



МЕХАНИКА

УДК 501.1

Влияние легирования атомами кислорода пористых углеродных наноструктур на значения модуля Юнга

А. С. Колесникова, К. А. Приходченко

Колесникова Анна Сергеевна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математической теории упругости и биомеханики, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, Саратов, ул. Астраханская, д. 83, Kolesnikova.88@mail.ru

Приходченко Кристина Алексеевна, магистр 2-го курса кафедры математической теории упругости и биомеханики, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, Саратов, ул. Астраханская, д. 83, kristyans@yandex.ru

Проведено исследование механической прочности пористых углеродных структур плотностью 1.4 г/см^3 с различными размерами пор и концентрациями атомов кислорода. Исследование механических свойств пористых углеродных наноструктур проводилось на трех моделях с размерами нанопор 0.4–0.8 нм, 0.2–1.12 нм, 0.7–1.3 нм. Установлен характер изменения модуля Юнга пористых наноструктур в зависимости от концентрации и расположения атомов кислорода в нанопорах.

Ключевые слова: пористые углеродные структуры, допирование, модуль Юнга, атомы кислорода, концентрация.

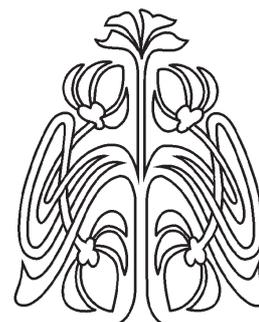
Поступила в редакцию: 17.09.2018 / Принята: 18.12.2018

Опубликована онлайн: 28.02.2019

DOI: <https://doi.org/10.18500/1816-9791-2019-19-1-59-68>

ВВЕДЕНИЕ

Пористые структуры, основанные на стеклоподобном углероде, привлекли внимание многих исследователей из-за их уникальных физических свойств [1–8]. Геометрические параметры (размер нанопор) полых углеродных наноструктур можно легко адаптировать с помощью методов синтеза. Пористые углеродные структуры используются в качестве сорбентов, что является важным элементом современной медицины. Пористые углеродные структуры обладают отличным потенциалом для адсорбции [9], катализа [10] и хранения энергии [11, 12]



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ





благодаря их устойчивым физико-химическим свойствам, хорошей электронной проводимости и уникальным структурным свойствам, включая высокую площадь поверхности, доступную пористость оболочки и высокий внутренний объем. Кроме того, пустота в нанопорах обеспечивает ограниченное пространство, которое особенно привлекательно для доставки лекарств, хранения газа, нанореакторов и инкапсуляции активного материала [13–15].

Для расширения областей использования пористых углеродных наноматериалов активно развиваются исследования свойств допированных пористых углеродных материалов гетероатомами (например, N, B, P). Исследование свойств допированных пористых углеродных материалов с гетероатомами позволит предложить эффективный подход к модификации их физико-химических свойств [16–18].

В настоящее время исследуются электронные и эмиссионные свойства допированных пористых углеродных материалов. Однако работ по исследованию механических свойств допированных пористых углеродных наноструктур найдено не было. Экспериментально известен факт, что существует разновидность пористых углеродных наноструктур с плотностью 1.4 г/см^3 допированных атомами кислорода [19], но ранее не проводились работы по исследованию механических свойств этих структур. В работах [1, 3, 4] проводились исследования механических свойств беспримесной пористой углеродной структуры с плотностью 1.4 г/см^3 .

Целью данной работы является поиск наиболее упругой конфигурации пористой углеродной структуры (ПУС) с плотностью 1.4 г/см^3 . Для этого осуществлялось теоретическое исследование изменения модуля Юнга пористых углеродных наноструктур с плотностью 1.4 г/см^3 при допировании их атомами кислорода. Осуществлялось допирование пористых углеродных наноструктур с разным размером нанопор и с постоянной плотностью атомов углерода. Исследования проводились с помощью молекулярно-механического метода с использованием энергетического потенциала REBO [20]. Выбор данного метода обусловлен тем, что он хорошо зарекомендовал себя при исследовании свойств углеродных наноструктур [21–24].

1. ОБЪЕКТ ИССЛЕДОВАНИЯ

Для теоретического исследования механических свойств ПУС с плотностью 1.4 г/см^3 в зависимости от размера нанопор были построены три атомистические модели: для первой модели размер пор составил $0.27\text{--}0.55 \text{ нм}$, для второй модели размер пор составил $0.62\text{--}0.73 \text{ нм}$, для третьей модели размер пор составил $0.85\text{--}1.49 \text{ нм}$.

Количество атомов в элементарной ячейке составляло 1899. Элементарная ячейка атомистической ПУС имела размер $3 \times 3 \times 3 \text{ нм}$.

