

05

Исследование механических свойств материалов на основе графена $C_{62}H_{20}$ и полиэтилена $(-CH_2-CH_2-)_n$

© А.А. Байрамов,^{1,2} А.Г. Гасанов¹

¹Военная академия вооруженных сил Азербайджана,
AZ-1065 Баку, Азербайджан

²Институт систем управления НАН,
Баку Азербайджан
e-mail: azad.bayramov@yahoo.com

Поступило в Редакцию 25 мая 2020 г.

В окончательной редакции 14 сентября 2020 г.

Принято у публикации 5 октября 2020 г.

Исследованы механические свойства материалов на основе графена $C_{62}H_{20}$ и полиэтилена $(-CH_2-CH_2-)_n$ с применением полуэмпирического РМЗ метода, и построены визуальные модели молекул. Рассчитанные значения механических параметров показывают, что эти материалы обладают высокой эластичностью к деформациям и прочностью. Вычислены орбитальные энергии, потенциалы ионизации, полные энергии электронов, прочность и т.д. данного материала. Рассмотрены перспективы использования этих легких материалов в области машиностроения для изготовления сверхпрочных защитных тонких покрытий на бамперах для автомобилей. Рассчитана необходимая для обеспечения безопасности минимальная толщина защитного покрытия при столкновении автомобилей заданной массы и скорости.

Ключевые слова: графен, полиэтилен, молекулярная структура, полуэмпирический метод, механические свойства.

DOI: 10.21883/JTF.2021.03.50519.179-20

Введение

В последние годы большое внимание уделяется разработке и внедрению легких и чрезвычайно ударопрочных материалов [1]. Из анализа существующих научных работ можно заключить, что такими свойствами обладают материалы с наноразмерными структурами. Поэтому задача получения и изучения материалов с высокими механическими прочностными характеристиками на основе использования наночастиц с упорядоченными наноструктурами является актуальной. Однако получение таких материалов и оптимизация технологии на основе только эмпирического подхода требует проведения множества экспериментов. Ввиду этого является важным применение математического моделирования для облегчения технологии получения материалов на основе наночастиц, что может способствовать созданию нового поколения материалов с заданными свойствами. По этой причине использование математического и компьютерного моделирования, позволяющее получить материалы с высокими механическими свойствами, является необходимым на современном этапе. Применение таких высокопрочных материалов в промышленности очень актуально.

Среди материалов с наноструктурами, обладающих высокими прочностными свойствами, особенно выделяется графен. Графен представляет в виде одноатомного слоя атомов углерода, соединенных в двумерной решетке σ - и π -связями, и находящегося в состоянии

sp^2 -гибридизации [1,2]. Атомы углерода в слое графена соединены между собой сильной ковалентной связью. В углероде три валентных электрона из четырех участвуют в создании σ -связи, а один валентный электрон — в создании π -связи. В состоянии π -связи перекрывание электронных облаков друг с другом меньше, чем в состоянии σ -связи, поэтому π -связи легко обрываются и π -электроны передвигаются вокруг всех атомных ядер внутри решетки. Это обеспечивает высокую проводимость графена. Графен обладает большой механической жесткостью ~ 1 ТПа [3–5]. Это обеспечивает широкую применимость графена в различных областях промышленности.

В рамках рассмотренных в настоящей работе задач выбор композитного материала на основе графен–полиэтилен представляется особенно перспективным. Полиэтилен $(-CH_2-CH_2-)_n$ представляет собой белого цвета термопластический материал, диэлектрик, имеющий низкую прочность, твердость и жесткость, но обладающий высокой пластичностью и ударной вязкостью, а также низким коэффициентом трения. Полиэтилен стоек к воздействию кислот, щелочей и окислителей. В промышленности полиэтилен получают при высоком давлении (150–300 МПа и 200–280°C) и при низком давлении (0.2–2.5 МПа и 80–100°C). Полиэтилен высокого давления не обладает строгой линейной структурой, в звеньях его молекул наблюдаются ответвления. Полиэтилен низкого давления обладает строгой линейной структурой, его молекулы более тесно связаны

друг с другом (более высокая степень кристаллизации). Он состоит из неполярных насыщенных высокомолекулярных углеводородов и широко используется в качестве электрического изолятора, пластичных пленочных покрытий и в изготовлении стекол. Также отметим, что он обладает низкой стоимостью, чем обусловлено его широкое применение в промышленности.

