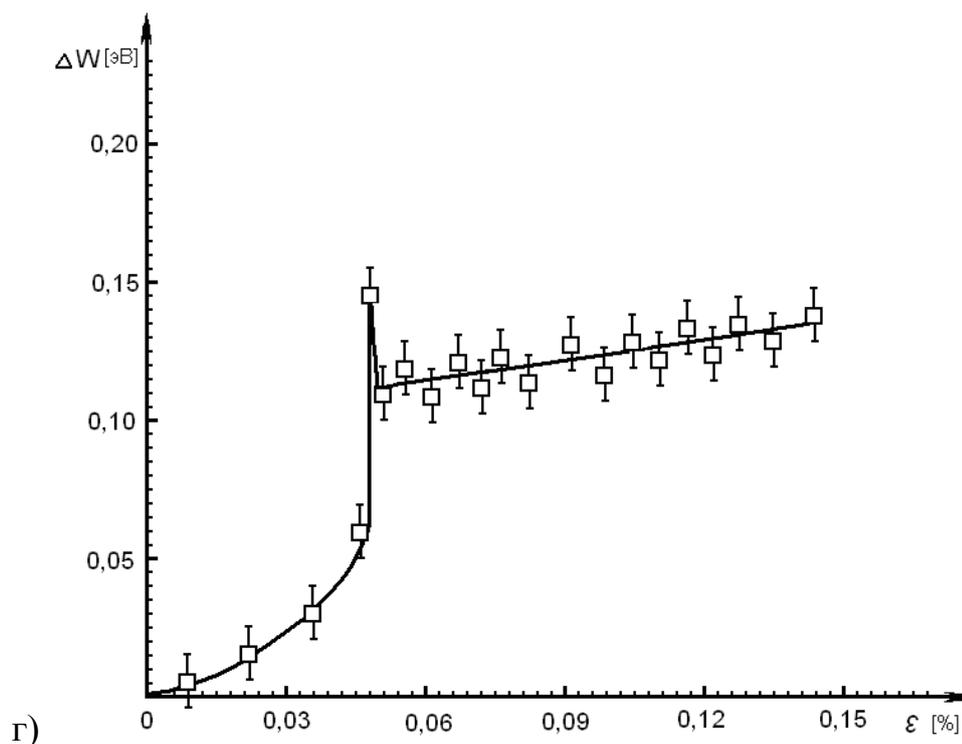
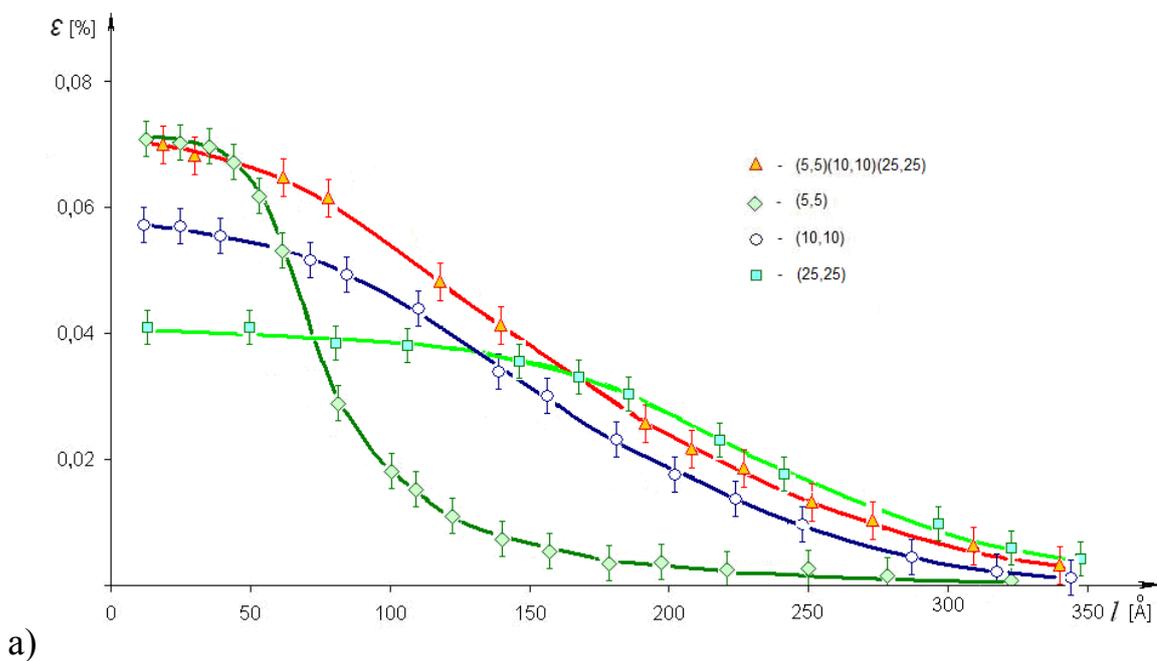