Беспримесные структуры допировались атомами кислорода в хаотичном порядке с увеличением их концентрации до 3.5%. Атомы кислорода помещались хаотично в центре ячейки ПУС (в нанопорах) и послойно внутри протяженной ПУС. После этого проводился процесс оптимизации, т. е. поиск равновесного состояния атомов элементарной кубической решетки. Модели ПУС, допированной атомами кислорода, представлены на рис. 1.

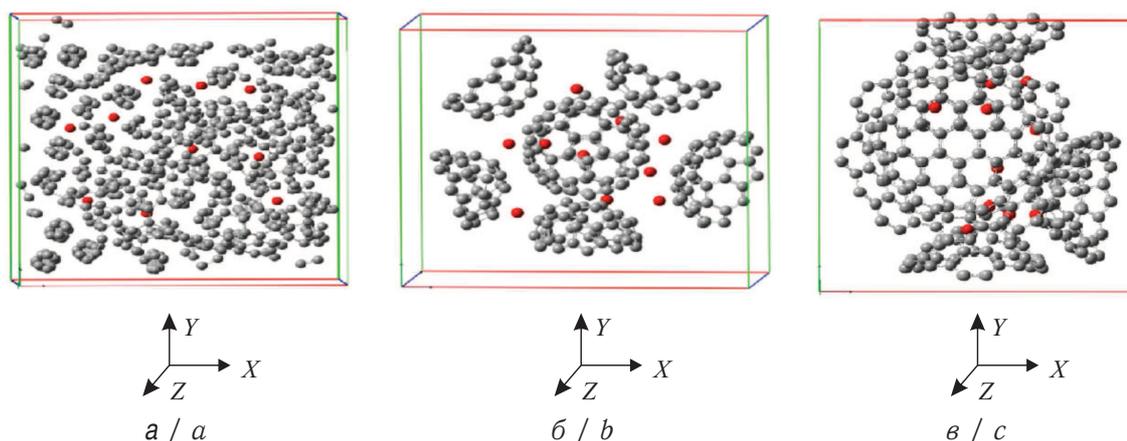


Рис. 1. Модель пористой углеродной структуры: *a* — с размером пор 0.27–0.55 нм, допированной атомами кислорода с максимальной концентрацией 1.44%; *b* — с размером пор 0.62–0.73 нм, допированной атомами кислорода с максимальной концентрацией 3.57%; *c* — с размером пор 0.85–1.49 нм, допированной атомами кислорода с максимальной концентрацией 3.52%

Fig. 1. Model of porous carbon structure: *a* — with the pore size of 0.27–0.55 nm, doped with oxygen atoms with a maximum concentration of 1.44%; *b* — with the pore size of 0.62–0.73 nm, doped with oxygen atoms with a maximum concentration of 3.57%; *c* — with the pore size of 0.85–1.49 nm doped with oxygen atoms with a maximum concentration of 3.52%

2. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

2.1. Модуль Юнга пористой углеродной наноструктуры, допированной атомами кислорода хаотично в ячейке ПУС

Исследование модуля Юнга ПУС осуществлялось по методике, описанной в работе [3]. На рис. 2 представлены графики изменения модуля Юнга для ПУС, допированных атомами кислорода, хаотично расположенных в структуре, при увеличении концентрации атомов кислорода. Из этих графиков видно, что модуль Юнга увеличивается при увеличении концентрации атомов кислорода независимо от размера нанопор. Для каждой модели ПУС с размером нанопор 0.27–0.55 нм, 0.62–0.73 нм и 0.85–1.49 нм на рис. 2, 3 приведены две кривые. Первая кривая соответствует одному способу расположения атомов кислорода в ПУС, вторая кривая соответствует другому способу расположения атомов кислорода в ПУС.

При увеличении концентрации атомов кислорода на этих графиках имеются области, на которых видно, что при одной и той же концентрации атомов кислорода модуль Юнга может вести себя по-разному. Это можно объяснить различными расстояниями от атомов кислорода до атомов углерода в ПУС. Чем расстояние больше, тем меньше атомы кислорода оказывают влияние на значения модуля Юнга ПУС, а чем расстояние меньше, тем больше атомы кислорода оказывают влияние на значения модуля Юнга ПУС. Следовательно, если атомы кислорода располагаются ближе к атомам углерода, образующим ПУС, то модуль Юнга увеличивается, а чем дальше, тем влияние атома на значение модуля Юнга ПУС становится меньше, либо совсем отсутствует. Это связано с тем, что при увеличении расстояния между атомами сила взаимодействия между ними уменьшается, и поэтому наличие допированных атомов меньше оказывает влияние на свойства структуры.