Изучению графена, его прочностных характеристик, а также применению графена и полиэтилена в различных областях промышленности посвящено огромное количество научных статей. Однако рассмотрение задачи исследования прочностных характеристик композитных материалов на основе слоев графен–полиэтилен и их практическое применение представляется оригинальным.

Целью настоящей работы является исследование механических свойств композитных материалов на основе графена $C_{62}H_{20}$ и полиэтилена $(-CH_2-CH_2-)_n$ с применением полуэмпирического РМЗ (параметрическая модель № 3 [2,6]) метода и построение визуальных моделей молекул. В настоящей работе рассчитаны значения механических параметров этих материалов. Одновременное использование (в виде „сэндвича“) тонких слоев графена и пленок полиэтилена позволит создать высокопрочные, и в то же время эластичные композитные материалы. Дело в том, что каждый добавочный слой в „сэндвиче“ повышает прочность материала. Из двух материалов одинаковой толщины большей прочностью обладает многослойный материал, состоящий из чередующихся твердых и мягких составляющих материалов. Предложено использование тонких слоев этих материалов для изготовления защитных слоев на бамперах автомобилей.

1. Методика

Используя различные математические модели, можно подробно исследовать механические свойства материалов. Варьируя наночастицы различными технологическими способами, можно изменять в широком диапазоне макросвойства материалов, состоящих из этих наночастиц [7]. Механические свойства наноразмерных частиц можно теоретически исследовать, используя математические и компьютерные модели и применяя квантово-механические методы (неэмпирические, функционалы плотности, полуэмпирические и молекулярной динамики) [1,2,8]. Применяя эти методы, можно создавать и теоретически исследовать структуры с контролируемыми свойствами. В данном случае, были рассчитаны основные параметры материалов на основе графена $C_{62}H_{20}$ и полиэтилена $H(-CH_2-CH_2-)_6-H$, построены теоретические визуальные модели и на основе этих моделей рассчитаны значения некоторых механических параметров.

Используя метод РМЗ [1,2,6,9], мы вычислили некоторые механические параметры: модуль деформации,

модуль Юнга, модуль сдвига, модуль твердости, объемный модуль. В качестве атомных орбиталей были использованы функции Гаусса [2].

Математическое моделирование различных характеристик ударопрочных материалов на основе графена и квантово-механические исследования проводят обычно методом молекулярных орбиталей (МО) [1,2]. Известно, что полуэмпирический метод РМЗ является простым вариантом метода МО. В методе МО допускается, что в молекуле каждый электрон независимо движется в некотором эффективном поле, создаваемым ядрами молекул и другими электронами. Состояние электрона в молекуле описывается одноэлектронной волновой функцией, называемой молекулярной орбиталью. Эти функции многоцентровые. Так, в их выражения входят расстояния электрона от различных атомных ядер.

Существуют различные варианты нахождения молекулярных орбиталей. Один из них — метод нахождения молекулярной орбитали (метод МО LCAO) U_i , как линейной комбинации атомных орбиталей атомов, входящих в молекулу:

$$U_i = \sum_{q=1}^n c_{qi} \chi_q. \quad (1)$$

Здесь χ_q — известные атомные орбитали, m — число орбиталей, выбираемых как базисные функции, c_{qi} — значения неизвестных коэффициентов, которые находят-ся решением уравнений молекулярных орбиталей:

$$\sum_q (H_{pq} - \varepsilon_i S_{pq}) c_{qi} = 0. \quad (2)$$

Здесь H_{pq} — матричные элементы оператора Гамильтона эффективности рассчитываются на основе приближения Вольфсберга–Гельмгольца [10], S_{pq} — интегралы перекрытия рассчитываются аналитически на базисе функции Слейтера [11]. Решая уравнения (2), находим значения орбитальных энергий ε_i . На основе этих значений можно исследовать ряд свойств материалов.

