

Про визначення модуля пружності одношарових вуглецевих нанотрубок методами структурної механіки

А.Я. Карвацький¹ • І.О. Мікульонок¹ • Т.В. Лазарєв² • К.М. Короленко¹

1 - КПІ ім. Ігоря Сікорського, м. Київ, Україна;
2 - ДП «Конструкторське Бюро «Південне» ім. М.К. Янгеля

Received: 10 January 2019 / Accepted: 22 March 2019

Анотація. Метою статті є відпрацювання та перевірка числових методик визначення модуля пружності одношарових вуглецевих нанотрубок з використанням методу скінченних елементів, а також зв'язку між параметрами молекулярної і структурної механіки.

Дослідження проводилося для нанотрубок різних типів просторово-каркасних моделей, а саме типу «крісло» (armchair), типу «зигзаг» (zigzag) і типу «хіральна» (chiral). Для побудови моделей нанотрубок зазначених типів розроблено програмні коди у середовищі вільно відкритого програмного забезпечення Gmsh.

Розглянуто формулювання лінійних і нелінійних співвідношень для визначення параметрів структурної механіки на основі енергетичних потенціалів та силових коефіцієнтів молекулярної механіки. Формулювання нелінійної задачі дістали певного уточнення в частині визначення співвідношень «узагальнена деформація – узагальнені напруження».

Розроблено числові моделі для дослідження модуля пружності нанотрубок різного типорозміру, що представляють собою макроси на мові програмування APDL ANSYS Mechanical APDL. Результати порівняння отриманих результатів показали задовільне узгодження з теоретичними та експериментальними даними: розбіжність з відомими теоретичними оцінками становить 0,08–5,1 %.

Запропоновані верифіковані числові методики для визначення модуля пружності нанотрубок у подальшому планується застосовувати для розроблення нових полімерних нанокомпозитів.

Ключові слова: модуль пружності, одношарові вуглецеві нанотрубки, молекулярна механіка, структурна механіка, числове моделювання.

Вступ

Вуглецеві нанотрубки, до яких належать одношарові вуглецеві нанотрубки (ОВНТ)/(SWCNT), з моменту їх відкриття в 1991 р. Іїїма [1], набули широкого застосування в різних галузях науки і техніки. Завдяки своїм унікальним механічним, тепловим та електричним властивостям ОВНТ характеризуються виключно високою жорсткістю, міцністю і пружністю, і зазвичай використовуються як ідеальний армувальний матеріал для нового класу нанокомпозитів [2], у тому числі й полімерних.

Для дослідження фізичних властивостей ОВНТ, зокрема механічних, застосовуються як експериментальні, так і теоретичні методи. Експериментальні методи, що базуються на просвічувальній електронній та атомно-силовій мікроскопії [3, 4], характеризуються надзвичайною складністю проведення досліджень, розбіжністю одержуваних даних, великою вартістю тощо. Тому застосування теоретичних методів для прогнозування механічних властивостей ОВНТ, які є набагато менш затратними, набуває широкого поширення серед дослідників як потужний альтернативний інструмент порівняно з експериментальними методами [5–13]. У свою чергу застосовувані теоретичні методи поділяються на два підходи: перший – це квантова/молекулярна механіка (ММ) [5], класична молекулярна динаміка [6] і *ab initio* [7]; другий – механіка суцільного середовища з використанням енергетичних потенціалів і силових коефіцієнтів ММ [8–13]. Наразі, для моделювання наноструктур у великих масштабах, що мають практичне значення, наприклад, під час розробки нових нанокомпозитів, безперечно перевагу має підхід наномасштабної континуальної (КМ) або структурної механіки (СМ), у частині незрівнянно менших вимог до обчислювальних ресурсів [10].

Зазвичай числова реалізація континуального підходу до прогнозування механічних властивостей ОВНТ виконується методом скінченних елементів (МСЕ) з використанням пружинних (spring) або стрижньових/балочних (beam) скінченних елементів (СЕ) у лінійному або нелінійному формулюванні. При цьому вважається, що під навантаженням ОВНТ проявляє властивості просторово-стрижньової структури.

Ковалентні зв'язки між атомами вуглецю розглядаються як з'єднувальні силові елементи, а атоми вуглецю – як шарніри цих елементів.

Проблемі прогнозування механічних властивостей ОБНТ на базі континуального підходу присвячена велика кількість праць. Розглянемо декілька найбільш характерних з них. У працях [8–10] для прогнозування модуля пружності та зсуву ОБНТ використовуються лінійні формулювання МСЕ. Зокрема, у праці Li та Chou [8] до моделювання деформації вуглецевих нанотрубок вперше запропоновано застосування наближення структурної механіки на базі методу матриці жорсткості. Основою запропонованої концепції є уявлення про те, що нанотрубка з геометричної точки зору представляє собою просторово-каркасну структуру. При цьому ковалентні зв'язки між двома найближчими сусідніми атомами мають круглий поперечний переріз і діють як несучі балочні елементи, тоді як окремих атом виконує функцію шарнірного з'єднання цих елементів. Лінійний зв'язок між трьома параметрами жорсткості перерізу балочного елемента структурної механіки та силовими константами молекулярної механіки встановлюється на основі принципу енергетичної еквівалентності за припущення малих деформацій. Такий підхід не потребує визначення модулів пружності і зсуву, діаметру колового перерізу балочних СЕ, еквівалентних до зв'язків С–С. Параметри жорсткості визначались за таких значень силових констант ММ для ковалентного зв'язку С–С: $k_r = 651,694$ нН/нм – силова константа опору розтягу; $k_\theta = 0,875$ нН·нм/рад² – силова константа опору вигину; $k_t = 0,278$ нН·нм/рад² – силова константа опору скручуванню та інверсії. Довжина ковалентного зв'язку С–С у стані спокою як і в інших роботах приймалася рівною $L = 0,1421$ нм. Розрахунки механічних властивостей ОБНТ за умови одновісного навантаження виконано для різних їх діаметрів, але тільки для зигзагоподібних та крісельних нанотрубок. Отримані результати узгоджуються з відповідними теоретичними даними та експериментальними вимірюваннями. Крім того, у зазначеній праці не вказано з використанням якого програмного забезпечення виконано розрахунки. Із тексту статті також не зрозуміло, які саме довжини ОБНТ використовувалися в розрахунках.

У праці Tserpes і Papanikos [9], що побудована на концепції Li та Chou [8], пропонується тривимірна модель скінченного елемента (СЕ) для крісельних, зигзагоподібних і хіральних ОБНТ. На відміну від підходу матриці жорсткості [8], модель СЕ потребує явного визначення значень модулів пружності E і зсуву G , моментів інерції I і J та відповідно діаметра d і площі перерізу A балочних елементів, які не мають фізичного змісту для ковалентного зв'язку С–С, оскільки в теорії молекулярної механіки вони відсутні. Значення силових констант ММ приймалися такими самими як у [8], яким відповідають такі значення діаметра та модулів пружності і зсуву балочного СЕ: $d = 0,147$ нм, $E = 5,49$ ТПа, $G = 0,871$ ТПа. Для розробки числових моделей структурної механіки ОБНТ використано програмний продукт ANSYS Mechanical APDL [14] і пружний лінійний СЕ BEAM4. Серія розрахунків механічних властивостей включала крісельні, зигзагоподібні та хіральні ОБНТ за різного діаметра та товщини нанотрубок. Отримані значення модуля пружності ОБНТ добре узгоджуються з відповідними теоретичними результатами і багатьма експериментальними вимірюваннями. Однак, із тексту статті не зрозуміло, чому момент інерції СЕ рекомендується визначати не за

формулою $I = \frac{\pi d^4}{64}$, а із співвідношення $k_\theta = \frac{EI}{L}$, що пов'язує параметри молекулярної та структурної

механіки. Тим більше, що, величина E в останній формулі визначається з використанням першої, тому розраховані за допомогою цих формул моменти інерції будуть еквівалентними між собою.