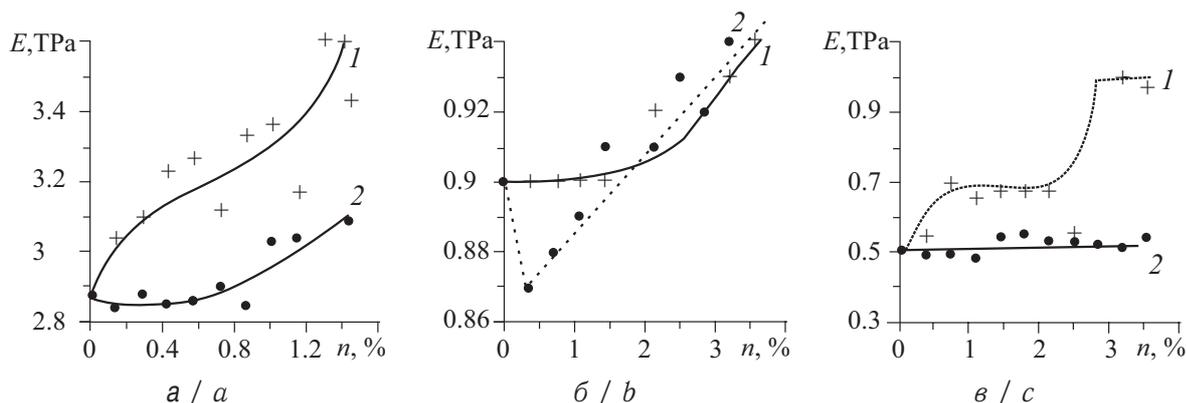


Рис. 2. Изменение модуля Юнга пористой углеродной наноструктуры, допированной атомами кислорода хаотично в ячейке ПУС (в нанопорах), при увеличении концентрации атомов кислорода с размером пор 0.27–0.55 нм (а), 0.62–0.73 нм (б), 0.85–1.49 нм (в). Кривые 1 и 2 соответствуют первому и второму способам расположения атомов кислорода в ПУС

Fig. 2. The change in Young's modulus of a porous carbon nanostructure doped with oxygen atoms is random in the cell of the PCS (in nanopores), with an increase in the concentration of oxygen atoms with a pore size of 0.27–0.55 nm (a), 0.62–0.73 nm (b), 0.85–1.49 nm (c). Curves 1 and 2 correspond to the first and second methods of the arrangement of oxygen atoms in the PCS

Для ПУС с размером пор 0.27–0.55 нм (см. рис. 2, а) модуль Юнга увеличивается независимо от способа расположения атомов кислорода в структуре. Так как размер пор в этой структуре очень маленький, то при добавлении атомов кислорода они будут достаточно близко располагаться к атомам углерода, поэтому на каком-то этапе две кривые на графике, характеризующие разное расположение атомов кислорода хаотично в ПУС, соединятся в одну кривую.

Для ПУС с размером пор 0.62–0.73 нм на рис. 2, б видно, что значение модуля Юнга зависит от способа расположения атомов кислорода. Две кривые графика, характеризующие разное расположение атомов кислорода в структуре, плавно возрастают и две кривые графика почти объединяются в одну кривую, так как концентрация атомов кислорода независимо от размера пор достигает таких значений, что кривые графика начинают объединяться в одну кривую.

Аналогичные результаты наблюдаются для ПУС с размером нанопор 0.85–1.49 нм (рис. 2, в). Из графика видно, что в одном случае модуль Юнга не изменился при увеличении концентрации, а при другом расположении он начал сразу увеличиваться. Это можно объяснить тем, что если поместить атом кислорода в центр поры, то за счет того, что поры большие, атом кислорода будет находиться настолько далеко от стенок поры, что он никак не будет влиять на значение модуля Юнга. Если поместить атом кислорода рядом со стенкой поры, то модуль Юнга начнет изменяться. Когда концентрация станет достаточно большой, то атомы будут равномерно распределяться относительно атомов углерода, образующих стенки пор, и две кривые на графике объединятся в одну кривую.

2.2. Модуль Юнга пористой углеродной наноструктуры, допированной атомами кислорода послойно в ПУС

На рис. 3 для случаев расположения атомов кислорода послойно внутри протяженной ПУС наблюдается качественная картина уменьшения значений модуля Юнга



независимо от размера нанопор ПУС и от способа расположения атомов кислорода послойно в решетке ПУС. На рис. 3 представлено изменение значений модуля Юнга, полученных при растяжении ПУС вдоль плоскостей YZ и XZ при послойном расположении атомов кислорода в решетке ПУС, независимо от размера нанопор ПУС. Рассмотрено по два способа с разным расположением атомов кислорода в ячейке при исследовании изменения значений модуля Юнга в зависимости от концентрации атомов кислорода.