В материалах на основе графена и полиэтилена электроны размещены по двое на энергетических уровнях, начиная с наиболее низкого уровня. Были определены энергии, занятые электронами самых верхних молекулярных орбиталей ε_{HOMO} и самых низких пустых молекулярных орбиталей ε_{LUMO} . На основе теоремы Купманса были рассчитаны потенциалы ионизации наночастиц $I_p = -\varepsilon_{HOMO}$ [1]. Полная энергия электронов рассчитана по формуле

$$E_{nh} = \sum_i \varepsilon_i. \quad (3)$$

Здесь суммирование проводится по молекулярным орбитальям электронов. Ширина запрещенной зоны наночастиц рассчитана по формуле $E_g = \varepsilon_{LUMO} - \varepsilon_{HOMO}$.

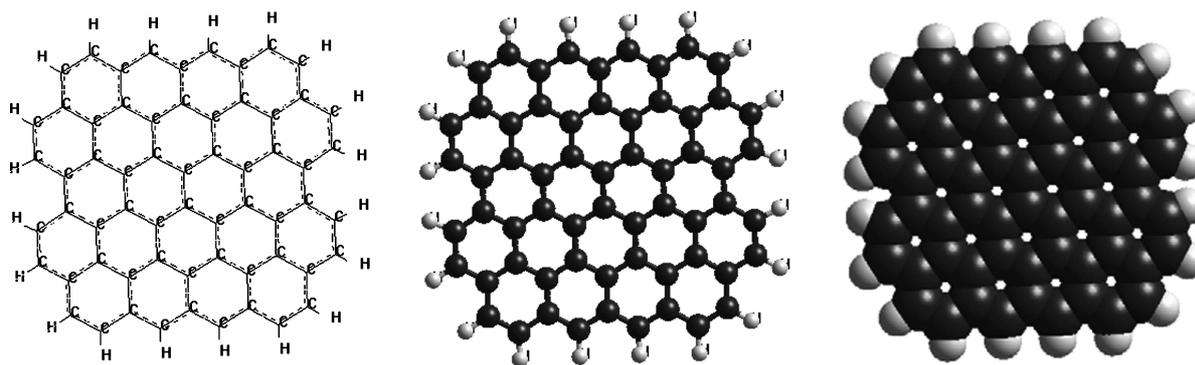


Рис. 1. Визуальные модели графена $C_{62}H_{20}$.

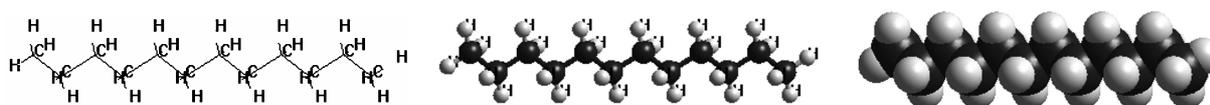


Рис. 2. Визуальные модели полиэтилена $H-(CH_2-CH_2)_6-H$.

