

О механических свойствах углеродных наностержней и нановолокон из графенов при продольном растяжении и сжатии

О.В. Сидоров¹, В.Г. Мерзликин^{1,2}, С.П. Бурланков¹

¹ РЭУ им. Г.В. Плеханова, Москва, Российская Федерация

² Московский государственный машиностроительный университет (МАМИ),
Москва, Российская Федерация
e-mail: MerzlikinV@mail.ru

Рассмотрены механические свойства нановолокон, наностержней и структурных графеновых материалов с цилиндрической ортогональной анизотропией. Приведены эффективные характеристики для волокон из таких графеновых материалов при растяжении и сжатии, которые могут быть использованы для расчета механических свойств композитных материалов, упрочненных нановолокнами и нанотрубками.

Ключевые слова: цилиндрическая анизотропия, графен, наностержни, нановолокна, модуль упругости, модуль Юнга, коэффициенты Пуассона.

On Mechanical Properties of Carbon Nanorods and Nanofibers from Graphene under Longitudinal Tension and Compression

O.V. Sidorov¹, V.G. Merzlikin^{1,2}, S.P. Burlankov¹

¹ Plekhanov Russian University of Economics, Moscow, Russian Federation

² Moscow State University of Mechanical Engineering (MAMI),
Moscow, Russian Federation
e-mail: MerzlikinV@mail.ru

The report deals with the mechanical properties of nanofibers, nanorods and mechanical properties of structured graphene materials with cylindrical orthogonal anisotropy. Effective characteristics are introduced for fibers from such graphene materials which, if under tension and compression, could be used to evaluate mechanical properties of fiber-reinforced composite materials.

Keywords: cylindrical anisotropy, grapheme, nanorods, nanofibers, effective elastic modulus, Poisson ratio, Young modulus.

С развитием производства композитов, армированных углеродными нановолокнами (УНВ) и нанотрубками (УНТ), вопрос о механических свойствах этих наполнителей становится все более актуальным при расчетах свойств композитов и конструкций из них. Это связано прежде всего с тем, что УНВ и УНТ, обладая уникальными механическими свойствами при продольном растяжении, плохо работают на сжатие: предел прочности на сжатие, как правило, на порядок ниже предела прочности на растяжение. Кроме того, УНВ и УНТ обладают

цилиндрической анизотропией, которая, в отличие от прямолинейной, определяет их уникальные механические свойства уже в случае ортогональной анизотропии. Поэтому для УНВ и многослойных УНТ (МУНТ) необходимо вводить эффективные модули упругости при расчетах механических свойств композитов и конструкций из них [1, 2]. Как оказалось, модули упругости и коэффициенты Пуассона даже для волокон круговой цилиндрической формы (как изделий) не совпадают с таковыми для материалов, в частности структурированных графенов, из которых получают такие волокна.

Исследования показывают, что МУНТ (полые наностержни) и УНВ (сплошные наностержни) содержат миллионы атомов. Благодаря этому становится возможным удовлетворительное описание их механических свойств с помощью методов механики сплошных сред и классической теории упругости, например, с использованием модели тонких стержней линейной теории упругости.

По своей структуре МУНТ можно представить как нанометрового сечения полые кристаллические стержни из образованных сворачиванием в цилиндры графенов [3]. Один из типов таких МУНТ представлен на рис. 1.

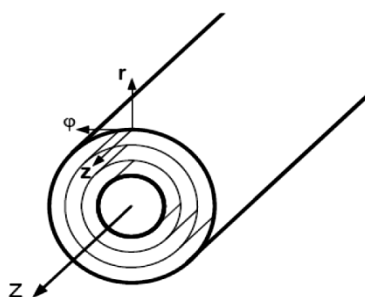


Рис. 1. Многослойная нанотрубка из графенов

Некоторые типы УНВ можно представить в виде сплошных паракристаллических стержней, образованных из графенов с круговой (рис. 2, *а*) и радиальной (рис. 2, *б*) структурой [4, 5]. Для описания механического поведения таких ци-