Рисунок 7 – Зависимости механической деформации ε от величин избыточной энергии деформации в расчете на один атом двухслойных нанотрубок с различными значениями хиральности: (5,5)(10,10) (а); (10,10)(15,15) (б); (7,0)(16,0) (в); (16,0)(25,0) (г)

Дополнительный анализ структурных изменений в двухслойной УНТ позволил установить следующие закономерности. В процессе деформации момент достижения критического значения деформации характеризуется началом бифуркационных изменений внешней нанотрубки. Об этом свидетельствует резкое увеличение избыточной энергии. В этом момент на поверхности внешней нанотрубки начинают образовываться выпуклости и вогнутости, однако развитию вогнутостей внешней нанотрубки препятствует внутренняя нанотрубка. В результате такого противоборства на поверхности внутренней нанотрубки также начинают образовываться выпуклости и вогнутости. В свою очередь, это приводит к резкому возрастанию потенциальной энергии атомов, как внешней, так и внутренней нанотрубок. Развитие данного процесса противоборства и взаимного содействия в

формировании неровностей на обеих нанотрубках в определенный момент времени достигает критического насыщения. В результате этого реализуется структурная перестройка атомов, как внешней, так и внутренней нанотрубок. На графиках рисунка 7 это обозначено небольшим спадом значений избыточной энергии. При этом последующее увеличение деформации двухслойной нанотрубки уже не вызывает существенных скачков в значениях избыточной энергии.

Результаты анализа аналогичных бифуркационных процессов для трехслойных УНТ представлены соответственно на рисунках 8 и 9. На рисунке 8 показаны зависимости величины критической деформации от длин различных трехслойных УНТ. На рисунке 9 отображены зависимости избыточной энергии от уровня внешней деформации. Можно видеть, что основные закономерности, установленные для двухслойных нанотрубок, наблюдаются и в случае трехслойных нанотрубок.