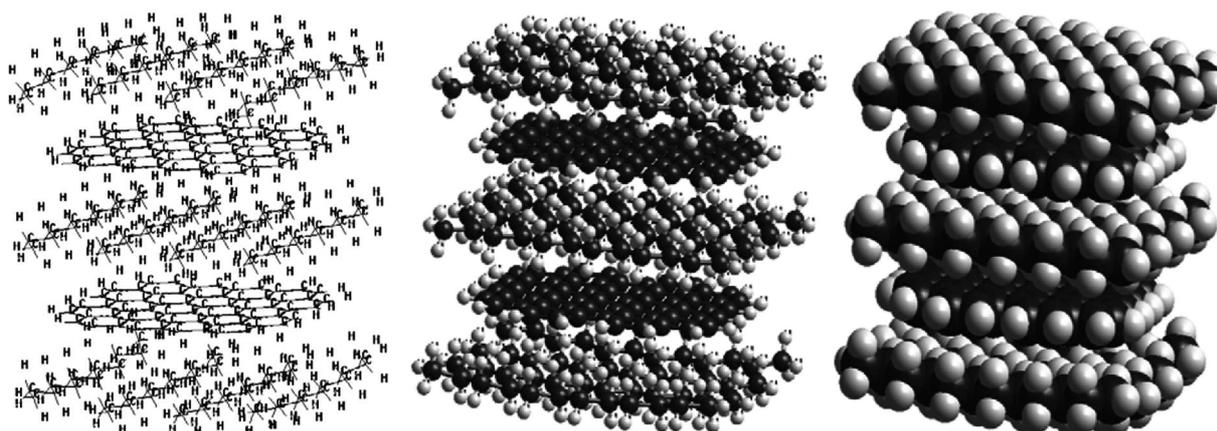


Рис. 3. Визуальные модели фрагментов молекулярных структур материала $H-(CH_2-CH_2)_6-H+(C_{62}H_{20})+H-(CH_2-CH_2)_6-H+(C_{62}H_{20})+H-(CH_2-CH_2)_6-H$.

Параметр стабильности материала рассчитывается по формуле [2–4]:

$$\Delta E = \sum_A E_A - E_{nh}. \quad (4)$$

Здесь E_{nh} — полная электронная энергия материала, E_A — полная энергия свободного атома A . Если $\Delta E > 0$, материал не стабилен, если $\Delta E < 0$, материал стабилен.

Прочность материала рассчитывается по формуле $\eta = 0.5E_g$. При $\eta < 1$ eV материал считается мягким, при $\eta > 1$ eV — твердым.

Длина волны излучаемого фотона может быть рассчитана по формуле $\lambda = (ch \cdot 10^{28}) / (1.6E_g)$, [nm]. Здесь h — постоянная Планка, c — скорость света в вакууме, E_g — ширина запрещенной зоны, [eV].

Для проведения расчетов использовались программы Mathcad, free evaluate version HyperChem Professional v7.5 и MS Office Excel.

2. Результаты визуального моделирования

На рис. 1 и 2 приведены результаты компьютерного моделирования фрагментов молекулярных структур на основе графена $C_{62}H_{20}$ и полиэтилена $H-(CH_2-CH_2)_6-H$ соответственно.

Для получения материала, сочетающего в себе ударопрочные и эластичные (упругие) свойства, предложено было рассмотреть структуру в виде „сэндвича“, включающую в себе слои (пленки) графена и полиэтилена, а именно полиэтилен–графен–полиэтилен. В случае

Таблица 1. Результаты расчета по РМЗ методу значений энергетических характеристик материала полимер+графен

| Объект полиэтилен+графен | ϵ_{HOMO} , amu | ϵ_{LUMO} , amu | E , amu | ΔE , amu | I_p , eV | E_g , eV | η , eV | λ , nm |
|---|--------------------------------|--------------------------------|-----------|------------------|------------|------------|-------------|----------------|
| 1. 3H-(CH ₂ -CH ₂) ₆ -H+2C ₆₂ H ₂₀ | -6.71 | -2.64 | -763.6 | -68.3 | 6.71 | 4.070 | 2.035 | 305.5 |
| 2. 6H-(CH-[2]-CH ₂) ₆ -H+C ₆₂ H ₂₀ | -6.76 | -2.69 | -964.8 | -88.4 | 6.76 | 4.069 | 2.034 | 305.6 |
| 3. 9H-(CH ₂ -CH ₂) ₆ -H+2C ₆₂ H ₂₀ | -6.81 | -2.74 | -1166.1 | -127.8 | 6.81 | 4.066 | 2.033 | 305.7 |
| 4. 12H-(CH ₂ -CH ₂) ₆ -H+2C ₆₂ H ₂₀ | -6.84 | -2.78 | -1367.4 | -128.7 | 6.84 | 4.0618 | 2.031 | 306.1 |