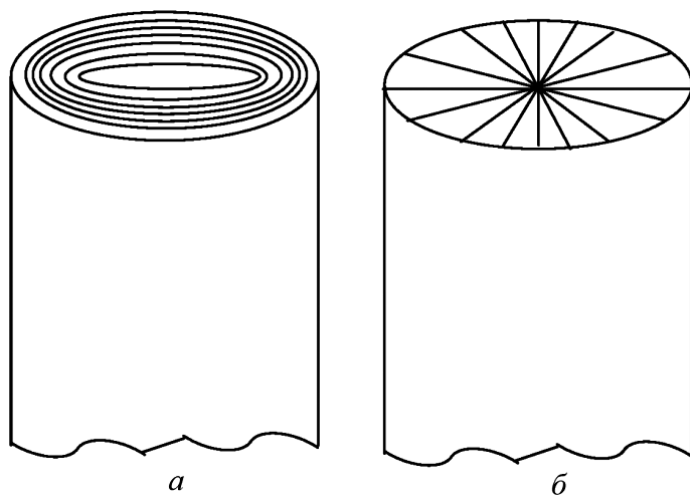


Рис. 2. Цилиндрические анизотропные УНВ с круговой (*а*) и радиальной (*б*) структурой

цилиндрических структур в рамках механики сплошных сред также используют модель цилиндрически анизотропных стержней, в данном случае, как следует из рис. 1 и 2, цилиндрически ортотропных стержней с различными модулями упругости, зависящими от структуры.

Для УНВ и МУНТ на основе модели прямого кругового упругого цилиндра радиусом R с цилиндрической ортотропией, к которому вдоль оси волокна z , совпадающей с осью анизотропии, приложена нагрузка P , можно определить эффективный модуль упругости при продольном сжатии E_f и эффективный коэффициент Пуассона (КП) ν_f . При этом расчет напряжений и деформаций ведется на основании соотношений, полученных в [6]. Все обозначения, за исключением радиуса, взяты из этой работы.

Для эффективного КП ν_f , исходя из соотношения для радиальной относительной деформации

$$\varepsilon_r = a_{11}\sigma_r + a_{12}\sigma_\theta + a_{13}\sigma_z = \frac{\partial U}{\partial r}, \quad (1)$$

получаем полную радиальную деформацию поверхности цилиндра

$$U(R) = \frac{PR}{T} \left[a_{13} + \frac{h(k-1)(a_{11}a_{33} - a_{13}^2)}{ka_{33}} \right], \quad (2)$$

где

$$k = \sqrt{\frac{a_{11}a_{33} - a_{13}^2}{a_{22}a_{33} - a_{23}^2}} = \sqrt{\frac{E_\theta}{E_r} \frac{E_z - \nu_{zr}^2 E_r}{E_z - \nu_{z\theta}^2 E_\theta}}, \quad (3)$$

$$h = \frac{(\nu_{zr} - \nu_{z\theta}) E_r E_\theta}{(E_\theta - E_r) E_z - (\nu_{zr}^2 - \nu_{z\theta}^2) E_r E_\theta},$$

а затем и относительную деформацию цилиндра в поперечном направлении вдоль радиуса

$$\varepsilon(R) = \frac{P}{T} \left[a_{13} + \frac{h(k-1)(a_{11}a_{33} - a_{13}^2)}{ka_{33}} \right]. \quad (4)$$

Поскольку продольная деформация вдоль оси z $\varepsilon_z = a_{33} \frac{P}{T}$, то, исходя из классической формулы для КП цилиндра при растяжении вдоль этой оси, окончательно получаем [7]:

$$\begin{aligned} \nu_f &= -\frac{\varepsilon(R)}{\varepsilon_z} = -\frac{a_{13}}{a_{33}} - \frac{h(k-1)(a_{11}a_{33} - a_{13}^2)}{ka_{33}^2} = \\ &= \nu_{zr} + \frac{h(k-1)}{k} \left(\frac{E_z}{E_r} - \nu_{zr}^2 \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Для эффективного модуля упругости при растяжении и сжатии E_f запишем

$$E_f = -\frac{P}{\pi R^2 \varepsilon_z} = \frac{T}{\pi R^2 a_{33}} = E_z \left(1 + h \frac{k-1}{k+1} (v_{z\theta} - v_{zr}) \right). \quad (6)$$

Как следует из формул (5) и (6), эффективные КП и модуль упругости при сжатии для УНВ в этом случае существенно отличаются от КП для графенового структурированного материала v_{zr} . Из формулы (3) для h следует, что в случае трансверсальной изотропии $h = 0$ и эффективные КП и модуль упругости совпадают с материальными. При этом необходимо отметить, что использование в работах [3, 8] традиционного модуля Юнга E_z для трубок с небольшим числом слоев и тем более для однослойных нанотрубок является нецелесообразным, так как приводит к чрезвычайно большому разбросу результатов при обработке экспериментальных данных.