У статті Lu і Hu [10] використовується схожий до [6, 9] еквівалентно-континуальний підхід до визначення механічних властивостей ОБНТ, але замість колової форми електронної хмари перерізу ковалентного зв'язку С–С прийнято еліптичну, що не має точного підтвердження в літературі, на чому вони до речі наголошують самі. При цьому не зрозуміло, на якій підставі отримано геометричні та механічні параметри еквівалентного балочного СЕ еліптичного перерізу, зокрема, модуль пружності $E = 1,027$ ТПа, що більш ніж у п'ять разів менший, ніж у [9]. У цій праці також наведено нелінійні залежності і графіки модифікованого потенціалу Morse $U_r(\Delta r)$ та потенціальної енергії опору вигину ковалентного зв'язку С–С $U_\theta(\Delta\theta)$, але вони явно не використовуються, оскільки отримані в праці числові результати базуються на лінійному формулюванні МСЕ з використанням винятково силових констант ММ k_r і k_θ . Потенціал Morse використовується тільки для

визначення силової константи опору розтягу зв'язку С–С як $k_r = \frac{1}{\Delta r} \frac{dU_r}{d(\Delta r)}$ (за малих значень Δr), а силова

константа опору вигину k_θ взята зі статті Belytschko et al. [15]. Для виконання розрахунків використано програмне забезпечення ANSYS [14] і СЕ BEAM з шістьма ступенями свободи, але не вказано який саме номер. Наведено числові дослідження впливу діаметра й хіральності на модулі пружності і зсуву ОБНТ, результати яких узгоджуються як з експериментальними випробуваннями, так і з теоретичними літературними даними.

Стаття Meo і Rossi [11] присвячена побудові числової СЕ моделі для оцінки механічних властивостей ОБНТ на основі використання (spring) СЕ з шістьма ступенями свободи, в яких поєднуються властивості нелінійної пружної пружини і лінійної пружної торсіонної пружини. Вибір цих СЕ ґрунтується на тому, що

такий підхід дає змогу описати взаємодію зв'язків C–C без введення будь-яких нефізичних змінних, таких як площа поперечного перерізу, моменти інерції тощо. Крім того автори [11] стверджують, що SE типів beam, link або shell не надто застосовні через складну взаємодію атомів і відсутність обертових ступенів свободи. Але такі обмеження не стосуються, наприклад, beam-елементів ANSYS. Поєднання в SE властивостей нелінійної і торсіонної пружин дало змогу врахувати те, що хімічний зв'язок незалежно від прикладеного навантаження завжди лишається прямим [16], тобто нехтувати його вигином. Для моделювання нелінійної поведінки під час розтягу зв'язку C–C використовувався модифікований потенціал Morse у вигляді сили $F(\Delta r) = dU_r(\Delta r)/d(\Delta r)$, а лінійної поведінки під час вигину – потенціал кута вигину зв'язку C–C–C у вигляді моменту $M(\Delta\theta) = dU_\theta(\Delta\theta)/d(\Delta\theta)$. Силова константа опору вигину k_θ також як і в [10] бралася зі статті Belytschko et al. [15]. Але в праці не враховувались потенціальна енергія зміни кута скручування ковалентного зв'язку C–C та інверсії атомів поза площиною, сили van der Waals та сили електростатичної взаємодії. Для прогнозування модуля пружності застосовано ANSYS [14], але не описано який саме SE обрано або побудовано. Досліджено вплив діаметра трубки і хіральності на модуль пружності ОБНТ за одновісного навантаження. Отримані результати показали добре узгодження з наявними експериментальними даними.

Стаття Rossi і Meo [12] є застосуванням методик [11] для розрахунків механічних властивостей, включаючи границю міцності, бездефектних та дефектних ОБНТ різних типів. Зокрема досліджено еволюцію руйнування зигзагоподібних ОБНТ, а також побудовано криві напруження-деформація для деформації до 70 %.

У статті Esbati і Irani [13] методика нелінійного формулювання МСЕ на базі модифікованої функції потенціалу Morse, що викладена в [11, 12], отримала подальший розвиток у частині врахування потенціальної енергії зміни кута скручування ковалентного зв'язку C–C та інверсії атомів поза площиною та використання нелінійної залежності потенціальної енергії зміни кута між ковалентними зв'язками C–C–C. Для числового аналізу механічної поведінки ОБНТ використано програмне забезпечення ANSYS Mechanical APDL [14] з нелінійним тривузловим SE BEAM189 з шістьма ступенями свободи. Нелінійні властивості еквівалентного балочного SE задавалися у вигляді табличних функцій деформація–напруження в розділі “Nonlinear General Beam Section” вказаного ПЗ. Для визначення моменту зміни кута між ковалентними зв'язками C–C–C силова константа опору вигину ММ становила 1,42 нН·нм/рад², а для крутного момент ковалентного зв'язку C–C відповідна силова константа – 0,278 нН·нм/рад². Спрогнозовано механічні властивості різних типів ОБНТ, а також досліджено вплив різних типів дефектів Stone-Wales на механічну поведінку ОБНТ. Встановлено, що розглянуті дефекти знижують механічні властивості ОБНТ під час одновісного розтягу. Однак, у [13] підгінний параметр β , що входить у формулу функції потенціалу Morse, є безрозмірним, а за величиною відрізняється від [10–12, 15]. У статті також наведено деякі величини без їх розшифрування та формули без їх подальшого явного використання.

Із проведеного літературного огляду випливає, що загальним недоліком розглянутих праць, у яких використовується програмне забезпечення ANSYS Mechanical APDL, є відсутність опису налаштування параметрів SE, наприклад, у GUI Menu Path, Section>Beam..., що дещо ускладнює процес розуміння методик, відтворюваності проведених досліджень та перевірки наведених результатів. Очевидно, що найпростішим варіантом реалізації методів структурної механіки на наномасштабному рівні є числова методика, що передбачає явне визначення параметрів поперечного перерізу еквівалентного до ковалентного зв'язку C–C балочного SE [9, 10].

Для розробки нових армованих нанотрубками нанокомпозитів з використанням методів наномасштабної структурної механіки, що базуються на теоретичних засадах молекулярної механіки, найбільшого значення мають не отримані дані з механічних властивостей ОБНТ, а числові методики як потужний інструмент їх теоретичного прогнозування. Тому саме завдання оволодіння цим інструментом і є головною метою цієї статті.

Постановка задачі

Мета роботи – відпрацювання та перевірка числових методик визначення модуля пружності ОБНТ з використанням МСЕ та зв'язку між параметрами ММ і СМ, що є необхідним для подальшого їх застосування для розробки нових нанокомпозитів.

Для досягнення сформульованої мети необхідно вирішити такі задачі:

- побудова просторово-каркасних моделей ОБНТ різної хіральності;
- формулювання лінійних та нелінійних співвідношень для визначення параметрів структурної механіки на основі енергетичних потенціалів і силових коефіцієнтів молекулярної механіки;
- розробка числових моделей для дослідження модуля пружності ОБНТ різної хіральності та діаметра;
- порівняння отриманих результатів механічних властивостей ОБНТ з відомими теоретичними та експериментальними даними.

Побудова просторово-каркасних моделей ОБНТ

Одним із способів побудови просторово-каркасних моделей ОБНТ є метод згортання гексагональної структури графенового листа [2] (рис. 1).