Таблица 2. Значения ряда параметров материалов на основе графена и полиэтилена

| Объект | E_b , J | r , m | D , m | Поперечное сечение полиэтилена и графена S , m ² | Сила разрыва F , N | Коэффициент Пуассона, ν |
|--------|------------------------|-----------------------|-----------------------|---|-----------------------|-----------------------------|
| 1 | $2.974 \cdot 10^{-19}$ | $1.431 \cdot 10^{-9}$ | $1.526 \cdot 10^{-9}$ | $1.1238 \cdot 10^{-18}$ | $3.915 \cdot 10^{-6}$ | 0.34 |
| 2 | $3.85 \cdot 10^{-19}$ | $1.431 \cdot 10^{-9}$ | $1.526 \cdot 10^{-9}$ | $1.1238 \cdot 10^{-18}$ | $3.915 \cdot 10^{-6}$ | 0.34 |
| 3 | $4.727 \cdot 10^{-19}$ | $1.431 \cdot 10^{-9}$ | $1.526 \cdot 10^{-9}$ | $1.1238 \cdot 10^{-18}$ | $3.915 \cdot 10^{-6}$ | 0.34 |
| 4 | $5.604 \cdot 10^{-19}$ | $1.431 \cdot 10^{-9}$ | $1.526 \cdot 10^{-9}$ | $1.1238 \cdot 10^{-18}$ | $3.915 \cdot 10^{-6}$ | 0.34 |

необходимости можно создавать более многослойные структуры из графена и полиэтилена. Это только улучшит ударопрочные и упругие свойства защитного материала.

На рис. 3 приведены результаты компьютерного моделирования фрагментов молекулярных структур материала, имеющего структуру „сэндвича“ из слоев графена и полиэтилена: [H-(CH₂-CH₂)₆-H] + (C₆₂H₂₀) + [H-(CH₂-CH₂)₆-H] + (C₆₂H₂₀) + [H-(CH₂-CH₂)₆-H].

Толщины слоев графена и полиэтилена соответственно равны $D_{gr} = 0.182 \cdot 10^{-9}$ м и $D_{pe} = 0.215 \cdot 10^{-9}$ м. Расстояние между слоями графена равно $D_{grgr} = 0.766 \cdot 10^{-9}$ м. Расстояние между слоями полиэтилена и графена равно $D_{pegr} = 0.364 \cdot 10^{-9}$ м.

3. Результаты вычисления энергетических параметров

Используя полуэмпирический РМЗ метод и данные визуальных моделей материала графен-полиэтилен, были вычислены энергетические параметры. Результаты вычислений смоделированных объектов полиэтилен + графен приведены в табл. 1 в зависимости от количества фрагментов молекулярных структур полиэтилена и графена (для случая постоянства количества слоев графена, равного 2).

Расчеты показывают, что все варианты моделей приближенно равнозначны.

Энергия связи материала графен-полиэтилен рассчитывается по формуле

$$E_b = n_C E_C + n_H E_H - E_{pg}. \quad (5)$$

Здесь n_C и n_H — количество атомов углерода и водорода соответственно; E_C и E_H — полные энер-

гии атомов углерода и водорода: $E_C = -3.991$ amu, $E_H = -0.480$ amu; E_{pg} — полная энергия системы графен-полиэтилен. Результаты расчетов некоторых параметров материалов на основе графена и полиэтилена приведены в табл. 2.

4. Результаты вычисления механических параметров

При изучении механических свойств важное значение имеет вычисление значений модулей Юнга и прочности. Модуль Юнга вычисляется по формулам

$$Y = \frac{F}{S}, \quad F \approx \frac{E_b}{r}. \quad (6)$$

Здесь Y — модуль Юнга, F — величина силы разрыва материала, S — площадь поперечного сечения материала, E_b — величина энергии связи, вычисляемая по формуле (5), r — длина связи между атомами. Для вычисления величин коэффициента жесткости k , модуля деформации σ , скольжения G , объемной упругости K и прочности HN используем формулы, приведенные в [2,5,7–12]:

$$k = \frac{YS}{D}, \quad \sigma = Y \frac{r}{D}, \quad G = \frac{Y}{2(1+\nu)},$$

$$K = \frac{Y}{3(1-2\nu)}, \quad HN = GA \exp(-B T). \quad (7)$$

Здесь ν — коэффициент Пуассона [5], $A = 0.807$, $B = 2.204 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ для материала графен-полиэтилен, $T = 300 \text{ K}$ [2,5].

