

РАДИАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

А.М. Ильин, Е.А. Дайнеко

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, НИИЭТФ, Алматы

Проведено конструирование нанотубулярных элементов, содержащих радиационные дефекты структуры и определены энергетические и структурные характеристики нескольких возможных конфигураций дефектов, обеспечивающих жесткую связь между ними. Показано, что радиационное воздействие может индуцировать возникновение особого типа радиационных дефектов – мостиковых конфигураций, создающих прочные связи между нанотубулярными элементами. Этот эффект может быть использован в различных нанотехнологиях. Например, при создании легких и прочных композитных материалов, на основе матрицы из сплавов легких металлов и жестких нанотубулярных включений.

Введение

В настоящее время большое внимание физиков и технологов привлекает перспектива создания композитных материалов на основе сплавов легких металлов (Al, Mg, Be) с включениями из углеродных нанотубулярных элементов, которыми могут быть нанотрубки (многослойные и однослойные), фуллерены, фрагменты графена. Такие материалы способны обладать уникально высоким отношением прочность / удельный вес, устойчивостью против образования и роста трещин [1-5]. Определенные сложности на этом пути связаны с особенностями электронной структуры sp^2 углеродных нанотубулярных элементов, которая не обеспечивает достаточно сильную связь между поверхностями нанотрубок и атомами матрицы, а также между отдельными упрочняющими наноэлементами [6,7], из-за чего возможны различные эффекты проскальзывания нанотрубок, снижающие предельно возможные значения прочности композита. В этой связи перспективным представляется использование предварительного радиационного воздействия на материал, с целью упрочнения кластерных конфигураций за счет образования в зоне радиационных дефектов жестких поперечных связей между нанотубулярными элементами композита. В настоящей работе проведено конструирование нанотубулярных элементов, содержащих радиационные дефекты структуры и определены энергетические и структурные характеристики нескольких возможных конфигураций дефектов, обеспечивающих жесткую связь между ними.

Компьютерное моделирование и расчеты

Расчеты энергетических и структурных характеристик радиационных дефектов проводились методом МО ЛКАО ССП. После моделирования структуры определенного углеродного нанотубулярного элемента, создавался кластер. В простейшем случае кластер состоял из двух элементов, что просто уменьшало затраты компьютерного времени и облегчало проведение компьютерного эксперимента. В работе представлены результаты расчетов двойных кластеров, состоящих из фуллеренов, нанотрубок, графеновых фрагментов. Далее, моделировалось радиационное воздействие на кластер, в результате которого в составляющих элементах возникали одиночные вакансии, а между ними был локализован выбитый из структуры атом. Точная конфигурация таких мостиковых связей определялась с помощью процедуры минимизации энергии конфигурации.

На рисунке 1 показана типичная конфигурация кластера из двух параллельных нанотрубок (6,6), содержащих в своей структуре одиночные вакансии. Трубки ориентированы таким образом, что вакансии располагаются в непосредственной близости одна от другой. Конструировалась конфигурация устойчивого комплексного радиационного дефекта, включающего две вакансии, связанные через внедренный атом. Для минимизированной конфигурации дефекта расчет дал значение 3.9 эВ на каждую связь

мостика. Это достаточно высокое значение, если учесть, что в чистой структуре sp^2 на связь приходится 5.4 эв.

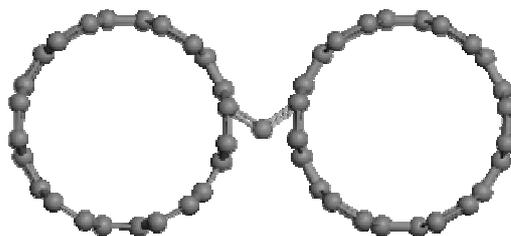


Рис.1. Радиационно-индуцированная «мостиковая связь» между нанотрубками (атомная структура)

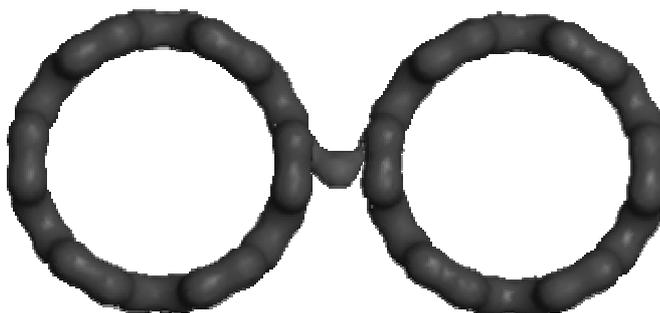


Рис.2. Распределение электронного заряда в конфигурации (при плотности заряда $1 \text{ e}/\text{Å}^3$)