Поэтому представляют интерес численные оценки эффективных v_f и E_f для радиальной структуры (рис. 2, б). Их рассчитывают на основе упругих постоянных для кристаллов графита [9]:

$$c_{11}, c_{33} = 1,06; \quad c_{13} = 0,18; \quad c_{12}, c_{23} = 0,015; \quad c_{22} = 3,65$$

(жесткость, ТПа);

$$a_{11}, a_{33} = 0,98; \quad a_{13} = -0,16; \quad a_{12}, a_{23} = 0,33; \quad a_{22} = 27,5$$

(податливость, ТПа^{-1}).

Индексация упругих постоянных соответствует соотношению для радиальной относительной деформации (1). Поскольку $v_{zr} = -a_{13}/a_{33} = 0,16 \pm 0,06$, из (5) следует, что $v_f = 0,13$. Значение $E_z = 1/a_{33} = 1,02$ ТПа дает

$$E_f = E_z \left(1 + h \frac{k-1}{k+1} (v_{z\theta} - v_{zr}) \right) = 1,021 \text{ ТПа.}$$

Таким образом, при расчетах механических свойств композитов, армированных углеродными нановолокнами с радиальной структурой из графенов, и конструкций из них необходимо вводить эффективные КП таких нановолокон, которые существенно отличаются от КП для графенового структурированного материала.

ЛИТЕРАТУРА

1. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н., Савельева И.Ю. Сравнительный анализ оценок модулей упругости композита. Ч. 1: Изотропные шаровые включения // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Машиностроение. 2014. № 5 (98). С. 53–69.

2. Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н., Савельева И.Ю. Сравнительный анализ оценок модулей упругости композита. Ч. 2: Анизотропные шаровые включения // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Машиностроение. 2014. № 6 (99). С. 31–43.
3. Гольдштейн Р.В., Городцов В.А., Лисовенко Д.С. К описанию многослойных нанотрубок в рамках моделей цилиндрически анизотропной упругости // Физическая мезомеханика. 2009. Т. 12. № 5. С. 5–14.
4. Frank O., Geim A., Novoselov K., Galiotis C. Development of a universal stress sensor for graphene and carbon fibres // Nature Communications. 2011. Vol. 2. P. 1–7.
5. Subjecting a graphene monolayer to tension and compression / G. Tsoukleri, J. Parthenios, K. Papagelis, R. Jalil, A.C. Ferrari, A.K. Geim, K.S. Novoselov, C. Galiotis // Small. 2009. No. 2. P. 2397–2402.
6. Лехницкий С.Г. Теория упругости анизотропного тела. М.: Наука, 1977. 416 с.
7. Sidorov O.V. Effective moduli of MWCNT and carbon nanofibers based on graphenes: continuum approach // Int. Conf. on Theoretical Physics DUBNA-NANO2012. Dubna, July 9–14, 2012. Book of Abstracts, Joint Inst. for Nuclear Research, Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics. 2012. P. 113.
8. Зарубин В.С., Сергеева Е.С. Исследование связи упругих характеристик однослойной углеродной нанотрубки и графена // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2016. № 1. С. 100–110.
DOI: 18698/1812-3368-2016-1-100-110
9. Seldin E.J., Nezbeda C.W. Elastic constant and electron-microscope observations of neutron-irradiated compression annealed pyrolytic and single-crystal graphite // J. Appl. Phys. 1970. Vol.41, P. 3389–3400.