На основе данных, приведенных в табл. 2, можно вычислить механические параметры материала на основе графена и полиэтилена (табл. 3).

Таблица 3. Значения механических параметров материала на основе графена и полиэтилена

| Объект | k , N/m | σ , GPa | G , GPa | K , GPa | Y , GPa | HN , GPa |
|-------------------------------------|-----------|----------------|-----------|-----------|-----------|------------|
| $3H-(CH_2-CH_2)_6-H+2C_{62}H_{20}$ | 1362 | 173.5 | 689.9 | 1926 | 1849 | 287.4 |
| $6H-(CH_2-CH_2)_6-H+2C_{62}H_{20}$ | 1763 | 224.6 | 893.2 | 2493 | 2394 | 372.1 |
| $9H-(CH_2-CH_2)_6-H+2C_{62}H_{20}$ | 2164 | 275.7 | 1096 | 3061 | 2939 | 456.8 |
| $12H-(CH_2-CH_2)_6-H+2C_{62}H_{20}$ | 2566 | 326.8 | 1300 | 3629 | 3484 | 541.5 |

5. Применение ударопрочных свойств материала графен-полиэтилен

Рассмотрим применение в автомобильной промышленности ударопрочных и эластичных защитных пленок, изготовленных из материала на основе графена и полиэтилена. Схема работы поглощающей удар пленки, как мембраны, обладающей чрезвычайно высокой теплопроводностью, подробно описана в работах [2,13,14]. Отметим, что механические характеристики материала (графена) отвечают за сопротивление деформации разрушения и поэтому должны быть максимально высокими. Скорость звука в материале определяет, насколько эффективно энергия удара (столкновения) может быть рассеяна вдали от места ударного воздействия. Она зависит от модуля Юнга и плотности — чем выше модуль Юнга и меньше плотность, тем выше скорость звука в материале [14].

Согласно имеющимся экспериментальным данным [13], однослойный графен имеет самую высокую среди твердых тел теплопроводность при комнатной температуре, составляющую $4840-5300 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$. Для сравнения отметим, что у чистого алмаза теплопроводность составляет $3320 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, у кристаллического графита — $2000 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, у титана — $22 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, у железа — $80 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$.

При столкновении кинетическая энергия удара переходит в тепловую, которая благодаря очень высокой теплопроводности графена и большой скорости распространения звуковых волн (скорость звука в графене достигает продольной волны 19.7 km/s и поперечной волны 10.7 km/s [15]) рассеивается по большой площади бампера и гаснет [14] прежде, чем начнутся изменения в кристаллической решетке графена (изгиб или поломка). Для сравнения укажем, что скорость звука в титане составляет 4101 m/s , в железе — 4941 m/s . Таким образом, наряду с высокой твердостью композита на изгиб, его высокая теплопроводность и наличие такого вязкого материала, как полиэтилен, обеспечит стойкость бампера на разрыв от удара. Отметим, что при столкновении полиэтиленовый слой может расплавиться от удара, когда кинетическая энергия столкновения перейдет в тепловую и, как следствие, температура защитного слоя повысится. Но расплавленный полиэтилен останется в структуре „сэндвича“, „зажатый“ между слоями графена,

а затем вследствие высокой теплопроводности графена остынет и снова затвердеет, поэтому большой „беды“ от этого не будет.

Область применения таких пленок очень широка: военная техника, авиационная промышленность, нефтегазодобывающая промышленность, ракетостроение, кораблестроение и т.д.

Если покрыть графен-полиэтиленовым слоем (пленкой) в виде „сэндвича“ бамперы автомашин, то при столкновении автомашин полученные повреждения могут быть значительно меньшими. При этом чем больше толщина защитных слоев, тем больше силы удар (импульс) могут выдержать бамперы без повреждения. Здесь идет речь не об адгезионном закреплении графена на границе пленки, а об адгезионных свойствах композитного материала графен-полиэтилен. Специальной термической обработкой (авторы не хотели бы останавливаться на подробностях) формируется композитный материал с внешним полимерным слоем, который обладает достаточными адгезионными свойствами.

