

# NANOSZERKEZETEK SZAKÍTÓVIZSGÁLATÁNAK SZIMULÁCIÓJA

## SIMULATION OF THE LOADING TEST FOR NANOSTRUCTURES

Pataki Tamás\*

### ABSTRACT

*The loading tests of nanostructures can be carried out either very difficult or in an incorrect way. Therefore the loading simulations solved theoretically have large significance. For this purpose a new algorithm was developed. The base of the algorithm is that the atomic forces can be calculated from the derived function of the energetic potential functions of the chemical bonds. The steps are shown on the examples of carbon nanotubes having extreme strength properties and their junctions.*

**Kulcsszavak:** szakítóvizsgálat, szimuláció, nanoszerkezetek, szén nanocsövek

### BEVEZETÉS

Szén nanocsövek szakítóvizsgálati kísérletére kétféle példát találtam a szakirodalomban. Mindkét esetben atomi erő mikroszkópok tüi közé rögzített mintát húztak, az egyik esetben nanocső kötegeket [1], a másik esetben többfalú szén nanocsövet [2-3]. A kísérletek nehézsége mellett probléma volt az is, hogy a vizsgált minták pontos szerkezete ismeretlen volt, nem lehetett tudni, mire vonatkoztak pontosan a mérések.

Többen próbálkoztak szakítódiagramok elméleti úton történő meghatározásával [4-8]. A módszereknek az alapja mindig az, hogy az atomi erőket a kémiai kötések energiáját meghatározó potenciálfüggvények deriváltjaként lehet meghatározni. Ma már csaknem mindenhol az empirikus Brenner-potenciált alkalmazzák [9] erre a célra. A kapott eredmények azonban meglehetősen különböztek, esetenként több nagyságrendnyi eltérések is voltak pl. a számolt szakítószilárdság értékeiben [4-8]. Az eltérések a Brenner-formulák különbözőképpen történő alkalmazásából adódtak. Többen észrevették ugyanis, hogy amíg a Brenner-formulák kiválóan alkalmazhatóak egyensúlyi helyzet meghatározására, az atomi erők számításánál már problémák adódnak, mivel a derivált függvényen töréspont és ugrásszerű meredekség változások vannak, amelyek nem magyarázhatóak a kémiai kötések viselkedésével. Elsősorban ennek a problémának a különböző módokon történő megkerülése

okoza a nagy eltéréseket a Brenner-potenciállal számolt szilárdságok között. A problémára a legjobb megoldást úgy adták meg, hogy a töréspontot, az ugrásszerű változásokat a derivált formulákon matematikailag kiküszöbölték, úgy, hogy közben változatlanul megmaradt az egyensúlyi helyzet keresésének lehetősége is [10].

Ebben a munkában szén nanoszerkezetek szakítóvizsgálatának szimulációs algoritmusához készítettem számítógépes programot, úgy, hogy futtatható legyen nagy atomszámok esetére. Ezzel lehetőséget teremtettem arra, hogy a legújabb kutatások szerint különböző célokra ajánlott újabb szén nanoszerkezetek, elsősorban a nanocső elágazások [11-15] és hálózatok [16-18] alapvető szilárdsági tulajdonságait meghatározhassuk. Ez azért fontos, mert a szén nanoszerkezetek esetében az egyik legérdekesebb tulajdonság a nagy szilárdság az ugyancsak rendkívül érdekes elektromos viselkedés [19-20] vizsgálata mellett.

### A SZAKÍTÓVIZSGÁLAT SZIMULÁCIÓJÁNAK ALGORITMUSA

Mivel az atomok közötti kötőerőket ebben a munkában is a kémiai kötések energetikai potenciálfüggvényének deriváltjaként számolom, szükségesnek látom ismertetni a Brenner-formulákat [9]. Eszerint az energetikai potenciált az egymástól  $r_{ij}$  távolságban lévő  $i$ -edik és  $j$ -edik atomok között ( $V(r)$ ) egy taszító ( $V_R$ ) és egy vonzó taggal ( $V_A$ ) írjuk le:

$$V(r_{ij}) = V_R(r_{ij}) - \bar{B}_{ij} V_A(r_{ij}) \quad (1)$$

ahol a  $D_e$ ,  $S$ ,  $\beta$  és  $R$  anyagállandók segítségével megadott tagok:

$$V_R = \frac{D_e}{S-1} e^{-\sqrt{2S}\beta(r-R)} f_{ij}(r_{ij}) \quad \text{és}$$

$$V_A = \frac{D_e S}{S-1} e^{-\sqrt{2/S}\beta(r-R)} f_{ij}(r_{ij}) \quad (2)$$

Az  $f_{ij}$  korrekciós függvény matematikailag polinomokkal felírt formula. Kettős szerepe van: egyrészt adott (elég nagy) hatótávolságon kívül levégja a vonzó és taszító hatásokat, másrészt parametrikus alakja miatt a formulákat mérési eredményekhez lehet illeszteni,

*Harmadéves Ph.D. hallgató, Szent István Egyetem, Gödöllő. e-mail: pataki.tamas@gek.szie.hu*

mindkét funkció az egyensúlyi helyzettől távolodva fejti ki hatását [10]. Ennek bevezetésével oldották meg azt is, hogy a Brenner-formulák deriváltján nincsenek töréspontok és ugrásszerű változások.

A  $B_{ij}$  tényező segítségével vesszük figyelembe az atomok lokális környezetének (első és második koordinációs szféra) hatását és a kötések különböző szögeit:

$$B_{ij} = \left[ 1 + \sum_{k(\neq i,j)} G(\theta_{ijk}) f_{ik}(r_{ik}) \right]^{-\delta} \quad (3)$$

ahol  $\theta_{ijk}$  az i-j és i-k kötések szöge, G pedig az  $a_0$ ,  $c_0$ ,  $d_0$  anyagállandókkal megadva:

$$G(\Theta) = a_0 \left[ 1 + \frac{c_0^2}{d_0^2} - \frac{c_0^2}{d_0^2 + (1 + \cos \Theta)^2} \right] \quad (4)$$

Az (1) formulában szereplő tényező:

$$\bar{B}_{ij} = (B_{ij} + B_{ji}) / 2 \quad (5)$$

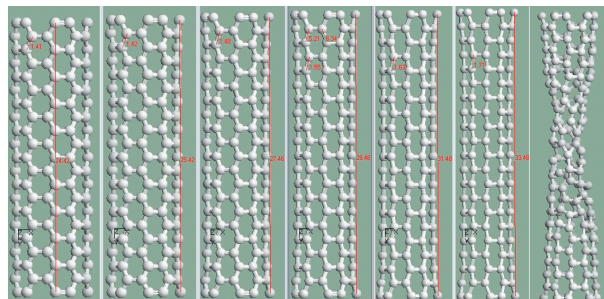
A szakítóvizsgálat szimulációs algoritmusának lépései:

1. Szén nanoszerkezet megadása az atomoknak megfelelő pontkoordináták táblázatával, terheletlen, nyugalmi állapotban.
2. A terhelés helyén lévő atomok elmozdítása a terhelés irányában, kis távolsággal. (Az elmozdítás mértéke olyan kicsi, hogy nem zavarja meg a következő lépés egyensúlyi helyzet számítását.)
3. Új egyensúlyi helyzet számítása (Brenner-formula minimalizálása): az előző lépésben elmozdított és a rögzítés helyén lévő atomokat helyben hagyjuk, a közöttük lévő atomokat relaxáltatjuk az egyensúlyi helyzet kiszámításáig.
4. Kötőerők számítása.
5. Az előző három lépés ismétlése, amíg a szerkezet nem sérül vagy szakad.
6. A kötőerőket természetesen a leggyengébb helyen (keresztmetszetben) elegendő számítani, mivel azonban ez a hely a húzás során csak később lesz ismert, ezért az erőket célszerűen a lépések után rögzített táblázatokból utólag is ki lehet számítani. Végül a leggyengébb keresztmetszeten vektoriálisan összegzett kötőerők eredőjét ábrázoljuk a megnyúlás függvényében, és ez lesz a szakítódiagram.