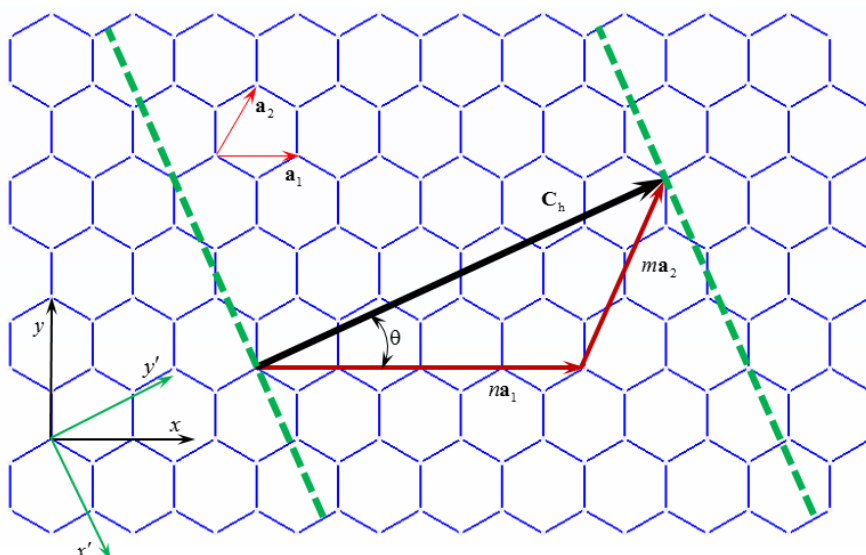


Рис. 1. Структура і геометричні параметри гексагональної решітки графенового листа

Співвідношення для визначення основних геометричних параметрів ОВНТ [2, 3] згідно з рис. 1 містять:

– хіральний вектор

$$\mathbf{C}_h = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2, \quad (1)$$

де (n, m) – індекси хіральності; $\mathbf{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right)a$, $\mathbf{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right)a$ – одиничні базисні вектори гексагональної

решітки; $a = \sqrt{3}a_{C-C}$ – довжина одиничного вектора; $a_{C-C} = 0,1421$ нм – довжина ковалентного зв'язку С-С у стані рівноваги;

– довжину кола ОВНТ

$$L = |\mathbf{C}_h| = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm}; \quad 0 \leq |m| \leq n; \quad (2)$$

– діаметр ОВНТ

$$d = \frac{L}{\pi}; \quad (3)$$

– хіральний кут

$$\theta = \arctg\left(\frac{\sqrt{3}m}{2n+m}\right); \quad 0 \leq |\theta| \leq 30^\circ. \quad (4)$$

Індекси хіральності однозначно визначають тип ОВНТ. Так, наприклад, структура з (n, n) характеризує нанотрубку типу «крісло» ОВНТ (armchair), а структура $(n, 0)$ – нанотрубку типу «зигзаг» ОВНТ (zigzag). У разі $0 \leq |m| \leq n$ утворюється структура (n, m) типу «хіральна» ОВНТ (chiral). Тип ОВНТ також однозначно визначається хіральним кутом (4): $\theta = 0^\circ$ – «зигзаг» ОВНТ, $\theta = 30^\circ$ – «крісло» ОВНТ, $0^\circ < \theta < 30^\circ$ – «хіральна» ОВНТ.

Як вище зазначено, одним із можливих способів побудови ОВНТ усіх трьох типів є метод згортання листа графену (рис. 1) у напрямку хірального вектора \mathbf{C}_h . При цьому перерахунок координат атомів вуглецю решітки графену на решітку ОВНТ здійснюється за формулою [4]

$$(X, Y, Z) = \left[R \cos\left(\frac{y'}{R}\right), R \sin\left(\frac{y'}{R}\right), x' \right], \quad (5)$$

де X, Y, Z – декартові координати атомів нанотрубки; $R = d/2$ – радіус нанотрубки; $x' = x \cos \theta + y \sin \theta$, $y' = -x \sin \theta + y \cos \theta$ – координати атомів листа графену в повернутій на хіральний кут θ декартовій системі координат $y'Ox'$ (рис. 1); x, y – вихідні декартові координати атомів листа графену.

З використанням залежностей (1)–(5) розроблено програмний код на мові програмування С у середовищі вільно відкритого програмного забезпечення Gmsh [5]. Результати побудови каркасно-просторових моделей ОВНТ різних типів, діаметра й довжини наведено на рис. 2.

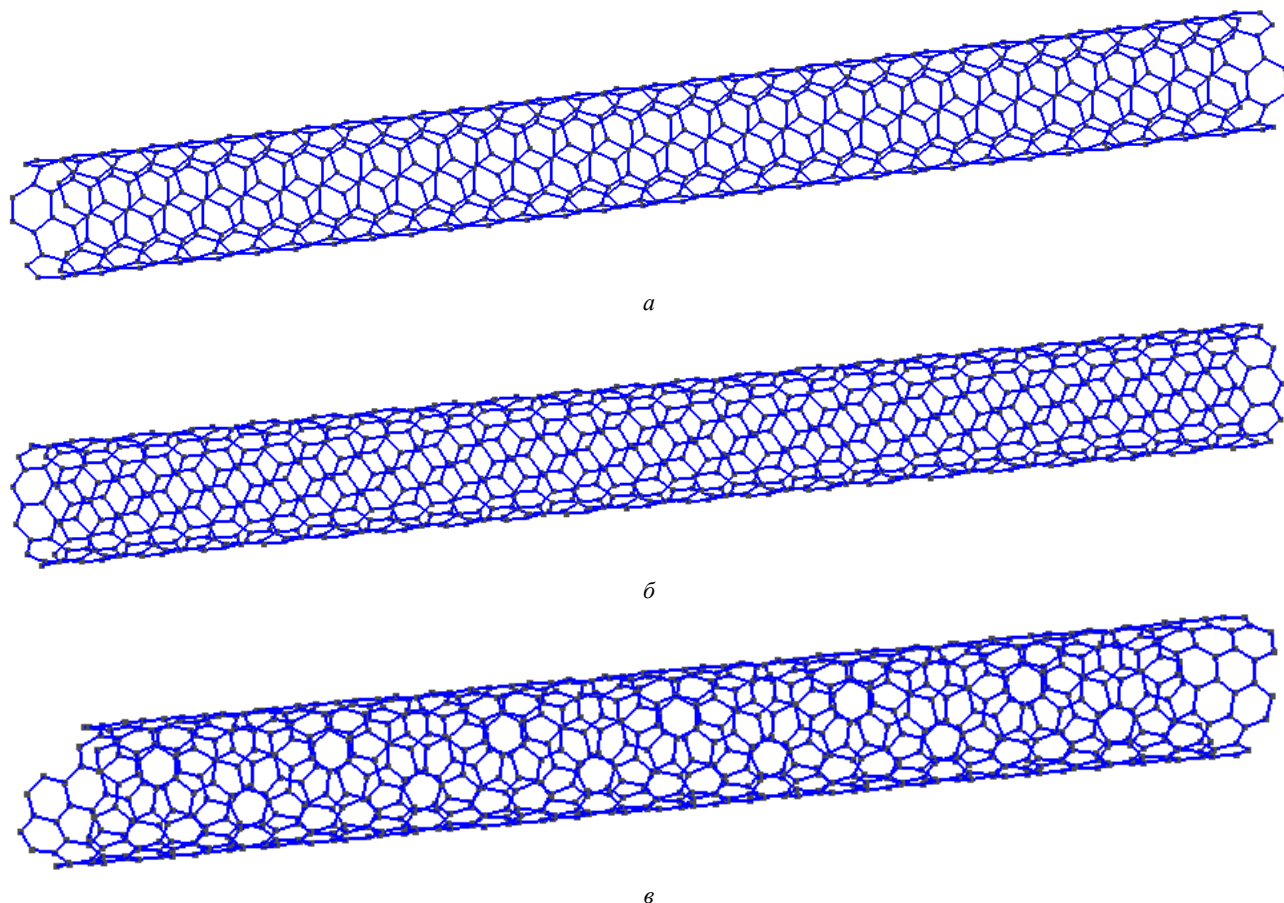


Рис. 2. Просторово-каркасні моделі різних типів ОВНТ:

a – кріслоподібна ОВНТ (armchair, (5,5)) діаметром $d = 0,678$ нм і довжиною $l = 7,753$ нм;

б – зигзагоподібна ОВНТ (zigzag, (10,0)), $d = 0,783$ нм і $l = 8,597$ нм;

в – хіральна ОВНТ (chiral, (8,4)), $d = 0,829$ нм і $l = 7,895$ нм

Формулювання нелінійної задачі на базі потенціалу Morse

Відомо, що для прогнозування механічних властивостей нанотрубок використовується теорія молекулярної механіки. Згідно з цією теорією за відсутності сил van der Waals та електростатичної взаємодії повна стерична потенціальна енергія, обумовлена валентністю зв'язаних взаємодій, має вигляд [10–13]

$$U_{\text{total}} = U_r + U_\theta + U_\tau. \quad (6)$$

Потенціальна енергія розтягу ковалентного зв'язку двохатомних молекул описується модифікованою функцією потенціалу Morse з параметрами для гібридизованих зв'язків sp^2 , отриманої на основі експериментальних даних, має вигляд

$$U_r = D_e \left\{ \left[1 - e^{-\beta(\Delta r)} \right]^2 - 1 \right\}, \quad (7)$$

де $D_e = 0,6031$ нН·нм – енергія дисоціації; $\beta = 26,25$ нм⁻¹ – підгінний параметр; Δr – зміна довжини ковалентного зв'язку типу С–С, нм.