Рассмотрим изменение модуля Юнга ПУС при растяжении структуры вдоль плоскости XU . При первом способе расположения атомов кислорода допирование атомами кислорода ПУС со средними размерами пор 0.41 нм осуществлялось параллельно плоскости XU до концентрации атомов кислорода 0.6% , а дальнейшее допирование осуществлялось перпендикулярно относительно плоскости XU (параллельно YZ). При втором способе расположения атомов кислорода осуществлялись параллельно плоскости XU , как и при первом способе, только концентрация атомов кислорода в плоскости XU составляла 1% , а дальнейшее допирование осуществлялось параллельно относительно плоскости YZ .

В зависимости от увеличения концентрации атомов кислорода с параллельным их расположением относительно плоскости растяжения (XU) наблюдается увеличение значений модуля Юнга при увеличении концентрации атомов кислорода, а при перпендикулярном расположении атомов кислорода относительно плоскости растяжения (XU) наблюдается уменьшение модуля Юнга при увеличении концентрации атомов кислорода.

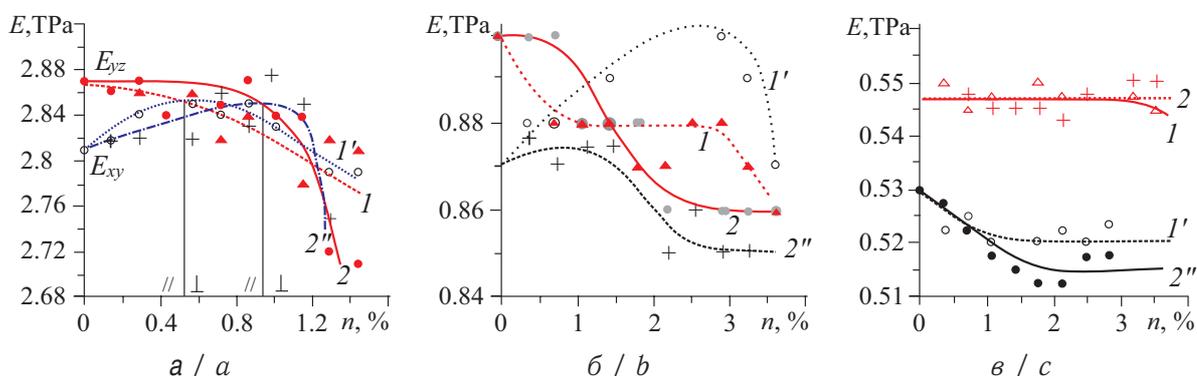


Рис. 3. Изменение модуля Юнга пористой углеродной наноструктуры, допированной атомами кислорода послойно в ПУС, при увеличении концентрации атомов кислорода с размером пор $0.27\text{--}0.55\text{ нм}$ (а), $0.62\text{--}0.73\text{ нм}$ (б), $0.85\text{--}1.49\text{ нм}$ (в). Кривые 1 и 2 соответствуют способам расположения атомов кислорода в ПУС в плоскости XU , а кривые 1' и 2' — в плоскости YZ

Fig. 3. The change in the Young's modulus of a porous carbon nanostructure doped with oxygen atoms in layers in the PCS, with an increase in the concentration of oxygen atoms with the pore size of $0.27\text{--}0.55\text{ nm}$ (a), $0.62\text{--}0.73\text{ nm}$ (b), $0.85\text{--}1.49\text{ nm}$ (c). Curves 1 and 2 corresponds of the arrangement of oxygen atoms in the PCS in the XU plane, and 1' and 2' corresponds in YZ plane

Рассмотрим изменение модуля Юнга ПУС при растяжении вдоль плоскости YZ . При первом способе расположение атомов кислорода осуществлялось параллельно плоскости YZ (до 0.6% в первом случае и до 0.9% во втором случае), а с выше 0.6% и 0.9% допирование атомами кислорода осуществляется перпендикулярно



плоскости YZ . Следовательно, до 0.6% в первом случае и до 0.9% во втором случае не наблюдается изменений значения компонента модуля Юнга при увеличении концентрации атомов кислорода, а при допировании с выше 0.6% и 0.9%, несмотря на то, что это допирование атомов кислорода осуществляется перпендикулярно плоскости YZ , наблюдается уменьшение значения компонента модуля Юнга при увеличении концентрации атомов кислорода. Аналогичные результаты наблюдаются для модуля Юнга у ПУС с размером нанопор 0.675 нм и 1 нм.