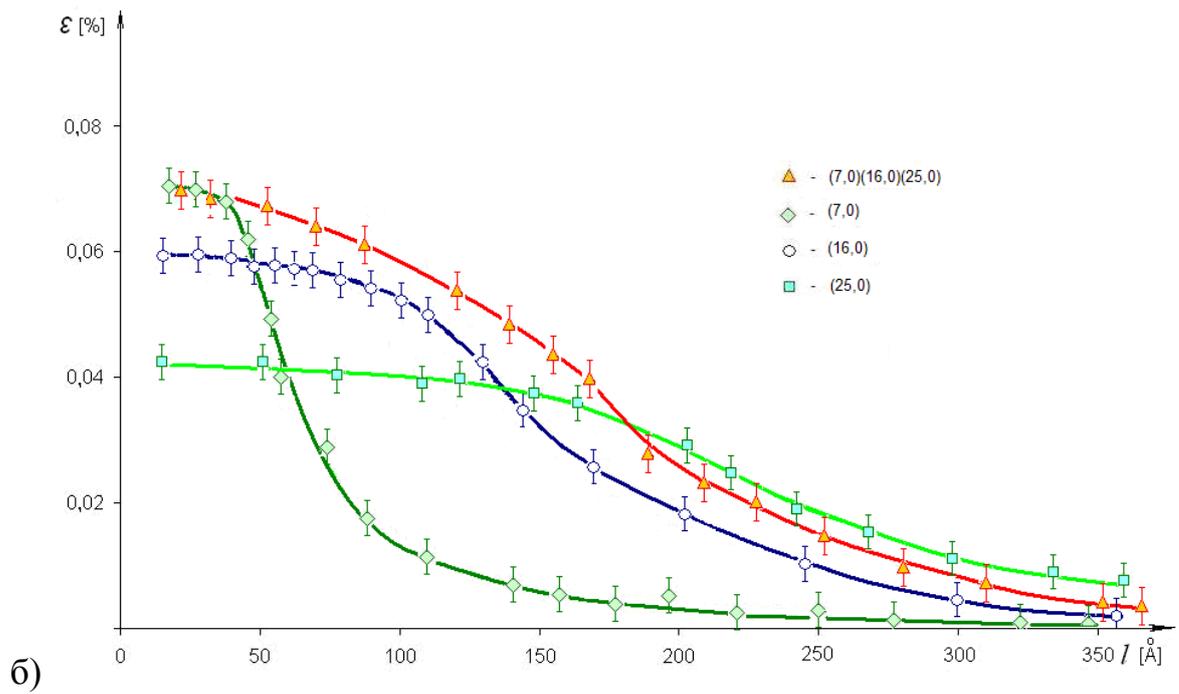
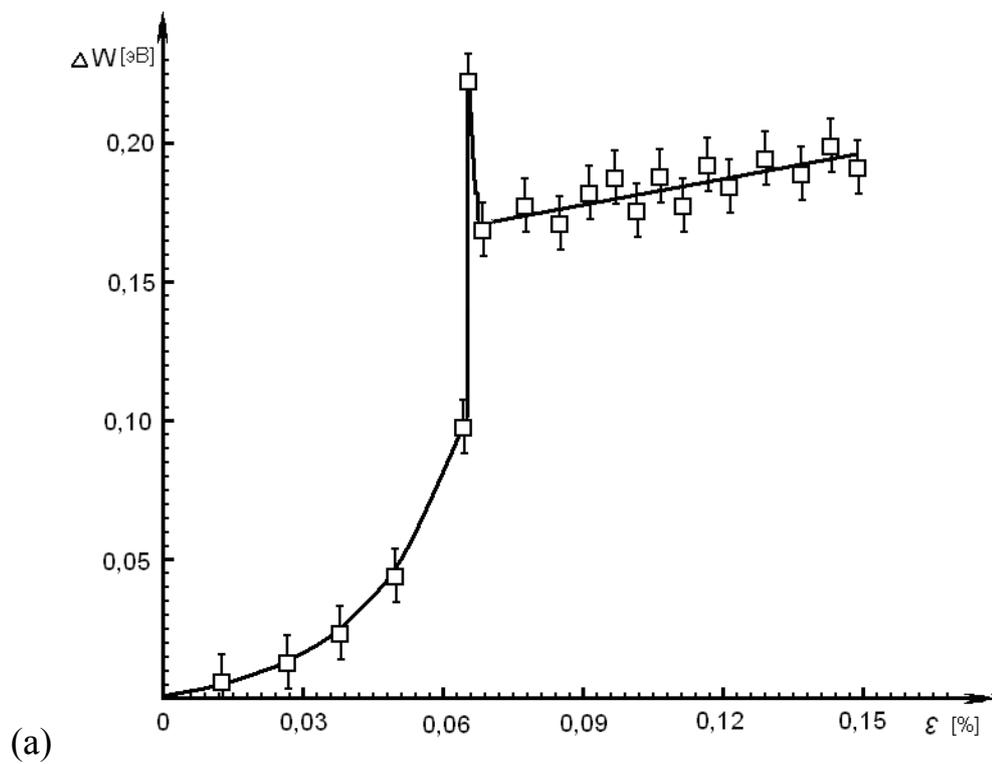


Рисунок 8 – Зависимость от длины величины критической деформации для трехслойных УНТ с различными значениями хиральности: (5,5)(10,10)(15,15) (а); (7,0)(16,0)(25,0) (б)