Потенціальна енергія зміни кута між ковалентними зв'язками С–С–С описується співвідношенням

$$U_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\Delta\theta)^2 \left[1 + k_{\text{sextic}} (\Delta\theta)^4 \right], \quad (8)$$

де k_θ – силова константа опору зміни кута між ковалентними зв'язками С–С–С, нН·нм/рад²; $k_{\text{sextic}} = 0,754$ рад⁻⁴; $\Delta\theta$ – зміна кута між ковалентними зв'язками С–С–С, рад.

Потенціальна енергія зміни кута скручування ковалентного зв'язку С–С (U_ϕ) та інверсії атомів поза площиною (U_ω)

$$U_\tau = U_\phi + U_\omega = \frac{1}{2} k_\tau (\Delta\phi)^2, \quad (9)$$

де k_r – силова константа опору зміни кута скручування ковалентного зв'язку С–С та інверсії атомів поза площиною, нН·нм/рад²; $\Delta\varphi$ – зміна кута скручування зв'язку С–С, рад.

У результаті диференціювання залежностей (7)–(9) здійснюється перехід від енергетичних параметрів молекулярної механіки до силових характеристик структурної механіки, таких як сила розтягу ковалентного зв'язку С–С, момент зміни кута між зв'язками С–С–С і крутний момент зв'язку С–С, відповідно:

$$F(\Delta r) = \frac{dU_r}{d(\Delta r)} = 2\beta D_e [1 - e^{-\beta(\Delta r)}] e^{-\beta(\Delta r)}, \quad (10)$$

$$M(\Delta\theta) = \frac{dU_\theta}{d(\Delta\theta)} = k_\theta \Delta\theta [1 + 3k_{\text{sextic}}(\Delta\theta)^4], \quad (11)$$

$$T(\Delta\varphi) = \frac{dU_\tau}{d(\Delta\varphi)} = k_\tau \Delta\varphi. \quad (12)$$

Для подальшого використання рівнянь (10)–(12) їх необхідно виразити відносно відповідних деформацій:

$$F(\varepsilon_r) = 2\beta D_e [1 - e^{-\beta(\varepsilon_r L)}] e^{-\beta(\varepsilon_r L)}, \quad (13)$$

$$M(\varepsilon_\theta) = k_\theta \varepsilon_\theta \theta [1 + 3k_{\text{sextic}}(\varepsilon_\theta \theta)^4], \quad (14)$$

$$T(\varepsilon_\tau) = k_\tau (\varepsilon_\tau \varphi), \quad (15)$$

де $\varepsilon_r = \Delta r/L$ – деформація розтягу ковалентного зв'язку С–С; $L = 0,1421$ нм – довжина ковалентного зв'язку С–С; $\varepsilon_\theta = \Delta\theta/\theta$ – деформація вигину ковалентного зв'язку С–С–С; $\theta = 0,7$ рад; $\varepsilon_\tau = \Delta\varphi/\varphi$ – деформація скручування ковалентного зв'язку С–С; $\varphi = 0,7$ рад.

Для завершення формулювання задачі необхідно також визначити співвідношення між зсувним поперечним зусиллям S і деформацією поперечного зсуву ε_s , що буде розглянуто далі.

Формулювання лінійної задачі

Постановка лінійної задачі статичної пружності передбачає використання квадратичних форм для потенціальних функцій ММ [8–10] разом з теорією балок Тимошенко першого порядку СМ [14], що дає змогу встановити зв'язок між параметрами жорсткості перерізу балки структурної механіки та константами силового поля молекулярної механіки:

$$U_r = \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2, \quad (16)$$

$$U_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\Delta\theta)^2, \quad (17)$$

$$U_\tau = \frac{1}{2} k_\tau (\Delta\varphi)^2, \quad (18)$$

$$U_A = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} (\Delta L)^2, \quad (19)$$

$$U_M = \frac{1}{2} \frac{EI}{L} (2\alpha)^2, \quad (20)$$

$$U_T = \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} (\beta)^2, \quad (21)$$

де k_r – силова константа опору розтягу ковалентного зв'язку С–С, нН/нм; U_A – енергія деформації однорідної балки (стрижня) довжиною L під час чисто осевого навантаження, Дж; E – модуль пружності, Па; ΔL – осьова деформація балки, м; A – площа перерізу балки, м²; U_M – енергія деформації однорідної балки під час чистого вигину від прикладеного моменту, Дж; $I = I_{yy} = I_{zz}$ – момент інерції перерізу балки колового перерізу, м⁴; α – кут вигину на кінцях балки, рад; U_T – енергія деформації однорідної балки під час чистого скручування, Дж; G – модуль зсуву, Па; J – полярний момент інерції, м⁴.

Зв'язок між молекулярною і структурною системами встановлюється на основі принципу енергетичної еквівалентності між відповідними величинами у рівняннях (16)–(18) і (19)–(21) [8–10]. Це передбачає рівність між собою таких величин як $U_r = U_A$, $U_\theta = U_M$, $U_\tau = U_T$, $\Delta r = \Delta L$, $\Delta\theta = 2\alpha$ і $\Delta\varphi = \beta$, та дає змогу отримати

прямі співвідношення між параметрами структурної механіки EA, EI, GJ і параметрами молекулярної механіки: k_r, k_θ, k_τ (між балочним елементом і ковалентним зв'язком С–С ОБНТ) [8–10]:

$$k_r = \frac{EA}{L}, \quad k_\theta = \frac{EI}{L}, \quad k_\tau = \frac{GJ}{L}. \quad (22)$$

Для колового перерізу балки (зв'язку С–С) діаметром d параметри січення визначаються за такими формулами: $A = \frac{\pi d^2}{4}$ – площа, м², $I = \frac{\pi d^4}{64}$ – момент інерції, м⁴ і $J = \frac{\pi d^4}{32}$ – полярний момент інерції, м⁴. Тоді, використовуючи рівняння (22) і силові константи ММ можна визначити діаметр зв'язку С–С та ефективні модулі пружності та зсуву [9, 10]:

$$d = 4 \sqrt{\frac{k_\theta}{k_r}}, \quad E = \frac{k_r^2 L}{4\pi k_\theta}, \quad G = \frac{k_r^2 k_\tau L}{8\pi k_\theta^2}. \quad (23)$$

Умови проведення розрахунків модуля пружності нанотрубок та їх результати

Числова оцінка модуля пружності ОБНТ різних типів виконувалася на базі одновісного випробування та програмного забезпечення ANSYS Mechanical APDL [14] з використанням лінійних і нелінійних СЕ балочного типу кругового перерізу, що базуються на теорії Тимошенко. При цьому для переходу на наномасштабний рівень використовувався множник 10^9 . Для перевірки коректності застосування цих СЕ виконувалась оцінка коефіцієнта гнучкості $\frac{GAL^3}{EI} > 1000$ [14], який для ОБНТ набагато більший за 1000, де $L = 0,1421$ нм – довжина СЕ балочного типу (ковалентного зв'язку С–С). Для реалізації умов одновісного навантаження один кінець ОБНТ піддавався закріпленню за шістьма ступенями свободи, а другий – одновісній деформації та закріпленню за двома іншими координатами. Для побудови каркасно-просторових моделей ОБНТ різних типів, задання типу СЕ, фізичних властивостей, граничних умов та виконання розрахунків в автоматичному режимі розроблено відповідні макроси на мові програмування APDL ANSYS. Однак, для побудови геометричних моделей ОБНТ також можна використовувати програмне забезпечення Gmsh [5] (рис. 2) і записувати спеціальний текстовий файл з інформацією про лінії з номерами та координатами їхніх точок, які далі потім підставляти в макрос APDL ANSYS. Після виконання розрахунків модуль пружності розраховувався за формулою [8–13]

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon}, \quad (24)$$

де $\sigma = \frac{F}{A}$ – нормальне напруження, нПа; F – повна сила реакції опори, нН; $A = \pi Dt$ – площа перерізу ОБНТ, нм²; D – середній діаметр ОБНТ, нм; $t = 0,34$ нм – товщина стінки ОБНТ; $\varepsilon = \frac{\Delta l}{l}$ – одновісна деформація; $\Delta l = 0,1$ нм – абсолютна одновісна деформація; l – довжина нанотрубки, нм.