Из полученных результатов можно сделать вывод, что при допировании атомами кислорода ПУС значения модуля Юнга уменьшаются с увеличением концентрации атомов кислорода при их расположении в ячейке ПУС послойно и перпендикулярно оси растяжения. Значения модуля Юнга увеличиваются с увеличением концентрации атомов кислорода при их хаотичном расположении в порах ячейки ПУС.

ВЫВОДЫ

С помощью методов компьютерного моделирования в работе впервые проведено теоретическое исследование механических свойств допированных кислородом ПУС с плотностью 1.4 г/см^3 с разным размером нанопор. В процессе моделирования построено три модели ПУС. У первой структуры размер пор варьировался от 0.27 до 0.55 нм, у второй — 0.62–0.73 нм, у третьей — 0.85–1.49 нм. Средние значения модуля Юнга для беспримесных ПУС со средним размером пор 0.41 нм составляют 2.37 ТПа, 0.675 нм — 0.53 ТПа, 1.17 нм — 0.43 ТПа.

Допирование атомами кислорода осуществлялось при расположении атомов кислорода хаотично в ячейке ПУС (в нанопорах) и послойно внутри структуры. Значение модуля Юнга для ПУС, допированной атомами кислорода, хаотично в структуре увеличивается независимо от способа расположения атомов кислорода в структуре. Единственным фактором, не влияющим на изменение значений модуля Юнга при допировании ПУС атомами кислорода, является большая величина размера нанопор, в которых атомы кислорода располагаются далеко от стенок нанопор, не оказывая на них влияние. Для случаев расположения атомов кислорода послойно внутри протяженной ПУС справедливы следующие заключения:

1) при параллельном расположении допированных атомов кислорода оси растяжения ПУС наблюдается увеличение значений модуля Юнга при увеличении концентрации допированных атомов;

2) при перпендикулярном расположении допированных атомов кислорода оси растяжения ПУС наблюдается уменьшение значений модуля Юнга при увеличении концентрации допированных атомов.

На основе полученных результатов можно заключить, что наиболее прочной ПУС является допированная атомами кислорода ПУС с наименьшим размером нанопор и с наибольшей концентрацией в ней атомов кислорода в центральной части ячейки, когда атомы кислорода располагаются наиболее близко к атомам углерода. Полученные результаты согласуются с результатами, которые были получены в работах [7, 12].

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке Президентской стипендии 2016–2018 (проект № СП-2502.2016.1).

Библиографический список

1. Zhao Z., Wang E. F., Yan H., Kono Y., Wen B., Bai L., Shi F., Zhang J., Kenney-Benson C., Park C., Wang Y., Shen G. Nanoarchitected materials composed of fullerene-