На рисунке 2 представлено распределение электронного заряда в модельной системе при плотности $1 \text{ e}/\text{Å}^3$. Очевидно, что мостиковая связь обеспечивается высоким уровнем электронной плотности, соразмерным уровню заряда в структуре нанотрубок. На рисунке 3 показана геометрическая конфигурация возникшей мостиковой связи. Угол между связями «мостика», соединяющего нанотрубки, составляет 109.6° .

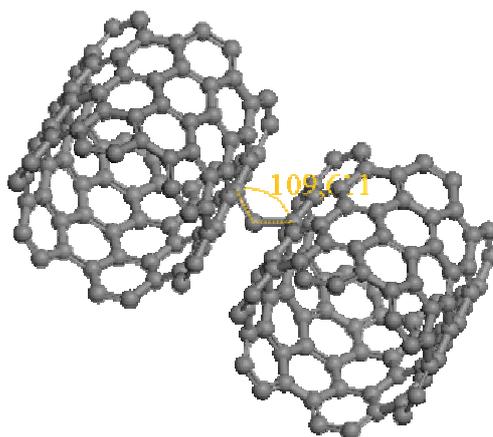


Рис.3. Структура мостиковой связи

На рисунке 4 показана модельная рассчитанная конфигурация кластера с мостиковой связью из двух фуллеренов C_{60} . Оба фуллерена в зонах соприкосновения имеют вакансии в структуре и выбитый атом локализованный между ними. Для минимизированной конфигурации дефекта расчет дал значение $E = -3.6$ эв на каждую связь мостика.

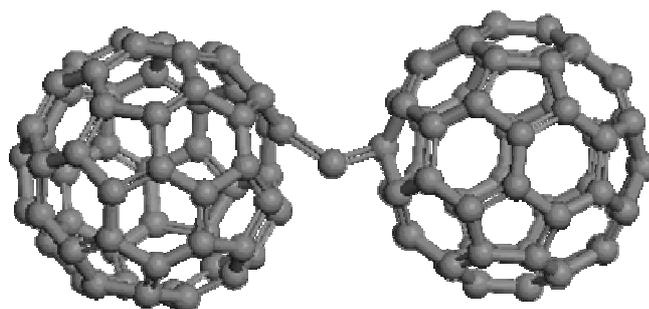


Рис. 4. Мостиковая связь между фуллеренами C_{60}

Кратчайшее расстояние между фуллеренами составляет 3.8 А. Энергия связи мостиковой конфигурации $E = -3.63$ эв на каждую связь мостика. На рисунке 5 показано распределение электронного заряда в конфигурации. Видно, что плотность заряда в области мостиковой связи соизмерима с плотностью заряда в структуре фуллеренов.

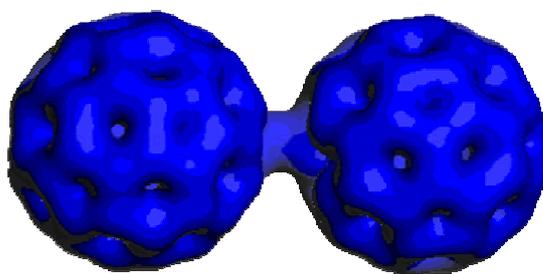


Рис. 5. Распределение электронного заряда при плотности $0.40 \text{ e}/\text{A}^3$

На рисунке 6 показана мостиковая связь между графеновыми фрагментами. Расстояние между графенами уменьшается до 3 А, что меньше значения 3.4 А, соответствующего равновесному расстоянию между ними, обусловленному силами ван дер Ваальса. Видно, что после релаксации зоны вакансии плоская структура графена деформируется и атомы, граничащие с вакансией, и расположенные рядом с мостиковой связью, входят в пространство между графенами и сближаются до расстояния 1.43 А, которое очень близко к 1.42 А, характерному для структуры sp^2 . Суммарная энергия связи, обеспечиваемая мостиковым дефектом и двумя дефектными конфигурациями между атомами 1-2 и 3-4 составила 11.2 эв.