Розв'язання лінійних задач статичної пружності з метою оцінки модуля пружності ОБНТ виконувалися за даними статей [9, 10]. Згідно з [9] силовим константам молекулярної механіки ($k_r = 651,694$ нН/нм, $k_\theta = 0,875$ нН·нм/рад², $k_\tau = 0,278$ нН·нм/рад²) відповідають такі значення параметрів структурної механіки (23): $d = 0,147$ нм, $E = 5,49$ ТПа, $G = 0,871$ ТПа, $A = 0,0169$ м², $I = I_{zz} = I_{yy} = 0,226 \cdot 10^{-4}$ м⁴, $J = 0,453 \cdot 10^{-4}$ м⁴. СЕ–BEAM4 – лінійний, двовузловий. Геометричні параметри цього СЕ встановлюються командою APDL – Real Constant, якою задаються A , I_{zz} , I_{yy} , товщина СЕ вздовж осей Z і Y , J . Фізичні властивості СЕ, а саме ефективні модулі пружності та зсуву, задаються командою APDL – MP. Тип аналізу – Static. Геометричні параметри каркасно-просторових моделей ОБНТ різних типів, параметри їх дискретизації та результати числової оцінки модулів пружності за даними [9] наведено в табл. 1 і на рис. 3.

Відповідно до силових констант молекулярної механіки [10] ($k_r = 786$ нН/нм, $k_\theta = 0,901$ нН·нм/рад²) і коефіцієнта Пуассона $\nu = 0,0344$ значення параметрів структурної механіки становлять: $d = 0,135$ нм, $E = 7,754$ ТПа, $G = 3,4748$ ТПа, $A = 0,0144$ м², $I = I_{zz} = I_{yy} = 0,165 \cdot 10^{-4}$ м⁴, $J = 0,33 \cdot 10^{-4}$ м⁴. За СЕ обрано BEAM188, який є також лінійним і двовузловим. Геометричні параметри цього СЕ задаються в GUI Menu Path через Sections>Beam>Common Sections>User Section, або встановлюються командами APDL – SECTYPE, SECOFFSET і SECDATA. Останньою командою задаються такі величини як A , I_{zz} , I_{yy} , J , товщина СЕ вздовж осей Z і Y . Фізичні властивості СЕ, також як і в [9], задаються командою APDL – MP.

Тип аналізу–Static. Результати числової оцінки модулів пружності ОБНТ різних типів за даними [10] наведено в табл. 1, 2 і на рис. 4.

Розв’язання нелінійної задачі на базі потенціалу Morse виконувалось для таких значень силових констант молекулярної механіки [13]: $k_\theta = 1,42 \text{ нН}\cdot\text{нм}/\text{рад}^2$, $k_\phi = 0,278 \text{ нН}\cdot\text{нм}/\text{рад}^2$. За СЕ обрано BEAM189, який є нелінійним і тривузловим. Згідно з [14] для задання нелінійної поведінки СЕ використовується узагальнений поперечний переріз балочного елемента, за якого співвідношення між узагальненою деформацією та узагальненим напруженням вводяться безпосередньо. При цьому ані геометричні властивості балочного СЕ, ані механічні властивості матеріалу не вказуються явно. Під узагальненим напруженням мають на увазі осьову силу, момент вигину, крутний момент та поперечні зсувні зусилля, а під узагальненою деформацією відповідно розуміють осьову деформацію, кривизну вигину, кривизну скручування і деформацію поперечного зсуву, відповідно. На відміну від [13], у [14] наведено більш загальну форму співвідношень між узагальненим напруженням і узагальненою деформацією балочного елемента, яка для випадку ОБНТ набуває вигляду:

$$\begin{bmatrix} F \\ M \\ M \\ T \\ S \\ S \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} AE(\epsilon_r) & & & & & \\ & IE(\epsilon_\theta) & & & & \\ & & IE(\epsilon_\theta) & & & \\ & & & JG(\epsilon_\tau) & & \\ & & & & AG(\epsilon_s) & \\ 0 & & & & & AG(\epsilon_s) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_r \\ \epsilon_\theta \\ \epsilon_\theta \\ \epsilon_\tau \\ \epsilon_s \\ \epsilon_s \end{bmatrix}, \quad (25)$$

Графіки зміни осьової сили залежно від осьової деформації, моменту вигину від кривизни вигину, крутного моменту від кривизни скручування, що використовуються під час розрахунків, наведено на рис. 5. Оскільки в [13] інформація про залежність між зсувним поперечним зусиллям S і деформацією поперечного зсуву ϵ_s зовсім відсутня, то для оцінки залежності $S(\epsilon_s) = AG(\epsilon_s)\epsilon_s$ запропоновано використовувати $F(\epsilon_r) = AE(\epsilon_r)\epsilon_r$ за формулою (13) і відомі співвідношення між G і E вигляду $G = E/[2(1+\nu)]$, де $\nu = 0,0344$ [10] – коефіцієнт Пуассона.

Нелінійні співвідношення узагальнена деформація – узагальнені напруження (узагальнене поперечне січення балочного СЕ) для BEAM189 задаються в GUI Menu Path через Sections>Beam>NL Generalized, або встановлюються командами APDL – (SECTYPE, GENB,), BSAX, ϵ_r , $AE(\epsilon_r)$, BSM1, ϵ_θ , $IE(\epsilon_\theta)$, BSM2, ϵ_θ , $IE(\epsilon_\theta)$, BSTQ, ϵ_τ , $JG(\epsilon_\tau)$, BSS1, ϵ_s , $AG(\epsilon_s)$, BSS2, ϵ_s , $AG(\epsilon_s)$. Тип аналізу – Transient. Результати числової оцінки модулів пружності ОБНТ різних типів за даними [13] наведено в табл. 3 і на рис. 6–8.

Обговорення результатів

Аналіз літературних джерел з проблеми прогнозування механічних властивостей ОБНТ методами структурної механіки показав, що наявні теоретичні дані корелюються між собою і відповідають експериментальним дослідженням [2, 3, 8–13]. Однак, при цьому на прогнозовані механічні властивості ОБНТ значно впливає вибір потенціальних функцій ММ, значень силових констант, методики реалізації МСЕ, тип СЕ тощо. Наприклад, було помічено, що лінійні СЕ BEAM4 і BEAM188 за однакових геометричних параметрів і механічних властивостей дають різні результати.

Аналіз порівняння отриманих авторами цієї праці результатів досліджень модуля пружності ОБНТ з відповідними даними авторів інших праць у цілому показує задовільне узгодження як з теоретичними даними, так і експериментальними вимірюваннями (табл. 4). Розбіжність з теоретичними даними становить 0,08–5,1 %. Більшість з отриманих числових оцінок модуля пружності перебувають у діапазоні розкиду експериментальних даних, який складає 1–1,2 ТПа.

Найбільші відхилення в результатах спостерігаються для модуля пружності ОБНТ Zigzag [10] (рис. 4, табл. 4), отриманих із розв’язку лінійної задачі статичної пружності, і для ОБНТ Armchair і Zigzag [13] (рис. 6, 7 табл. 4), отриманих із розв’язку нелінійної задачі з використанням потенціалу Morse. З одного боку це може бути пов’язано з неповнотою інформації для однозначного відтворення результатів наведених у цих статтях, зокрема, відсутністю опису налаштування параметрів СЕ лінійної задачі, браку функціональних залежностей для задання узагальненого поперечного перерізу балочного СЕ нелінійної задачі тощо. З іншого боку це можуть бути явно не виявлені чинники, що стосується, наприклад, наведених у [10] завищених даних з модуля пружності ОБНТ Zigzag. Насправді, на відміну від даних [10], у статтях [8, 9, 11, 13] значення модуля пружності ОБНТ Zigzag близькі до значень ОБНТ Armchair для діаметрів більших за 1 нм, що також підтверджується даними, отриманими авторами цієї праці (рис. 3, 4).