- like spheroids and disordered graphene layers with tunable mechanical properties // *Nature Communications*. 2015. Vol. 6, № 6212. P. 1–10. DOI: <https://doi.org/10.1038/ncomms7212>
2. *Bauer J., Schroer A., Schwaiger R., Kraft O.* Approaching theoretical strength in glassy carbon nanolattices // *Nat. Mater.* 2016. Vol. 15. P. 438–443. DOI: <https://doi.org/10.1038/NMAT4561>
 3. *Kolesnikova A. S.* Mechanical Properties of Sorbents Depending on Nanopore Sizes // *Physics of the Solid State*. 2017. Vol. 59, № 7. P. 1336–1339. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063783417070113>
 4. *Manoharan M. P., Lee H., Rajagopalan R., Foley H. C., Haque M. A.* Elastic Properties of 4–6 nm-thick Glassy Carbon Thin Films // *Nanoscale Res Lett*. 2010. Vol. 5. P. 14–19. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11671-009-9435-2>
 5. *Suarez-Martinez I., Marks N. A.* Effect of microstructure on the thermal conductivity of disordered carbon // *Applied Physics Letters*. 2011. Vol. 99, iss. 3. P. 033101. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3607872>
 6. *Yao M., Xiao J., Fan X., Liu R., Liu B.* Transparent, superhard amorphous carbon phase from compressing glassy carbon // *Applied Physics Letters*. 2014. Vol. 104, iss. 2. P. 021916. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4861929>
 7. *Glukhova O. E., Slepchenkov M. M.* Electronic Properties of the Functionalized Porous Glass-Like Carbon // *J. Phys. Chem. C*. 2016. Vol. 120, № 31. P. 17753–17758. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b05058>
 8. *Liang H., Ma X., Yang Z., Wang P., Zhang X., Ren Z., Xuea M., Chen G.* Emergence of superconductivity in doped glassy-carbon // *Carbon*. 2016. Vol. 99. P. 585–590. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2015.12.046>
 9. *Feng S., Li W., Shi Q., Li Y., Chen J., Ling Y., Asiri A. M., Zhao D.* Synthesis of Nitrogen-Doped Hollow Carbon Nanospheres for CO₂ Capture. // *Chem. Commun.* 2014. Vol. 50. P. 329–331. DOI: <https://doi.org/10.1039/C3CC46492J>
 10. *Bo X., Bai J., Ju J., Guo L.* Highly dispersed Pt nanoparticles supported on poly(ionic liquids) derived hollow carbon spheres for methanol oxidation. // *J. Power Sources*. 2011. Vol. 196. P. 8360–8365. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2011.06.068>
 11. *Qiao Z. A., Guo B., Binder A. J., Chen J., Veith G. M., Dai S.* Controlled Synthesis of Mesoporous Carbon Nanostructures via a “Silica-Assisted” Strategy // *Nano Lett.* 2013. Vol. 13. P. 207–212. DOI: <https://doi.org/10.1021/nl303889h>
 12. *Bushuev N. A., Glukhova O. E., Grigor'ev Y. A., Ivanov D. V., Kolesnikova A. S., Nikolaev A. A., Shalaev P. D., Shesterkin V. I.* Emissivity of a multibeam electron gun with a glassy carbon field-emission cathode // *Technical Physics*. 2016. Vol. 61, № 2. P. 290–295. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063784216020080>
 13. *White R. J., Tauer K., Antonietti M., Titirici M. M.* Functional Hollow Carbon Nanospheres by Latex Templating // *J. Am. Chem. Soc.* 2010. Vol. 132. P. 17360–17363. DOI: <https://doi.org/10.1021/ja107697s>
 14. *Chen A., Yu Y., Lv H., Wang Y., Shen S., Hu Y., Li B., Zhang Y., Zhang J.* Thin-walled, mesoporous and nitrogen-doped hollow carbon spheres using ionic liquids as precursors // *J. Mater. Chem. A*. 2013. Vol. 1. P. 1045–1047. DOI: <https://doi.org/10.1039/C2TA01013E>
 15. *Lu A.-H., Li W.-C., Hao G.-P., Spliethoff B., Bongard H.-J., Schaack B. B., Schüth F.* Easy synthesis of hollow polymer, carbon, and graphitized microspheres // *Angew. Chem. Int. Ed.* 2010. Vol. 49. P. 1615–1618. DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.200906445>
 16. *Gong K. P., Du F., Xia Z. H., Durstock M., Dai L. M.* Nitrogen-Doped Carbon Nanotube Arrays with High Electrocatalytic Activity for Oxygen Reduction // *Science*. 2009. Vol. 323. P. 760–764. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1168049>
 17. *Tang J., Salunkhe R. R., Liu J., Torad N. L., Imura M., Furukawa S., Yamauchi Y.* Thermal conversion of core-shell metal-organic frameworks: a new method for selectively



- functionalized nanoporous hybrid carbon // *J. Am. Chem. Soc.* 2015. Vol. 137. P. 1572–1580. DOI: <https://doi.org/10.1021/ja511539a>
18. *Zhong M., Kim E. K., McGann J. P., Chun S.-E., Whitacre J. F., Jaroniec M., Matyjaszewski K., Kowalewski T.* Electrochemically Active Nitrogen-Enriched Nanocarbons with Well-Defined Morphology Synthesized by Pyrolysis of Self-Assembled Block Copolymer // *J. Am. Chem. Soc.* 2012. Vol. 134. P. 14846–14857. DOI: <https://doi.org/10.1021/ja304352n>
 19. *Kakinoki J.* A model for the structure of 'glassy carbon' // *Acta Cryst.* 1965. Vol. 18. P. 578. DOI: <https://doi.org/10.1107/S0365110X65001342>
 20. *Brenner D. W.* Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films // *Phys. Rev. B.* 1990. Vol. 42. P. 9458.
 21. *Glukhova O. E., Kolesnikova A. S., Kossovich E. L., Zhnichkov R. Y.* Super strong nanoindentors for biomedical applications based on bamboo-like nanotubes // *Progress in Biomedical Optics and Imaging – Proceedings of SPIE 2012.* 2012. Vol. 8233. P. 823311. DOI: <https://doi.org/10.1117/12.907035>
 22. *Glukhova O. E., Kolesnikova A. S.* Empirical modeling of longitudinal tension and compression of graphene nanoparticles and nanoribbons // *Physics of the Solid State.* 2011. Vol. 53, № 9. P. 1957–1962. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063783411090137>
 23. *Glukhova O. E., Kolesnikova A. S.* Mechanical and emission properties of thinnest stable bamboolike nanotubes // *Journal of Physics: Conference Series.* 2012. Vol. 393. P. 012027. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/393/1/012027>
 24. *Glukhova O. E., Saliy I. N., Zhnichkov R. Y., Khvatov I. A., Kolesnikova A. S., Slepchenkov M. M.* Elastic properties of graphene-graphane nanoribbons // *Journal of Physics : Conference Series.* 2010. Vol. 248. P. 012004. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/248/1/012004>