Рассмотрим лобовое столкновение в городских условиях двух автомобилей, каждый массой $m_1 = m_2 = 2000 \text{ kg}$ и скоростью движения (предельная скорость движения машин в городе) $v_1 = v_2 = 60 \text{ km/h} \approx 17 \text{ m/s}$. Рассчитаем толщину пленки, при которой бампер не разрушится при таких условиях столкновения. Структура защитной пленки бампера в виде многослойного „сэндвича“ показана на рис. 4. В случае необходимости можно увеличить количество слоев защитной пленки.

Кинетические энергии этих автомобилей рассчитываются по формулам

$$E_1 = \frac{m_1 v_1^2}{2} \quad \text{и} \quad E_2 = \frac{m_2 v_2^2}{2}.$$

Суммарная энергия столкновения автомашин, которая выделится при ударе, составит $E = E_1 + E_2$. Эта энергия „расходуется“ на деформацию защитного слоя бамперов и распределяется по всей площади S сталкивающихся поверхностей. Условие невредимости бамперов при столкновении можно выразить так: необходимо вычислить такую толщину h пленки, чтобы энергия удара поглотилась бы в пленках и не распространилась бы дальше на бамперы. Эту энергию выразим таким образом: $E = F2h$, здесь F — сила удара, h — толщина пленки.

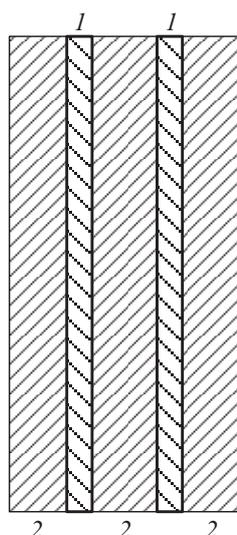


Рис. 4. Структура защитной пленки бампера в виде многослойного „сэндвича“: 1 — слой графена, 2 — слой полиэтилена.

Таблица 4. Рассчитанные толщины защитной пленки на основе графен-полиэтилен

| Материал | Толщина пленки h , м |
|-------------------------------------|------------------------|
| $3H-(CH_2-CH_2)_6-H+2C_{62}H_{20}$ | $1.60 \cdot 10^{-6}$ |
| $6H-(CH_2-CH_2)_6-H+2C_{62}H_{20}$ | $1.24 \cdot 10^{-6}$ |
| $9H-(CH_2-CH_2)_6-H+2C_{62}H_{20}$ | $1.01 \cdot 10^{-6}$ |
| $12H-(CH_2-CH_2)_6-H+2C_{62}H_{20}$ | $0.85 \cdot 10^{-6}$ |

Силу удара можно выразить формулой $F = \sigma/S$. Условно допустим, что $S = 2 \times 0.5 \text{ m} = 1 \text{ m}^2$. Вычисляем $E = 5.556 \cdot 10^5 \text{ J}$, значения σ берем из табл. 3 и определяем толщину защитной пленки h для материала графен-полиэтилен для различной структуры полиэтилена (табл. 4).

Следует отметить, что вышеприведенные расчеты чисто теоретические, выполненные оценки довольно оптимистические. Значения толщины защитного покрытия, полученные на основе модельных расчетов, выполнены для идеального случая. Разумеется, в реальности, как известно, невозможно создать бездефектный материал с идеальной структурой (может быть только в невесомости). Вышеприведенные количественные оценки могут говорить о перспективности данного материала и требуют дальнейших исследований. Следует провести реальные эксперименты с различными толщинами покрытия и при различных скоростях сталкивающихся объектов.