Отримані результати дослідження та, зокрема, їх порівняння з літературними даними, дають підставу для їх подальшого застосування, наприклад, під час розроблення нових полімерних наноконкомпозитів.

Таблиця 1

Оцінка модуля пружності ОБНТ за даними [9], [10]

Тип ОБНТ	Хіральний індекс (n, m)	Діаметр d , нм	Довжина l , нм	Кількість СЕ/вузлів	Модуль пружності E , ТПа за даними [9]/[10]
Armchair	(3, 3)	0,407	12,675	930/624	1,0381/1,0181
	(5, 5)	0,678	12,675	1550/1040	1,0377/1,0167
	(8, 8)	1,086	12,675	2480/1664	1,0378/1,0164
	(10, 10)	1,357	12,675	3100/2080	1,0379/1,0165
	(12, 12)	1,628	12,675	3720/2496	1,0379/1,0166
	(15, 15)	2,035	12,675	4650/3120	1,0381/1,0167
(20, 20)	2,714	12,675	6200/4160	1,0382/-	
Середнє					1,038±0,0002/1,0168±0,0006
Zigzag	(5, 0)	0,392	12,647	895/600	0,9674/0,9689
	(8, 0)	0,627	12,647	1432/960	1,0098/0,9962
	(10, 0)	0,783	12,647	1790/1200	1,0204/1,0028
	(15, 0)	1,175	12,647	2685/1800	1,0312/1,0095
	(20, 0)	1,567	12,647	3580/2400	1,0351/1,0120
	(25, 0)	1,959	12,647	4475/3000	1,0369/1,0133
(30, 0)	2,350	12,647	5370/3600	1,0379/-	
Середнє					1,0198±0,025/1,0005±0,017
Chiral	(6, 2)	0,565	7,961	802/540	1,0346/-
	(6, 10)	1,097	8,546	1670/1124	1,0524/-
	(6, 16)	1,543	7,914	2174/1464	1,0555/-
	(6, 23)	2,077	8,277	3046/2050	1,0620/-
	(6, 29)	2,540	8,387	3770/2537	1,0644/-
Середнє					1,0538±0,012/-

Таблиця 2

Оцінка модуля пружності хіральної ОБНТ за даними [10]

Тип ОБНТ	Хіральний індекс (n, m)	Діаметр d , нм	Довжина l , нм	Кількість СЕ/вузлів	Модуль пружності E , ТПа
Chiral	(4, 2)	0,415	9,292	690/464	1,0155
	(8, 4)	0,829	8,164	1212/816	1,0247
	(12, 6)	1,244	8,164	1818/1224	1,0266
	(16, 8)	1,658	8,164	2424/1632	1,0276
	(20, 10)	2,073	8,164	3030/2040	1,0282
Середнє					1,0245±0,005

Таблиця 3

Оцінка модуля пружності ОБНТ за даними [13]

Тип ОБНТ	Хіральний індекс (n, m)	Діаметр d , нм	Довжина l , нм	Кількість СЕ/вузлів	Модуль пружності E , ТПа
Armchair	(8, 8)	1,086	7,261	1424/2384	1,0587
	(12, 12)	1,628	7,261	2136/3576	1,0587
	(15, 15)	2,035	7,261	2670/4470	1,0660
	(25, 25)	3,392	7,261	4450/7450	1,0717
Середнє					1,0638±0,006
Zigzag	(10, 0)	0,783	8,384	1190/1990	0,94118
	(12, 0)	0,940	8,384	1428/2388	0,94171
	(20, 0)	1,567	8,384	2380/3980	0,94270
	(30, 0)	2,350	8,384	3570/5970	0,94328
Середнє					0,9422±0,001
Chiral	(4, 2)	0,415	12,675	942/1574	0,9683
	(8, 4)	0,829	8,164	1212/2028	0,9729
	(12, 6)	1,244	8,164	1818/3042	0,9733
Середнє					0,9715±0,003

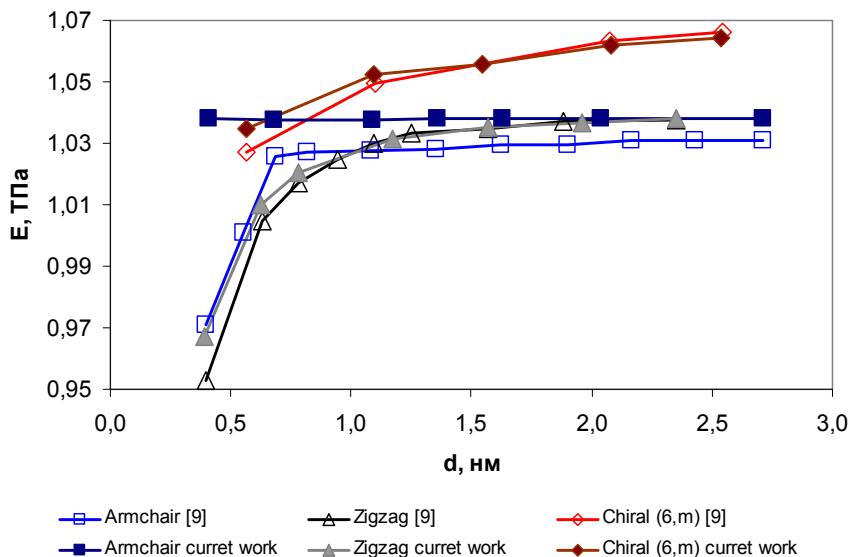


Рис. 3. Результати оцінки модуля пружності різних типів ОВНТ залежно від діаметра за даними [9]

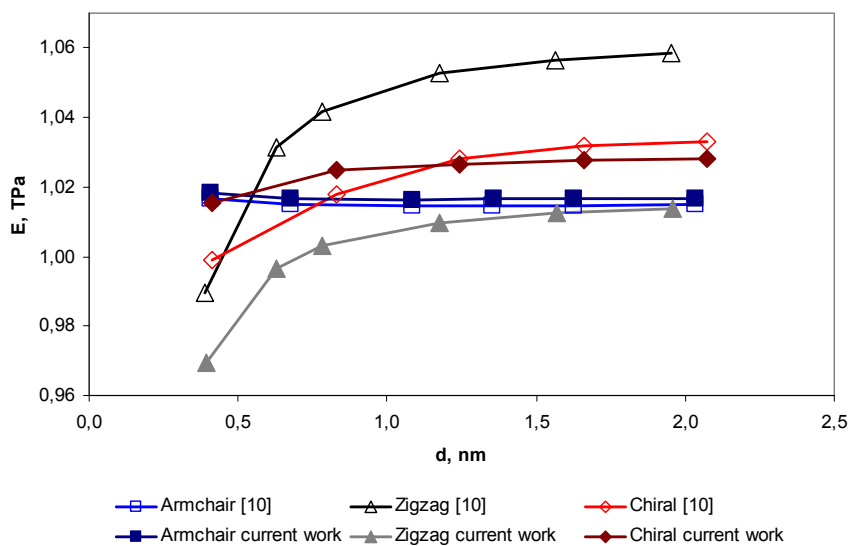


Рис. 4. Результати оцінки модуля пружності різних типів ОВНТ залежно від діаметра за даними [10]