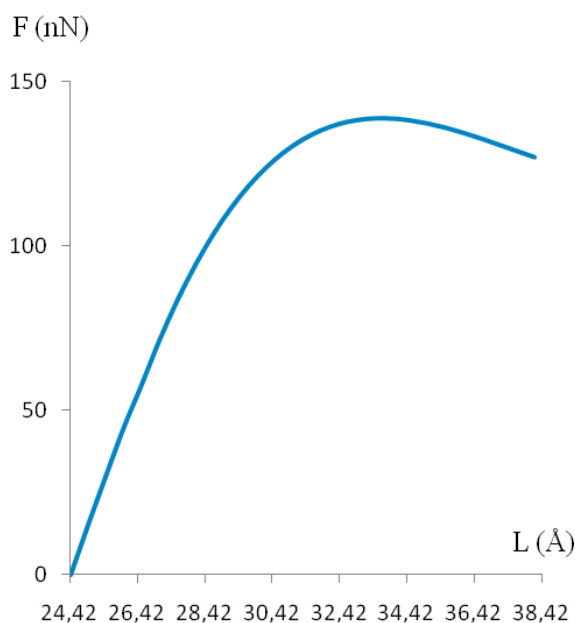
Az algoritmusra saját számítógépes programot készítettünk. A futtatási eredményeket először egy egyenes nanocső példáján mutatom. Az 1. ábrán baloldaltól a jobboldal felé haladva pillanatfelvételeket látunk a húzásszimulációból. A kiindulás a baloldali állapot. Feltételezzük, hogy a 24,42Å hosszúságú cső alját rögzítettük, a felső részt húzzuk függőlegesen felfelé. A szimulációban az elmozdításokat 0,01Å lépésekben végeztük. Öt közbenső állapotot látunk balról jobbra haladva, végül a jobboldalon a tönkrement szerkezet látszik. Az egyenes szén nanocső szakítódiagramját a 2. ábrán mutatom.

A kutatómunka célja a bevezetésben említett, sok atom-

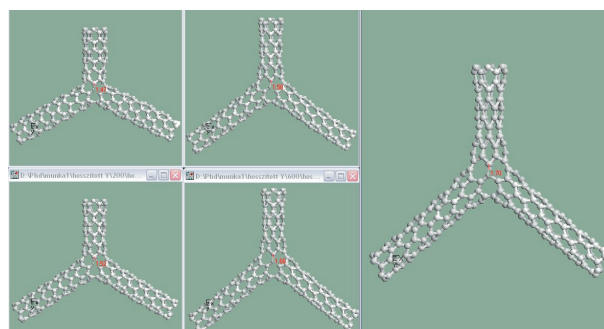
ból álló szén nanoszerkezetek szakításvizsgálatainak elvégzése lesz az új szimulációs eszközzel. Az első futtatás eredményét mutatom a 3. ábrán, ahol szén nanocső Y-elágazás szakítóvizsgálatának pillanatfelvételeit látjuk. A húzás a csövek tengelyeinek irányában történik. Az első értékelés szerint még csak annyit sikerül eldönteni, hogy ez a szerkezet a csomópontban (elágazásnál) fog szakadni, ugyanis a kötések itt kezdenek legjobban megnyúlni. A további kiértékeléseket, újabb szerkezetek vizsgálatát a későbbiekben folytatom.



1. ábra. Pillanatfelvételek az egyenes szén nanocső húzásából



2. ábra. Az egyenes szén nanocső szakítódiagramja



3. ábra. Pillanatfelvételek az Y-elágazás húzásából.

## ÖSSZEFOGLALÁS

Új számítógépes algoritmus készült nanoszerkezetek szakításvizsgálatainak szimulációjára. Az eszköz azért jelentős, mert a nanoszerkezetek esetében a kísérleti úton történő szakításvizsgálatok vagy nem végezhetőek el, vagy rendkívül nehézkesen, sok költséggel végezhetőek. Az első futtatási eredményeket egyenes szén nanocső és nanocső Y-elágazás példáján láthatjuk.