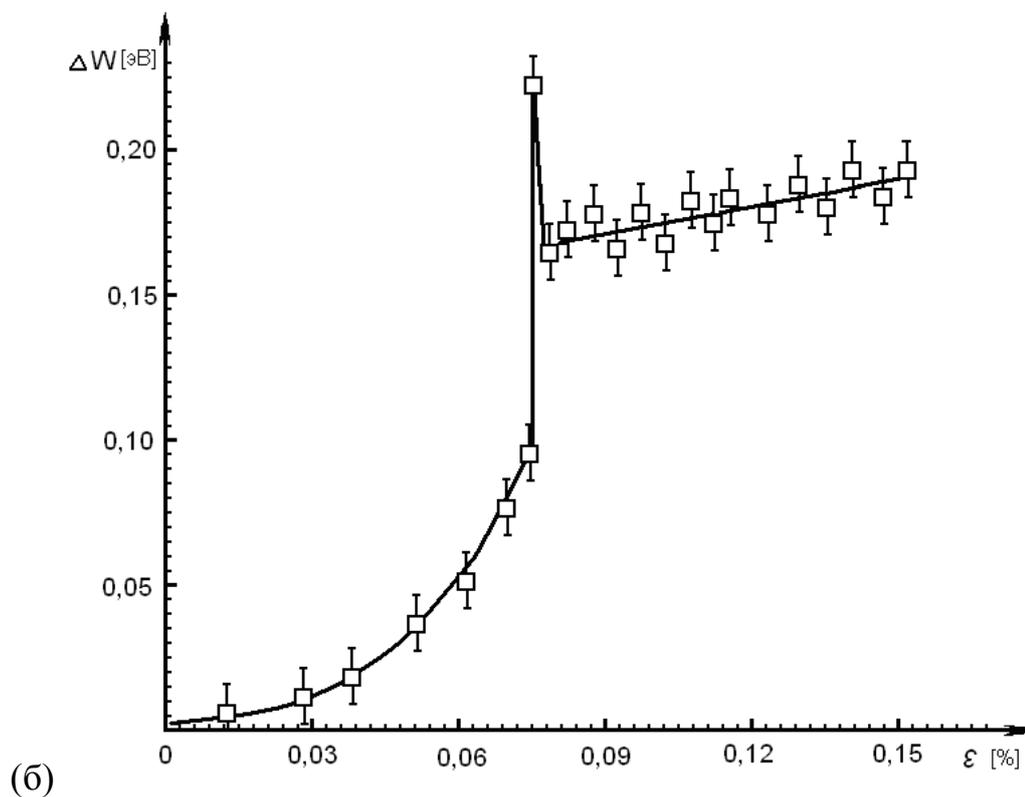


Рисунок 9 – Зависимости от деформации величины избыточной энергии приходящейся на один атом трехслойных нанотрубок с различными значениями хиральности: (5,5)(10,10)(15,15) (а); (7,0)(16,0)(25,0) (б)

Анализ структурных изменений, происходящих в процессе сжатия трехслойных углеродных нанотрубок, показал, что соотношение диаметров нанотрубок, составляющих трехслойную нанотрубку, предопределяет три зоны длин трехслойных нанотрубок. Для данных областей характерны индивидуальные структурные бифуркационные изменения при достижении критической деформации. Рассмотрим подробно следующие характерные особенности. В области больших значений длин, когда бифуркация каждой из нанотрубок протекает по типу стержневого прогиба, запуск прогиба трехслойной нанотрубки реализуется за счет прогиба внутренней нанотрубки, которая начинает прогибаться первой. Важной особенностью, при этом является уровень критической деформации трехслойной нанотрубки, который оказывается выше соответствующего значения для

внутренней и средней нанотрубки, но ниже соответствующего значения для внешней нанотрубки. В данном случае внутренняя нанотрубка стимулирует прогиб сначала средней УНТ, а затем внешней УНТ. В то же время, средняя и внешняя нанотрубки препятствуют формоизменению внутренней нанотрубки. Область малых значений длины трехслойной нанотрубки характеризуется другими закономерностями. В данном случае бифуркационный процесс запускается внешней нанотрубкой, так как при достижении критической деформации она первой начинает деформироваться по типу вогнутостей и выпуклостей, с сохранением своей первоначальной внутренней оси. Теперь уровень критической деформации трехслойной нанотрубки оказывается выше уровня критической деформации внешней и средней нанотрубок, но ниже уровня критической деформации внутренней нанотрубки. Соответственно, для данной области характерно то, что теперь внешняя нанотрубка запускает бифуркационный процесс трехслойной нанотрубки, а средняя и внутренняя нанотрубки препятствуют развитию данного процесса. Характеризуя центральную область, следует отметить, что итоговая бифуркация трехслойной нанотрубки реализуется по типу образования вогнутостей. Это связано с тем, что бифуркация однослойной внешней нанотрубки развивается за счет образования вогнутостей с сохранением центральной оси первоначальной симметрии, в то время как независимая бифуркация однослойных внутренней и средней нанотрубок все еще развивается по типу стержневого прогиба. При этом, в зависимости от длины нанотрубки, запуск бифуркационного процесса трехслойной нанотрубки может осуществляться, как за счет внешней нанотрубки, так и за счет внутренних нанотрубок. Это предопределяется соотношением диаметров однослойных нанотрубок и значениями длин трехслойной нанотрубки.