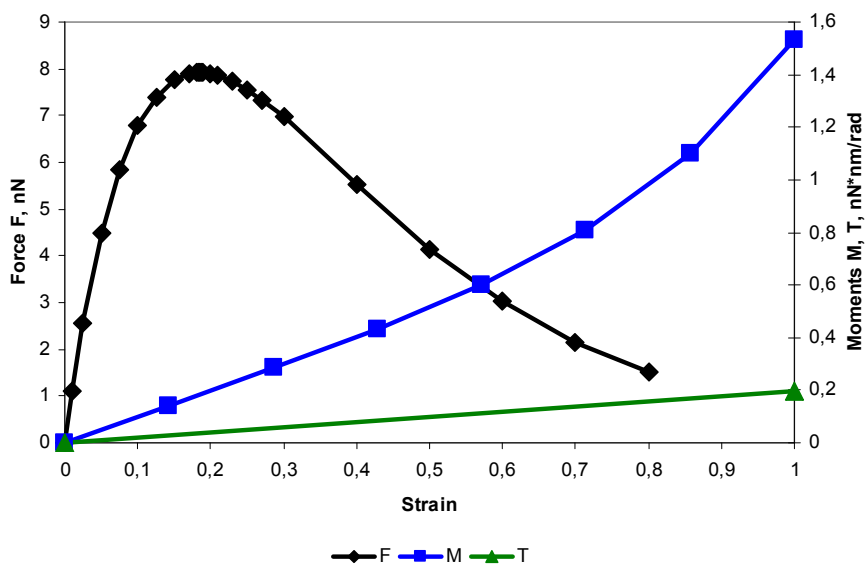


Рис. 5. Залежності між узагальненим напруженням та узагальною деформацією:
 $F(\epsilon_r) = AE(\epsilon_r)\epsilon_r - (13)$, $M(\epsilon_\theta) = IE(\epsilon_\theta)\epsilon_\theta - (14)$, $T(\epsilon_\tau) = AG(\epsilon_\tau)\epsilon_\tau - (15)$

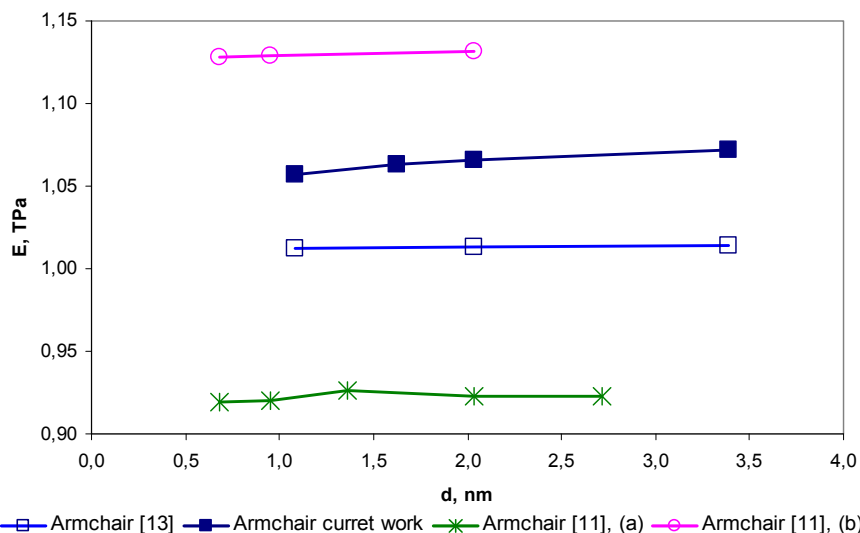


Рис. 6. Результати числової оцінки модуля пружності armchair ОВНТ залежно від діаметра за даними [13]:
 $a - k_{\theta} = 1,42 \text{ нН}\cdot\text{нм}/\text{рад}^2$, $b - k_{\theta} = 0,9 \text{ нН}\cdot\text{нм}/\text{рад}^2$

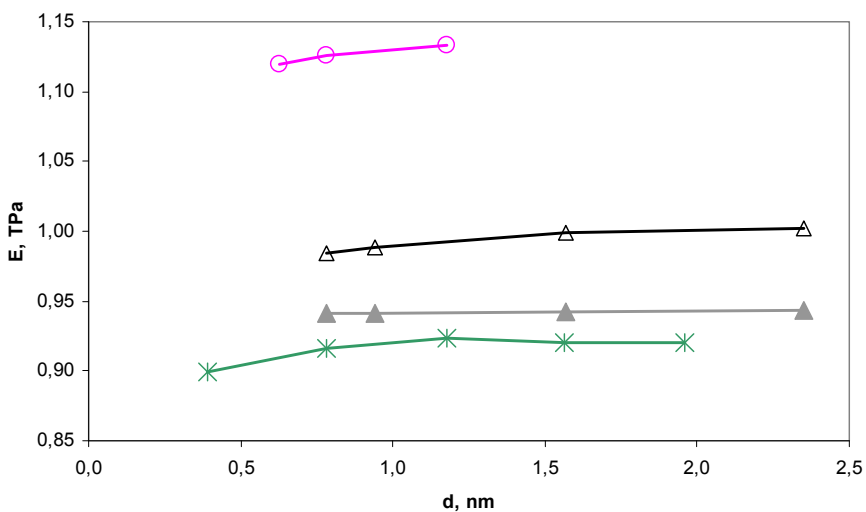


Рис. 7. Результати числової оцінки модуля пружності zigzag ОВНТ залежно від діаметра за даними [13]:
 $a - k_{\theta} = 1,42 \text{ нН}\cdot\text{нм}/\text{рад}^2$, $b - k_{\theta} = 0,9 \text{ нН}\cdot\text{нм}/\text{рад}^2$

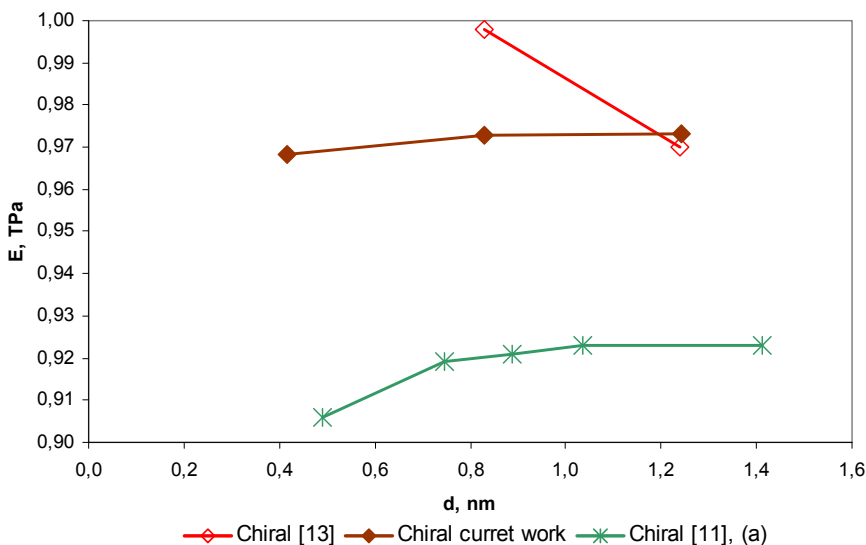


Рис. 8. Результати числової оцінки модуля пружності chiral ОВНТ залежно від діаметра за даними [13]:
 $a - k_{\theta} = 1,42 \text{ нН}\cdot\text{нм}/\text{рад}^2$

Порівняння середніх значень модуля пружності ОБНТ, отриманих різними дослідниками

Дослідник	Методика – СЕ	Потенціальна функція	Тип ОБНТ	Модуль пружності E , ТПа
Поточна робота/[9]	СМ – BEAM4	Силкові константи ММ	Armchair	1,038±0,0002/1,0211±0,019
			Zigzag	1,0198±0,025/1,0190±0,020
			Chiral	1,0538±0,012/1,0515±0,018
Поточна робота/[10]	СМ – BEAM188	Силкові константи ММ	Armchair	1,0168±0,0006/1,0152±0,0008
			Zigzag	1,0005±0,017/1,0383±0,026
			Chiral	1,0245±0,005/1,0219±0,0142
Поточна робота/[13]	СМ – BEAM189	Потенціал Morse	Armchair	1,0638±0,006/1,0145±0,0001
			Zigzag	0,9422±0,001/0,9932±0,001
			Chiral	0,9715±0,003/0,984±0,0005
[2]	Експеримент	–	–	1,002
[3]	Експеримент	–	–	1,2

Висновки

Результати аналізу проведених досліджень дають змогу зробити такі висновки.