Заключение

Таким образом, в работе исследованы механические свойства материалов на основе графена $C_{62}H_{20}$ и поли-

этилена $(-CH_2-CH_2-)_n$. Построены визуальные модели молекул. Вычисления с применением полуэмпирического РМЗ метода показали, что эти материалы обладают высокой стойкостью к деформациям, эластичностью и твердостью. Были вычислены орбитальные энергии, потенциалы ионизации, полные энергии электронов, прочность и т.д. для данного материала. Рассчитаны некоторые энергетические и механические параметры. Рассмотрены перспективы использования этих легких материалов в области машиностроения для изготовления сверхпрочных защитных тонких покрытий на бамперах автомобилей. Рассчитана необходимая минимальная толщина защитного покрытия из пленки на основе графен-полиэтилен на бамперах при лобовом столкновении автомобилей массой $m = 2000 \text{ kg}$ каждый и скорости $v_1 = v_2 = 60 \text{ km/h} \approx 17 \text{ m/s}$ при условии, что бамперы не будут деформированы: $h \approx 1.2 \cdot 10^{-6} \text{ m}$.

Эти вычисления толщины защитного покрытия на основе модельных расчетов выполнены для идеального случая. Для реального случая следует учесть возможные дефекты в материалах.

Финансирование работы

Выполнение работы осуществлено за счет финансирования Военной академии вооруженных сил Азербайджанской Республики.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. *Теория строения молекул* (Феникс, Ростов-на-Дону, 2010).
- [2] А.Г. Гасанов, А.А. Байрамов. ФТТ, **61**, 194 (2019). DOI: 10.21883/FTT.2021.03.50519.179-20 [A.G. Gasanov, A.A. Bayramov. *Physics Solid State*, **61** (1), 208 (2019). DOI: 10.1134/S1063783419010098]
- [3] L.A. Openov, A.I. Podlivaev. *Physics Solid State*, **59**, 1267 (2017). DOI:10.1134/S106378341706018X
- [4] J.-W. Jiang, H.S. Park. *Nano Lett.*, **16**, 2657 (2016). DOI: 10.1021/acs.nanolett.6b00311
- [5] D. Guo, G. Xie, J. Luo. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **47**, 013001 (2014) DOI: 10.1088/0022-3727/47/1/013001
- [6] В.А. Блатов, А.П. Шевченко, Е.В. Пересыпкина. *Полуэмпирические расчетные методы квантовой химии* (Универс-групп, Самара, 2005), с. 32.
- [7] М.К. Kerimov, M.A. Kurbanov, A.A. Bayramov, A.I. Mamedov. *Matrix Active Micro- and Nanocomposites Based on the Polymer, Semiconductive and Ferropiezoceramic Materials. In Materials Nanocomposites and Polymers with Analytical Methods*. Edited by: John Cuppoletti, (INTECH Open Access Publisher, Rijeka, Croatia, 2011), p. 375.
- [8] Ю.М. Чумаков, А.С. Димогло, И.Б. Берсукер. *Журн. структурной химии*, **23**, 182 (1982).

- [9] R.A. Ranjbartoreh, B. Wang, X. Shen, G. Wang. *J. Appl. Phys.*, **109**, 014306 (2011).
- [10] С.К. Игнатов. *Квантово-химическое моделирование молекулярной структуры, физикохимических свойств и реакционной способности*. Ч. 1. (Нижегородский гос. ун-т, Нижний Новгород, 2006)
- [11] Т.П. Черняева, В.М. Грицина, Е.А. Михайлов, А.В. Остапо. *Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение*, **94** (4–2), 206 (2009).
- [12] А.В. Панин, А.Р. Шугуров, К.В. Оскомов. *Физическая мезомеханика*. **9**. Спец. выпуск, 119 (2006).
- [13] А.В. Елецкий, И.М. Искандарова, А.А. Книжник, Д.Н. Красиков. *УФН*, **181** (3), 233 (2011).
DOI: 10.3367/UFNr.0181.201103a.0233
- [14] А.П. Гаршин, В.И. Кулик, А.С. Нилов. *Новые огнеупоры*, **4**, 53 (2016).
- [15] Ю.А. Баимова, С.В. Дмитриев, А.В. Савин, Ю.С. Кившарь. *ФТТ*, **54** (4), 813 (2012).