Образец для цитирования:

Колесникова А. С., Приходченко К. А. Влияние легирования атомами кислорода пористых углеродных наноструктур на значения модуля Юнга // *Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Математика. Механика. Информатика.* 2019. Т. 19, вып. 1. С. 59–68. DOI: <https://doi.org/10.18500/1816-9791-2019-19-1-59-68>

Influence of Doping by Oxygen Atoms of Porous Carbon Nanostructures on Values of Young's Modulus

A. S. Kolesnikova, K. A. Prikhodchenko

Anna S. Kolesnikova, <https://orcid.org/0000-0003-2033-1192>, Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., 410012 Saratov, Russia, Kolesnikova.88@mail.ru

Christina A. Prikhodchenko, Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., 410012 Saratov, Russia, kristyans@yandex.ru

Porous carbon structures are actively used in various fields of science and technology. The mechanical strength of porous carbon structures with a density of 1.4 g/cm^3 with different pore sizes and different concentrations of oxygen atoms was investigated. Investigation of the mechanical properties of porous carbon nanostructures was carried out on three models with different sizes of nanopores (0.4–0.8 nm, 0.2–1.12 nm, 0.7–1.3 nm). The nature of the change in Young's modulus of porous nanostructures is determined depending on the concentration and arrangement of oxygen atoms in nanopores.



Keywords: porous carbon structures, doping, Young's modulus, oxygen atoms, concentration.

Received: 17.09.2018 / Accepted: 18.12.2018 / Published online: 28.02.2019

Acknowledgements: This work was supported by Presidential scholarship (project no. SP-2502.2016.1).

References

1. Zhao Z., Wang E. F., Yan H., Kono Y., Wen B., Bai L., Shi F., Zhang J., Kenney-Benson C., Park C., Wang Y., Shen G. Nanoarchitected materials composed of fullerene-like spheroids and disordered graphene layers with tunable mechanical properties. *Nature Communications*, 2015, vol. 6, no. 6212, pp. 1–10. DOI: <https://doi.org/10.1038/ncomms7212>
2. Bauer J., Schroer A., Schwaiger R., Kraft O. Approaching theoretical strength in glassy carbon nanolattices. *Nature Materials*, 2016, vol. 15, pp. 438–443. DOI: <https://doi.org/10.1038/NMAT4561>
3. Kolesnikova A. S. Mechanical Properties of Sorbents Depending on Nanopore Sizes. *Physics of the Solid State*, 2017, vol. 59, no. 7, pp. 1336–1339. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063783417070113>
4. Manoharan M. P., Lee H., Rajagopalan R., Foley H. C., Haque M. A. Elastic Properties of 4–6 nm-thick Glassy Carbon Thin Films. *Nanoscale Res Lett.*, 2010, vol. 5, pp. 14–19. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11671-009-9435-2>
5. Suarez-Martinez I., Marks N. A. Effect of microstructure on the thermal conductivity of disordered carbon. *Appl. Phys. Lett.*, 2011, vol. 99, iss. 3, p. 033101. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3607872>
6. Yao M., Xiao J., Fan X., Liu R., Liu B. Transparent, superhard amorphous carbon phase from compressing glassy carbon. *Applied Physics Letters*, 2014, vol. 104, iss. 2, p. 021916. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4861929>
7. Glukhova O. E., Slepchenkov M. M. Electronic Properties of the Functionalized Porous Glass-Like Carbon. *J. Phys. Chem. C*, 2016, vol. 120, no. 31, pp. 17753–17758. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b05058>
8. Liang H., Ma X., Yang Z., Wang P., Zhang X., Ren Z., Xuea M., Chen G. Emergence of superconductivity in doped glassy-carbon. *Carbon*, 2016, vol. 99, pp. 585–590. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2015.12.046>
9. Feng S., Li W., Shi Q., Li Y., Chen J., Ling Y., Asiri A. M., Zhao D. Synthesis of Nitrogen-Doped Hollow Carbon Nanospheres for CO₂ Capture. *Chem. Commun.*, 2014, vol. 50, pp. 329–331. DOI: <https://doi.org/10.1039/C3CC46492J>
10. Bo X., Bai J., Ju J., Guo L. Highly dispersed Pt nanoparticles supported on poly(ionic liquids) derived hollow carbon spheres for methanol oxidation. *J. Power Sources*, 2011, vol. 196, pp. 8360–8365. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2011.06.068>
11. Qiao Z. A., Guo B., Binder A. J., Chen J., Veith G. M., Dai S. Controlled Synthesis of Mesoporous Carbon Nanostructures via a “Silica-Assisted” Strategy. *Nano Lett.*, 2013, vol. 13, pp. 207–212. DOI: <https://doi.org/10.1021/nl303889h>
12. Bushuev N. A., Glukhova O. E., Grigor'ev Y. A., Ivanov D. V., Kolesnikova A. S., Nikolaev A. A., Shalaev P. D., Shesterkin V. I. Emissivity of a multibeam electron gun with a glassy carbon field-emission cathode. *Technical Physics*, 2016, vol. 61, no. 2, pp. 290–295. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063784216020080>
13. White R. J., Tauer K., Antonietti M., Titirici M. M. Functional Hollow Carbon Nanospheres by Latex Templating. *J. Am. Chem. Soc.*, 2010, vol. 132, pp. 17360–17363. DOI: <https://doi.org/10.1021/ja107697s>