Полученные результаты позволили установить, что начало бифуркационного деформирования сопровождается скачкообразным изменением величины ΔW . В данном случае, также как и для двухслойных

нанотрубок, наблюдаемый скачок сопровождается сначала увеличением величины избыточной энергии с последующим спадом. Анализ структурных изменений в трехслойной углеродной нанотрубке показал, что в процессе деформации момент достижения критического значения деформации, при котором наблюдается резкое увеличение избыточной энергии, характеризуется началом бифуркационных изменений внешней нанотрубки. Это объясняется тем, что на поверхности внешней нанотрубки начинают образовываться выпуклости и вогнутости, однако развитию вогнутостей внешней нанотрубки препятствует сначала средний, а потом и внутренний слои трехслойной нанотрубки. В результате такого противоборства на поверхностях средней и внутренней нанотрубки также начинают образовываться выпуклости и вогнутости. Данный процесс приводит к резкому возрастанию потенциальной энергии атомов, как внешней, так и внутренней нанотрубок. Развитие данного процесса противоборства и взаимного содействия в формировании неровностей на всех трех нанотрубках в определенный момент времени достигает критических геометрических искажений, после чего реализуется структурная перестройка атомов нанотрубок, сопровождаемая небольшим спадом значения избыточной энергии. При этом последующий рост деформации трехслойной нанотрубки уже не вызывает существенных скачков в значениях избыточной энергии.

Список литературы

1. Reich S., Thomsen C., Maultzsch J. Carbon nanotubes: basic concepts and physical properties. Weinheim: Wiley-VCH. 2004, 467 p.
2. Елецкий А.В. Механические свойства углеродных наноструктур и материалов на их основе // Успехи физических наук. 2007. Т. 177, вып. 3. С. 249-274.

3. Zhu Y., Ke C., Espinosa H. Experimental techniques for the mechanical characterization of one-dimensional nanostructures // *Experimental Mechanics*. 2007. Vol. 47, no. 1. P. 7-24. DOI 10.1007/s11340-006-0406-6
4. Алдошин С.М., Бадамшина Э.Р., Каблов Е.Н. Полимерные нанокompозиты – новое поколение полимерных материалов с повышенными эксплуатационными характеристиками // *Международный форум по нанотехнологиям «Rusnanotech 08»*. Т. 1. 2008. С. 385-386.
5. Тарасов В.А., Степанищев Н.А. Применение нанотехнологий для упрочнения полиэфирной матрицы композиционного материала // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Машиностроение*. 2010. Спец. вып. № 1. С. 207-216.
6. Ray S.S., Bousmina M. Polymer nanocomposites and their applications. Stevenson Ranch, CA: American Scientific Publ., 2006. 600 p.
7. Smrutisikha B. Dispersion and reinforcing mechanism of carbon nanotubes in epoxy nanocomposites // *Bull. Mater. Sci.* 2010. Vol. 33, no. 1. P. 27-31.
8. Lurie S., Belov P., Tuchkova N. The Application of the multiscale models for description of the dispersed composites // *Int. Journal "Computational Materials Science" A*. 2004. Vol. 36, no. 2. P. 145-152.
9. Белов П.А., Гордеев А.В. Моделирование свойств композиционного материала, армированного короткими волокнами. Учет адгезионных взаимодействий // *Композиты и наноструктуры*. 2010. № 1. С. 40-46.
10. Моделирование аномальных механических свойств полиуретана модифицированного углеродными однослойными нанотрубками / Э.Р. Бадамшина, Я.И. Эстрин, Г.С. Кулагина, С.А. Лурье, Ю.О. Соляев // *Механика композиционных материалов и конструкций*. 2010. Т. 16, № 4. С. 551-562.

11. Миронов Ю.М. Применение спектроскопии комбинационного рассеяния для исследований полимерных композиционных материалов // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2012. № 7. DOI: [10.7463/0712.0431524](https://doi.org/10.7463/0712.0431524)
12. Моделирование зависимостей физико-механических характеристик от параметров микро- и наноструктуры полимерных композиционных материалов / С.А. Лурье, Ю.М. Миронов, В.А. Нелюб, А.С. Бородулин, И.В. Чуднов, И.А. Буянов, Ю.О. Соляев // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электрон. журн. 2012. № 6. DOI: [10.7463/0612.0431339](https://doi.org/10.7463/0612.0431339)
13. Tu Z.C., Yang Z.C. Single-walled and multiwalled carbon nanotubes viewed as elastic tubes with the effective Young's moduli dependent on layer number // Physical Review B. 2002. Vol. 65. P. 233407. DOI: [10.1103/PhysRevB.65.233407](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.233407)
14. Elastic and shear moduli of single-walled carbon nanotube ropes / J.P. Salvetat, G. Briggs, J.M. Bonard, R. Basca, A. Kulik // Physical Review Letters. 1999. Vol. 82, no. 5. P. 944-952.
15. Salvetat J.P., Kulik A.J., Bonard J.M., Briggs G. Elastic modulus of ordered and disordered multiwalled carbon nanotubes // Advanced Materials. 1999. Vol. 11, no. 2. P. 161-173.
16. Mechanical and physical properties on carbon nanotube / S. Xie, W. Li, Z. Pan, B. Chang, L. Sun // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2000. Vol. 61. P. 1153-1161.
17. Direct mechanical measurement of the tensile strength and elastic modulus of multiwalled carbon nanotubes / B.G. Demczyk, Y.M. Wang, J. Cumings, M. Hetman, W. Han, A. Zettl, R.O. Ritchie // Materials Science and Engineering A. 2000. Vol. 334. P. 173-186.
18. Wei C., Cho K., Srivastava D. Tensile strength of carbon nanotubes under realistic temperature and strain rate // Physical Review B. 2003. Vol. 67. P. 115407. DOI: [10.1103/PhysRevB.67.115407](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.115407)