## SUMMARY

*Considering the experimental tools the loading tests of the nanostructures can be carried out very difficult or they cannot be solved in correct way. Therefore the loading simulation developed theoretical way has large significance. Such an algorithm is shown in this work. The base of the algorithm is that the atomic forces can be calculated if we derive the mathematical formula of the energetic potential function of the chemical bonds. The steps of the algorithm are detailed furthermore the first calculation results are shown for carbon nanostructures which, as it is known, have extraordinary strength.*

## KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A kutatási munka az OTKA K 73776 pályázat támogatásával készült.

## HIVATKOZÁSOK

- [1] YU MF, FILES BS, AREPALLI S, RUOFF R.: Tensile loading of ropes of single nanotubes and their mechanical properties. Phys. Rev. Lett. 2000; 84:5552-5555.
- [2] DEMCZYK BG, WANG YM: et. al. Direct mechanical measurement of the tensile strength and elastic modulus of multiwalled carbon nanotubes. Mater. Sci. and Eng. A 2002; 334:173-178.
- [3] YU MF, LOURIE O, DYER MJ, MOLONI K, KELLY TE, RUOFF RS.: Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load. Science 2000; 287:637-640.
- [4] FU CX, CHEN YF, JIAO JW.: Molecular dynamics simulation of the test of single-walled carbon nanotubes under tensile loading. Sci. in China E 2008; 50:7-17.
- [5] MYLVAGANAM K, ZHANG LC.: Important issues in a molecular dynamics simulation for characterising the mechanical properties of carbon nanotubes. Carbon 2004; 42:2025-2032.
- [6] AGRAWAL PM, SUDALAYANDI BS.: et. al. Molecular dynamic simulations of the dependence of C-C bond lengths and bond angles on the tensile strain in single-wall carbon nanotubes, Comput. Mater. Sci 2008;41:450-456.
- [7] DUAN WH, WANG Q, LIEW KM, HE XQ.: Molecular mechanics modelling of carbon nanotube fracture. Carbon 2007; 45:1769-1776.
- [8] BELYTSCHKO T.: et.al. Atomistic simulations of nanotube fracture. Phys. Rev. B 2002; 65:235430-1-8.
- [9] BRENNER DW.: Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films. Phys. Rev. B 1990; 42:9458-9471.
- [10] ZSOLDOS I., LÁSZLÓ I.: Computation of the loading diagram and the tensile strength of carbon nanotube networks, Carbon 2009; 4:1327-1334
- [11] ZSOLDOS I, KAKUK G, RETI T, SZASZ A.: Geometric construction of carbon nanotube junctions. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2004; 12:1-16.
- [12] LASZLO I.: Construction of atomic arrangement for carbon nanotube junctions. Phys. Stat. Sol. 2007; 244:4265-4268.
- [13] ZSOLDOS I, KAKUK GY., JANIK J., PÉK L.: Set of carbon nanotube junctions, Diamond and Related Materials 2005; 14:763-766.
- [14] TING JM.: et.al. Carbon nanotubes with 2D and 3D multiple junctions. Carbon 2004; 42:2997-3002.
- [15] ZSOLDOS I, KAKUK GY.: New formations of carbon nanotube junctions, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2007; 15:739-747.
- [16] ROMO-HERRERA JM, TERRONES M, TERRONES H, DAG S, MEUNIER V.: Covalent 2D and 3D networks from 1D nanostructures: Designing new materials. Nanoletters 2007; 7:570-576.
- [17] GRANER G.: Carbon nanonets spark new electronics. Scientific American 2007; 5:58-65.
- [18] COLUCI VR, DANTAS SO, JORIO A, GALVAO DS.: Mechanical properties of carbon nanotube networks by molecular mechanics and impact molecular dynamics calculation. Phys. Rev. B 2007; 75:075417-1-7.
- [19] WEI DC, LIU YQ: The intramolecular junctions of carbon nanotubes, Advanced Materials, 2008; 20:2815-2841.
- [20] LÁSZLÓ I., ZSOLDOS I.: Calculation of curvature effects and hybridization in zigzag carbon nanotubes, Phys. Status Solidi B 2009; 246:2610-2613.