В результате возникает распределение электронного заряда, показанное на рисунке 7. Оно подтверждает возникновение дополнительных электронных связей в зоне радиационного дефекта.

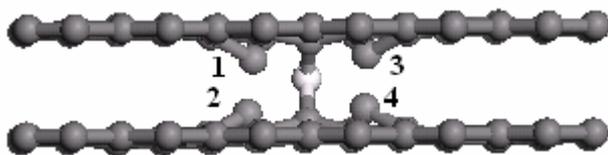


Рис. 6. Атомная структура после релаксации зоны дефекта

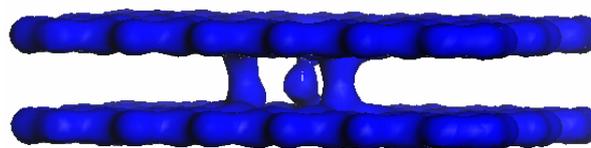


Рис. 7. Распределение электронного заряда после релаксации при $\rho = 1.0$

Заклучение

Таким образом, в данной работе показано, что радиационное воздействие (например, облучение ионами или быстрыми электронами) может индуцировать возникновение особого типа радиационных дефектов – мостиковых конфигураций, создающих прочные связи между нанотубулярными элементами – УНТ, фуллеренами, графенами. Этот эффект может быть использован в различных нанотехнологиях. Например, при создании легких и прочных композитных материалов, на основе матрицы из сплавов легких металлов и жестких нанотубулярных включений.

Литература

1. Харрис П. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. М., Техносфера, 2003.-336с.
2. Пул Ч, Оуэнс Ф. Нанотехнологии. М., Техносфера, 2007.-374 с.
3. Рит М. Наноконструирование в науке и технике. М-И, 2005.-160 с.
4. Fyta M.G. and Kelires P.C. Simulations of composite carbon films with nanotube inclusions // Appl.Phys.Lett.-2005.-V.86.-P.191916
5. Yanagi H., Kawai Y., Kita T. et al. Carbon nanotube/ Aluminum composites as a novel field electron emitter // Jpn.J.Appl.Phys.- 2006.-V.45.-P.L650-L653.
6. Mao Z., Garg A., Sinnott S. Molecular dynamics simulations of the filling and decorating of carbon nanotubules // Nanotechnology.-1999.-10.-P.273-277.
7. Bagci V.M.K., Gulseren O. et al. Metal nanoring and tube formation on carbon nanotubes // Phys.Rev.B.-2002.-66.-045409

КӨМІРТЕКТІ НАНОҚҰРЫЛЫМДАРДАҒЫ РАДИАЦИЯЛЫҚ ЭФФЕКТИЛЕР

А.М. Ильин, Е.А. Дайнеко

Құрамында радиациялық ақаулы құрылымы бар нанотубулярлы элементке құрылымдау жүргізілді және бірнеше мүмкін болатын, олардың арасындағы берік байланысты жүзеге асыратын ақаулар конфигурацияларының энергетикалық және құрылымдық сипаттамалары анықталды. Радиациялық әсерлесу, нанотубулярлы элементтердің арасындағы берік байланысты жүзеге асыратын, радиациялық ақаудың ерекше түрі – көпірлік конфигурацияның пайда болуына ықпал ететіндігі көрсетілді. Бұл эффект әртүрлі нанотехнологияларда қолданылуы мүмкін. Мысалы, қатты нанотубулярлық қосынды мен жеңіл металлдар қорытпасынан матрицалық негізде, жеңіл және берік композитті материалдар алу.

RADIATIONS EFFECTS IN CARBON NANOSTRUCTURES

A.M. Ilyin, E.A. Daineko

It was made the formation of nanotubular elements, containing the radiation structure defects and was determined the energetic and structure characteristics of some possible defects configurations, which provide the rigid bond between them. It was shown that radiation influence can induce the appearance of particular kind of radiation defects – bridge configurations, which create the strong bonds between nanotubular elements. This effect can be used in various nanotechnologies. For example, creation of light and durable composit materials on the base of matrix from light metal alloys and rigid nanotubular insertions.