14. Chen A., Yu Y., Lv H., Wang Y., Shen S., Hu Y., Li B., Zhang Y., Zhang J. Thin-walled, mesoporous and nitrogen-doped hollow carbon spheres using ionic liquids as precursors. *J. Mater. Chem. A.*, 2013, vol. 1, pp. 1045–1047. DOI: <https://doi.org/10.1039/C2TA01013E>
15. Lu A.-H., Li W.-C., Hao G.-P., Spliethoff B., Bongard H.-J., Schaack B. B., Schüth F. Easy synthesis of hollow polymer, carbon, and graphitized microspheres. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2010, vol. 49, pp. 1615–1618. DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.200906445>
16. Gong K. P., Du F., Xia Z. H., Durstock M., Dai L. M. Nitrogen-Doped Carbon Nanotube Arrays with High Electrocatalytic Activity for Oxygen Reduction. *Science*, 2009, vol. 323, pp. 760–764. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1168049>
17. Tang J., Salunkhe R. R., Liu J., Torad N. L., Imura M., Furukawa S., Yamauchi Y. Thermal conversion of core–shell metal–organic frameworks: a new method for selectively functionalized nanoporous hybrid carbon. *J. Am. Chem. Soc.*, 2015, vol. 137, pp. 1572–1580. DOI: <https://doi.org/10.1021/ja511539a>
18. Zhong M., Kim E. K., McGann J. P., Chun S.-E., Whitacre J. F., Jaroniec M., Matyjaszewski K., Kowalewski T. Electrochemically Active Nitrogen-Enriched Nanocarbons with Well-Defined Morphology Synthesized by Pyrolysis of Self-Assembled Block Copolymer. *J. Am. Chem. Soc.*, 2012, vol. 134, pp. 14846–14857. DOI: <https://doi.org/10.1021/ja304352n>
19. Kakinoki J. A model for the structure of “glassy carbon”. *Acta Cryst.*, 1965, vol. 18, p. 578. DOI: <https://doi.org/10.1107/S0365110X65001342>
20. Brenner D. W. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films. *Phys. Rev. B*, 1990, vol. 42, p. 9458.
21. Glukhova O. E., Kolesnikova A. S., Kossovich E. L., Zhnichkov R. Y. Super strong nanoindentors for biomedical applications based on bamboo-like nanotubes. *Progress in Biomedical Optics and Imaging – Proceedings of SPIE 2012*, 2012, vol. 8233, p. 823311. DOI: <https://doi.org/10.1117/12.907035>
22. Glukhova O. E., Kolesnikova A. S. Empirical modeling of longitudinal tension and compression of graphene nanoparticles and nanoribbons. *Physics of the Solid State*, 2011, vol. 53, no. 9, pp. 1957–1962. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063783411090137>
23. Glukhova O. E., Kolesnikova A. S. Mechanical and emission properties of thinnest stable bamboolike nanotubes. *Journal of Physics: Conference Series*, 2012, vol. 393, p. 012027. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/393/1/012027>
24. Glukhova O. E., Saliy I. N., Zhnichkov R. Y., Khvatov I. A., Kolesnikova A. S., Slepchenkov M. M. Elastic properties of graphene-graphane nanoribbons. *Journal of Physics: Conference Series*, 2010, vol. 248, p. 012004. DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/248/1/012004>

Cite this article as:

Kolesnikova A. S., Prikhodchenko K. A. Influence of Doping by Oxygen Atoms of Porous Carbon Nanostructures on Values of Young’s Modulus. *Izv. Saratov Univ. (N. S.), Ser. Math. Mech. Inform.*, 2019, vol. 19, iss. 1, pp. 59–68 (in Russian). DOI: <https://doi.org/10.18500/1816-9791-2019-19-1-59-68>