1. Розроблено програмні коди для побудови просторово-каркасних моделей ОБНТ різної хіральності з використанням вільно відкритого програмного забезпечення Gmsh.
2. Розглянуто формулювання лінійних і нелінійних співвідношень для визначення параметрів структурної механіки на основі енергетичних потенціалів та силових коефіцієнтів молекулярної механіки. Формулювання нелінійної задачі дістали певного уточнення в частині визначення співвідношень узагальнена деформація – узагальнені напруження.
3. Розроблено числові моделі для дослідження модуля пружності ОБНТ різної хіральності та діаметра, що представляють собою макроси на мові програмування APDL ANSYS Mechanical APDL.
4. Результати порівняння отриманих результатів з механічних властивостей ОБНТ показали задовільне узгодження з теоретичними та експериментальними даними: розбіжність з відомими теоретичними оцінками становить 0,08–5,1 %; діапазон розкиду експериментальних даних 1–1,2 ТПа охоплює більшість з отриманих теоретичних результатів.
5. Верифіковані числові методики для визначення модуля пружності ОБНТ, що базуються на МСЕ та зв'язку між параметрами молекулярної і структурної механіки, у подальшому планується застосовувати для розроблення нових полімерних нанокомпозитів.

Об определении модуля упругости однослойных углеродных нанотрубок методами структурной механики

А.Я. Карвацкий, И.О. Микулёнок, Т.В. Лазарев, Е.Н. Короленко

Аннотация. Целью статьи является отработка и проверка числовых методик определения модуля упругости однослойных углеродных нанотрубок с использованием метода конечных элементов, а также связи между параметрами молекулярной и структурной механики.

Исследования проводились для нанотрубок различных типов пространственно-каркасных моделей, а именно типа "кресло" (armchair), типа "зигзаг" (zigzag) и типа "хиральная" (chiral). Для построения моделей нанотрубок указанных типов разработаны программные коды с использованием свободно открытого программного обеспечения Gmsh.

Рассмотрены формулировки линейных и нелинейных соотношений для определения параметров структурной механики на основе энергетических потенциалов и силовых коэффициентов молекулярной механики. Формулировка нелинейной задачи получила определённое уточнение в части определения соотношений "обобщённая деформация – обобщённые напряжения".

Разработаны численные модели для исследования модуля упругости нанотрубок различного типоразмера (хиральности и диаметра), представляющие собой макросы на языке программирования APDL ANSYS Mechanical APDL. Результаты сравнения полученных результатов показали удовлетворительное согласование с теоретическими и экспериментальными данными: расхождение с известными теоретическими оценками составляет 0,08–5,1 %.

Предложенные верифицированные численные методики для определения модуля упругости нанотрубок в дальнейшем планируется использовать для разработки новых полимерных нанокомпозитов.

Ключевые слова: модуль упругости, однослойные углеродные нанотрубки, молекулярная механика, структурная механика, числовое моделирование.

About definition of the elasticity module of single-walled carbon nanotubes by methods of structural mechanics

A.Ya. Karvatskii, I.O. Mikulionok, T.V. Lazarev, K.M. Korolenko

Abstract. The purpose of article is working off and check of numerical techniques of definition of the elasticity module of single-walled carbon nanotubes with use of a method of final elements, and also ties between parameters of molecular and structural mechanics.

Researches were conducted for nanotubes of various types of spatial and frame models, namely the armchair type, the zigzag type and the chiral type. Program codes with use of freely open software of Gmsh are developed for design of models of nanotubes of these types.

Formulations of linear and nonlinear ratios for determination of parameters of structural mechanics on the basis of energy potentials and power coefficients of molecular mechanics are considered. The formulation of a nonlinear problem received a certain specification regarding definition of ratios "the generalized deformation – the generalized tension".

The numerical models for research of the elasticity module of nanotubes of various dimension-types (chirality and diameter) representing macros in the APDL ANSYS Mechanical APDL programming language are developed. Results of comparison of the received results showed satisfactory coordination with theoretical and experimental data: the divergence with the known theoretical estimates makes 0.08–5.1 %.

The offered verified numerical techniques for definition of the elasticity module of nanotubes are planned to be used further for development of new polymeric nanocomposites.

Keywords: elasticity module, single-walled carbon nanotubes, molecular mechanics, structural mechanics, numerical modeling.

References

- Iijima, S. (1991), "Helical microtubules of graphitic carbon", *Nature, London*, no. 354, pp. 56-58. <https://doi.org/10.1038/354056a0>
- Lau, K.-T. and Hui, D. (2002), "The revolutionary creation of new advanced materials - carbon nanotube composites", *Composites Part B: Engineering*, vol. 33, pp. 263-277.
- Yu, M.-F., Lourie, O., and dr. (2000), "Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load," *Science*, vol. 287, no. 5453, pp. 637-640. <https://doi.org/10.1126/science.287.5453.637>
- Tomblor, T. W., Zhou, C. and dr. (2000), "Reversible electromechanical characteristics of carbon nanotubes under local-probe manipulation," *Nature*, vol. 405, no. 6788, pp. 769-772. <https://doi.org/10.1038/35015519>
- Bian, L. and Zhao, H. (2015), "Elastic properties of a single-walled carbon nanotube under a thermal environment," *Composite Structures*, vol. 121, pp. 337-343. <https://dx.doi.org/10.1016/j.compstruct.2014.11.032>
- Wenxing, B., Changchun, Z. and Wanzhao, C. (2004), "Simulation of Young's modulus of single-walled carbon nanotubes by molecular dynamics," *Physica B: Condensed Matter*, vol. 352, No. 1-4, pp. 156-163. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2004.07.005>
- Lier, G.V., Alsenoy, C.V., Doren, V.V. and Geerlings, P. (2000), "Ab initio study of the elastic properties of single-walled carbon nanotubes and grapheme", *Chemical Physics Letters*, vol. 326(1-2), pp. 181-185. [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(00\)00764-8](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(00)00764-8)
- Li, C. and Chou, T.-W. (2003), "A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes", *International Journal of Solids and Structures*, vol. 40, pp. 2487-2499. [https://doi.org/10.1016/S0020-7683\(03\)00056-8](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(03)00056-8)
- Tserpes, K.I. and Papanikos, P. (2005). "Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes", *Composites: Part B*, vol. 36, pp. 468-477. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2004.10.003>
- Lu, X. and Hu, Z. (2012), "Mechanical property evaluation of single-walled carbon nanotubes by finite element modeling" *Composites: Part B, Engineering*, vol. 43, no. 4, pp. 1902-1913. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2012.02.002>
- Meo, M. and Rossi, M. (2006), "Prediction of Young's modulus of single wall carbon nanotubes by molecular-mechanics based finite element modeling", *Composites Science and Technology*, vol. 66, pp. 1597-1605. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2005.11.015>
- Rossi, M. and Meo, M. (2009), "On the estimation of mechanical properties of single-walled carbon nanotubes by using a molecular-mechanics based FE approach," *Compos. Sci. Technol.*, vol. 69, no. 9, pp. 1394-1398. <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2008.09.010>
- Esbati, A.H. and Irani, S. (2017), "Failure analysis of carbon nanotubes with a Stone-Wales defect using nonlinear finiteelement methods", *Mechanics of Composite Materials*, vol. 53, no. 5, pp. 631-644. <https://doi.org/10.1007/s11029-017-9692-6>
- Thompson, M. and Thompson, J. (2017), *ANSYS Mechanical APDL for Finite Element Analysis*, 1st edn., Butterworth-Heinemann, Oxford, UK.
- Belytschko, T., Xiao, S.P., Schatz, G.C. and Ruoff, R.S. (2002), "Atomistic simulations of nanotube fracture", *Phys. Rev. B*, vol. 65, pp. 235430-1-8. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.235430>
- Chang, T. and Gao, H. (2003), "Size dependent elastic properties of a single-walled carbon nanotube via a molecular mechanics model", *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 51, pp. 1059-1074. [https://doi.org/10.1016/S0022-5096\(03\)00006-1](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(03)00006-1)
- Koloczec, J., Young-Kyun, K. and Burian, A. (2001), "Characterization of spatial correlations in carbon nanotubes-modelling studies" *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 328, no. 1-2, pp. 222-225. [https://doi.org/10.1016/S0925-8388\(01\)01298-1](https://doi.org/10.1016/S0925-8388(01)01298-1)
- Gmsh. A three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. URL:<http://geuz.org/gmsh/> (Last access: 10.12.2018)