19. Tersoff J. Empirical interatomic potential for carbon, with applications to amorphous-carbon // *Physical Review Letters*. 1988. Vol. 61, no. 25. P. 2879-2882.
20. Brenner D.W. The art and science of an analytic potential // *Phys. Status Solidi*. 2000. Vol. 217, no. 1. P. 23-40.
21. Lourie O., Cox D.M., Wagner H.D. Buckling and collapse of embedded carbon nanotubes // *Physical Review Letters*. 1998. Vol. 81, no. 8. P. 1638-1641.
22. Srivastava D., Wei C., Cho K. Nanomechanics of carbon nanotubes // *Applied Mechanics Reviews*. 2003. Vol. 56. P. 215-230.
23. Gou J., Liang Z., Zhang C., Wang B. Computational analysis of effect of single-walled carbon nanotube // *Computational Engineering*. 2005. Vol. 36. P. 524-533.
24. Oden J., Belytschko T., Babuska I., Hughes T. Research directions in computational mechanics // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2003. Vol. 192. P. 913-922.
25. Yakobson B., Brabec C., Bernholc J. Nanomechanics of carbon nanotubes: instabilities beyond linear response // *Physical Review Letters*. 1996. Vol. 76. P. 2511-2514.
26. Wagner H., Nairn J. Residual thermal stresses in three concentric transversely isotropic cylinders: application to thermoplastic-matrix containing a transcrystalline interphase // *Science and Technology*. 1997. Vol. 57. P. 1289-1302.
27. Benveniste Y., Miloh T. Imperfect soft and stiff interfaces in two-dimensional elasticity // *Mechanics of Materials*. 2001. Vol. 33. P. 309-323.
28. Tserpes K., Papanikos P. Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes // *Computational Engineering*. 2005. Vol. 36. P. 468-477.
29. Xu Y., Ray G., Abdel-Magid B. Thermal behavior of single-walled carbon nanotube // *Applied Science and Manufacturing*. 2006. Vol. 37. P. 114-121.

30. Ньи Ньи Лайнг, Рыбкин С.В. Методы расчета, измерения и анализа механических свойств углеродных нанотрубок // Наноинженерия : сборник трудов 1-ой Всероссийской школы-семинара по направлению «Наноинженерия». М., 2008. С. 243-258.
31. Белов Ю.С., Ньи Ньи Лайнг, Тин Ко Вин, Логинов Б.М. Квазидинамическая модель моделирования механических свойств углеродных нанотрубок // Труды МГТУ им. Н.Э. Баумана. Т. 598: Методы исследования и проектирования сложных технических систем. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2009. С. 19-33.

Investigation of mechanical properties of multilayer carbon nanotubes

02, February 2013

DOI: [10.7463/0213.0533309](https://doi.org/10.7463/0213.0533309)

Belov Yu.S., Vershinin E.V., Govorov D.S., Loginov B.M., Ponomarev A.V.

Russia, Bauman Moscow State Technical University, Kaluga Branch

ybs82@mail.ru

yevgeniyv@mail.ru

govorovd12@mail.ru

bloginov@kaluga.ru

panama-aleks@mail.ru

Basing on the previously developed mathematical model with the use of combinational potential, the stress-strain state of single layer and multilayer carbon nanotubes was analyzed. Introduction of a dimensionless parameter defining the nanotube length to radius ratio allowed to unify the results obtained for single layer nanotubes. For single layer and multilayer nanotubes of different types dependences of strain on extra energy per one nanotube atom were calculated. Specific regularities of bifurcation processes development, depending on the number of nanotubes layers, their geometry characteristics and chirality are discussed.

