

ОЦЕНКА УПРУГИХ СВОЙСТВ ФУЛЛЕРЕНА C20

Ю.Е. Нагорный¹, В.И. Репченков¹, С.А. Чижик²

¹ Белгосуниверситет, механико-математический факультет

Независимости 4, 220030 Минск, Беларусь

{nagorny, repchenkov}@bsu.by

² Институт тепло- и массообмена НАН Беларуси, П. Бровки 15, 220072 Минск, Беларусь

chizhik_sa@tut.by

Построена и реализована в пакете "Mathematica" математическая модель механического поведения фуллерена C20 при статическом нагружении в случае малых деформаций. Учитывалось валентное взаимодействие соседних атомов и молекулярное двух более удаленных. Рассмотрение проведено в рамках теории центрального взаимодействия и теории валентно-силового поля [1].

Выполнены численные эксперименты по статическому нагружению фуллерена C20 и двадцатиатомной нанотрубки. Схемы нагружения показаны на рисунке. Нанотрубка выбрана в

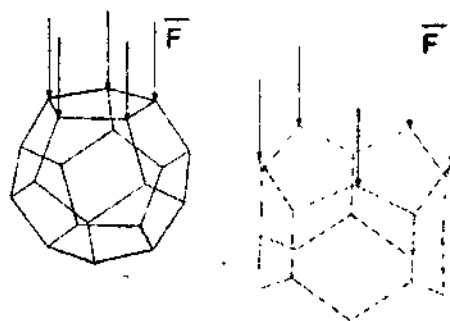


Рис. Фуллерен и нанотрубка

качестве объекта сравнения поскольку для нее можно ввести определения упругих модулей [2]. Кроме того обе системы состоят из одинакового количества атомов и имеют близкие размеры: диаметр фуллерена $D_f=0.391$ нм, высота $H_f=0.316$ нм, у трубки $D_t=0.398$ нм, $H_t=0.284$ нм. Модуль Юнга трубки равен 0.601 ТПа в модели центрального взаимодействия и 0.527 ТПа в модели валентно-силового поля [2]. Предположим, что силовые коэффициенты обеих систем одинаковы. Вычисления показывают, что смещения крайних атомов фуллерена и нанотрубки при одинаковой нагрузке в случае теории центрального взаимодействия практически совпадают. В теории валентно-силового поля соответствующие смещения фуллерена примерно на 40 % больше чем у трубки. Таким образом жесткость фуллерена сравнима с продольной жесткостью нанотрубки. Попутно отметим, что нанотрубка обнаруживает очень высокую податливость при нагружении вдоль диаметра. Соответствующие смещения более чем на порядок превосходят осевые при одинаковой суммарной нагрузке.

Литература

1. Коптев Г.С., Пентин Ю.А. Расчет колебаний молекул. МГУ, 1977.
2. Нагорный Ю.Е., Репченко В.И., Чижик С.А. Сравнительный численный анализ механического поведения нанотрубки в случае применения разных механических моделей. Теоретическая и прикладная механика, БНТУ, 2008.