REFERENCES

- [1] Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savelyeva I.Yu. Comparative Analysis Estimates of Elastic Moduli for Composite. Part 1. Isotropic Spherical Inclusions. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Bauman, Mashinost.* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Mech. Eng.], 2014, no. 5, pp. 53–69 (in Russ.).
- [2] Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N., Savelyeva I.Y. Comparative Analysis Modulus Elasticity Estimates for Composite. Part 2. Anisotropic Spherical Inclusions. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Bauman, Mashinost.* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Mech. Eng.], 2014, no. 6, pp. 31–43 (in Russ.).
- [3] Gol'dshcheyn R.V., Gorodtsov V.A., Lisovenko D.S. To the description of multi-layer nanotubes in models of cylindrically anisotropic elasticity. *Fiz. mezomekh.* [Physical Mesomechanics], 2009, vol. 12, no. 5, pp. 5–14 (in Russ.).
- [4] Frank O., Geim A., Novoselov K., Galiotis C. Development of a universal stress sensor for graphene and carbon fibres. *Nature Communications*, 2011, vol. 2, pp. 1–7.
- [5] Tsoukleri G., Parthenios J., Papagelis K., Jalil R., Ferrari A.C., Geim A.K., Novoselov K.S., Galiotis C. Subjecting a graphene monolayer to tension and compression. *Small*, 2009, no. 2, pp. 2397–2402.
- [6] Lekhnitskii S.G. Teoriya uprugosti anizotropnogo tela [Theory of elasticity of an anisotropic body]. N.Y., Holden-Day, 1963. 404 p.
- [7] Sidorov O.V. Effective Moduli of MWCNT and Carbon Nanofibers based on Graphenes: Continuum Approach. *Int. Conf. on Theoretical Physics DUBNA-NANO2012*, Dubna, July 9–14, 2012. Book of Abstracts, Joint Inst. for Nuclear Research, Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, 2012, p. 113.
- [8] Zarubin V.S., Sergeeva E.S. Investigation of the relationship between elastic properties of single-walled carbon nanotubes and graphene. *Vestn. MGTU im. N.E. Bauman, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2016, no 1, pp. 100–110 (in Russ.).
DOI: 18698/1812-3368-2016-1-100-110

- [9] Seldin E.J., Nezbeda C.W. Elastic constant and electron-microscope observations of neutron-irradiated compression annealed pyrolytic and single-crystal graphite. *J. Appl. Phys.*, 1970, vol. 41, pp. 3389–3400.

Статья поступила в редакцию 20.02.2016

Сидоров Олег Валентинович — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Управление программами и проектами» Российского экономического университета им. Г.В. Плеханова (Российская Федерация, 117997, Москва, Стремянный пер., 36).

Sidorov O.V. — Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Professor of Management of Projects and Programs Department, Plekhanov Russian University of Economics (Stremyanny pereulok 36, Moscow, 117997 Russian Federation).

Мерзликин Владимир Гаврилович — канд. техн. наук, доцент кафедры «Технико-экономические системы» Российского экономического университета им. Г.В. Плеханова (Российская Федерация, 117997, Москва, Стремянный пер., 36), доцент кафедры «Автоматизированные станочные системы и инструменты» Московского государственного машиностроительного университета (МАМИ) (Российская Федерация, 107023, Москва, ул. Б. Семеновская, д. 38).

Merzlikin V.G. — Cand. Sci. (Eng.), Assoc. Professor of Technical and Physical Systems Department, Plekhanov Russian University of Economics (Stremyanny pereulok 36, Moscow, 117997 Russian Federation), Assoc. Professor of Automated Machine Systems and Tools Department, Moscow State University of Mechanical Engineering (МАМИ) (B. Semenovskaya ul. 38, Moscow, 107023 Russian Federation).

Бурланков Степан Петрович — д-р экон. наук, профессор кафедры «Технико-экономические системы» Российского экономического университета им. Г.В. Плеханова (Российская Федерация, 117997, Москва, Стремянный пер., 36).

Burlankov S.P. — Dr. Sci. (Econ.), Professor of Technical and Physical Systems Department, Plekhanov Russian University of Economics (Stremyanny pereulok 36, Moscow, 117997 Russian Federation).

Просьба сослаться на эту статью следующим образом:

Сидоров О.В., Мерзликин В.Г., Бурланков С.П. О механических свойствах углеродных наностержней и нановолокон из графенов при продольном растяжении и сжатии // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Машиностроение. 2016. № 3. С. 125–130. DOI: 10.18698/0236-3941-2016-3-125-130

Please cite this article in English as:

Sidorov O.V., Merzlikin V.G., Burlankov S.P. On Mechanical Properties of Carbon Nanorods and Nanofibers from Graphene under Longitudinal Tension and Compression. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Mashinotr.* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Mech. Eng.], 2016, no. 3, pp. 125–130. DOI: 10.18698/0236-3941-2016-3-125-130