Publications with keywords: [multi-walled carbon nanotubes](#), [bifurcation](#), [combinational potential](#), [critical deformation](#)

Publications with words: [multi-walled carbon nanotubes](#), [bifurcation](#), [combinational potential](#), [critical deformation](#)

References

1. Reich S., Thomsen C., Maultzsch J. *Carbon nanotubes: basic concepts and physical properties*. Weinheim, Wiley-VCH. 2004, 467 p.
2. Eletskiy A.V. Mekhanicheskie svoystva uglerodnykh nanostruktur i materialov na ikh osnove [Mechanical properties of carbon nanostructures and related materials]. *Uspekhi fizicheskikh nauk*, 2007, vol. 177, no. 3, pp. 249-274. (Trans. version: *Physics-Uspekhi*, 2007, vol. 50, no. 3, pp. 225-261.).
3. Zhu Y., Ke C., Espinosa H. Experimental techniques for the mechanical characterization of one-dimensional nanostructures. *Experimental Mechanics*, 2007, vol. 47, pp. 7-24. DOI 10.1007/s11340-006-0406-6

4. Aldoshin S.M., Badamshina E.R., Kablov E.N. Polimernye nanokompozity - novoe pokolenie polimernykh materialov s povyshennymi ekspluatatsionnymi kharakteristikami [Polymer nanocomposites - a new generation of polymeric materials with enhanced performance characteristics]. *Mezhdunar. forum po nanotekhnologiiam «Rusnanotech 08»* [Proc. of the Nanotechnology Int. Forum "Rusnanotech 2008"]. Moscow, Vol. 1, 2008, pp. 385-386.
5. Tarasov V.A., Stepanishchev N.A. Primenenie nanotekhnologii dlia uprochneniia poliefirnoi matritsy kompozitsionnogo materiala [The use of nanotechnology for reinforcement of the polyester matrix of a composite material]. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Ser. Mashinostroenie* [Herald of the Bauman MSTU. Ser. Mechanical Engineering], 2010, Spec. iss. no. 1, pp. 207-216.
6. Ray S.S., Bousmina M. *Polymer nanocomposites and their applications*. Stevenson Ranch, CA, American Scientific Publ., 2006. 600 p.
7. Smrutisikha B. Dispersion and reinforcing mechanism of carbon nanotubes in epoxy nanocomposites. *Bull. Mater. Sci.*, 2010, vol. 33, no. 1, pp. 27-31.
8. Lurie S., Belov P., Tuchkova N. The Application of the multiscale models for description of the dispersed composites. *Int. Journal "Computational Materials Science" A*, 2004, vol. 36, no. 2, pp. 145-152.
9. Belov P.A., Gordeev A.V. Modelirovanie svoistv kompozitsionnogo materiala, armirovannogo korotkimi voloknami. Uchet adgezionnykh vzaimodeistvii [Modeling the properties of composite materials reinforced by short fibers. Accounting the adhesive interactions]. *Kompozity i nanostruktury* [Composites and nanostructures], 2010, no. 1, pp. 40-46.
10. Badamshina E.R., Estrin Ia.I., Kulagina G.S., Lur'e S.A., Soliaev Iu.O. Modelirovanie anomal'nykh mekhanicheskikh svoistv poliuretana modifitsirovannogo uglerodnymi odnosloinymi nanotrubkami [Modeling of anomalous mechanical properties of polyurethane modified by carbon single-layer nanotubes]. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruksii* [Mechanics of Composite Materials and Structures], 2010, vol. 16, no. 4, pp. 551-562.
11. Mironov Iu. M. Primenenie spektroskopii kombinatsionnogo rasseianiia dlia issledovaniia polimernykh kompozitsionnykh materialov [Application of Raman spectroscopy in research of polymer composite materials]. *Nauka i obrazovanie MGTU im. N.E. Baumana* [Science and Education of the Bauman MSTU], 2012, no. 7. DOI: 10.7463/0712.0431524
12. Lur'e S.A., Mironov Yu.M., Nelyub V.A., Borodulin A.S., Chudnov I.V., Buyanov I.A., Solyaev Yu.O. Modelirovanie zavisimosti fiziko-mekhanicheskikh kharakteristik ot parametrov mikro- i nanostruktury polimernykh kompozitsionnykh materialov [Modeling of dependences of physical-mechanical properties on parameters of micro- and nanostructure polymer composite materials]. *Nauka i obrazovanie MGTU im. N.E. Baumana* [Science and Education of the Bauman MSTU], 2012, no. 6. DOI: 10.7463/0612.0431339
13. Tu Z.C., Yang Z.C. Single-walled and multiwalled carbon nanotubes viewed as elastic tubes with the effective Young's moduli dependent on layer number. *Physical Review B*, 2002, vol. 65, pp. 233407. DOI: 10.1103/PhysRevB.65.233407

14. Salvetat J.P., Briggs G., Bonard J.M., Basca R., Kulik A. Elastic and shear moduli of single-walled carbon nanotube ropes. *Physical Review Letters*, 1999, vol. 82, no. 5, pp. 944-952.
15. Salvetat J.P., Kulik A.J., Bonard J.M., Briggs G. Elastic modulus of ordered and disordered multiwalled carbon nanotubes. *Advanced Materials*, 1999, vol. 11, no. 2, pp. 161-173.
16. Xie S., Li W., Pan Z., Chang B., Sun L. Mechanical and physical properties on carbon nanotube. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 2000, vol. 61, pp. 1153-1161.
17. Demczyk B.G., Wang Y.M., Cumings J., Hetman M., Han W., Zettl A., Ritchie R.O. Direct mechanical measurement of the tensile strength and elastic modulus of multiwalled carbon nanotubes. *Materials Science and Engineering A*, 2000, vol. 334, pp. 173-186.
18. Wei C., Cho K., Srivastava D. Tensile strength of carbon nanotubes under realistic temperature and strain rate. *Physical Review B*, 2003, vol. 67, pp. 115407. DOI: 10.1103/PhysRevB.67.115407
19. Tersoff J. Empirical interatomic potential for carbon, with applications to amorphous-carbon. *Physical Review Letters*, 1988, vol. 61, no. 25, pp. 2879-2882.
20. Brenner D.W. The art and science of an analytic potential. *Phys. Status Solidi*, 2000, vol. 217, no. 1, pp. 23-40.
21. Lourie O., Cox D.M., Wagner H.D. Buckling and collapse of embedded carbon nanotubes. *Physical Review Letters*, 1998, vol. 81, no. 8, pp. 1638-1641.
22. Srivastava D., Wei C., Cho K. Nanomechanics of carbon nanotubes. *Applied Mechanics Reviews*, 2003, vol. 56, pp. 215-230.
23. Gou J., Liang Z., Zhang C., Wang B. Computational analysis of effect of single-walled carbon nanotube. *Computational Engineering*, 2005, vol. 36, pp. 524-533.
24. Oden J., Belytschko T., Babuska I., Hughes T. Research directions in computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2003, vol. 192, pp. 913-922.
25. Yakobson B., Brabec C., Bernholc J. Nanomechanics of carbon nanotubes: instabilities beyond linear response. *Physical Review Letters*, 1996, vol. 76, pp. 2511-2514.
26. Wagner H., Nairn J. Residual thermal stresses in three concentric transversely isotropic cylinders: application to thermoplastic-matrix containing a transcrystalline interphase. *Science and Technology*, 1997, vol. 57, pp. 1289-1302.
27. Benveniste Y., Miloh T. Imperfect soft and stiff interfaces in two-dimensional elasticity. *Mechanics of Materials*, 2001, vol. 33, pp. 309-323.
28. Tserpes K., Papanikos P. Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes. *Computational Engineering*, 2005, vol. 36, pp. 468-477.
29. Xu Y., Ray G., Abdel-Magid B. Thermal behavior of single-walled carbon nanotube. *Applied Science and Manufacturing*, 2006, vol. 37, pp. 114-121.
30. N'i N'i Laing, Rybkin S.V. Metody rascheta, izmereniia i analiza mekhanicheskikh svoistv uglerodnykh nanotrubok [Methods of calculation, measurement and analysis of mechanical properties of carbon nanotubes]. *Nanoinzheneriia : Sbornik trudov 1-oi Vserossiiskoi*

shkoly-seminara po napravleniiu «Nanoinzheneriia» [Nanoengineering: Proc. of the 1st all-Russian school-seminar on the subject "Nanoengineering"]. Moscow, 2008, pp. 243-258.

31. Belov Iu.S., N'i N'i Laing, Tin Ko Vin, Loginov B.M. Kvazidinamicheskaia model' modelirovaniia mekhanicheskikh svoistv uglerodnykh nanotrubok [Quasi-dynamic simulation model of the mechanical properties of carbon nanotubes]. *Trudy MGTU im. N.E. Baumana. T. 598: Metody issledovaniia i proektirovaniia slozhnykh tekhnicheskikh sistem.* [Proc. of the Bauman MSTU. Vol. 598: Methods of research and design of complex technical systems]. Moscow, Bauman MSTU Publ., 2009, pp. 19-33.