

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ ГРАФЕНА И СИЛИЦЕНА В РАМКАХ ОБЩЕГО ГАРМОНИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Нагорный Ю. Е., Политаев Д. Н., Журавков М. А.

*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь,
e-mail: nagorny.yury@gmail.com*

Графен и силицен представляют собой два материала из разряда наноструктур. Данные структуры являются однослойными пластинками из углерода и кремния соответственно. Их ячейки образуют шестиугольники, в вершинах которых располагаются атомы.

Модель общего гармонического поля (ОГП) [1] базируется на предположении, что в молекулярной структуре имеет место взаимодействие всех атомов со всеми. Учёт всех возможных связей мало необходим для реальных целей, так как с увеличением расстояния резко падает сила. Минимально возможный радиус действия сил равен длине валентной связи. Именно такая структура, с центром в одном из атомов, включённая в круг радиусом, равным этой связи, рассматривается в работе [2] в качестве базовой. Она включает в себя четыре атома.

Матрица жёсткости структурного элемента, разлагается на набор матриц жёсткости четырёх отдельных типов элементов: пары упругих отрезков [3], моделирующих валентную связь – тип 1 и силу Ван-дер-Ваальса – тип 2; и два угловых элемента [4] между парой валентных связей, исходящих из одного атома – тип 3, и угловой элемент между валентной связью и связью Ван-дер-Ваальса – тип 4. У каждого из них своя жёсткость.

Коэффициенты для матриц жёсткости этих четырёх элементов получены пересчётом, через собственные частоты колебаний трёхузловых фрагментов, силицена и графена соответственно. Эти фрагменты применяются для моделирования системы из атома и двух его ближайших соседей.

Для получения частот в обоих случаях решается уравнение

$$\det([K] - \omega^2 [M]) = 0, \quad (1)$$

где $[K]$ – матрица жёсткости системы, $[M]$ – диагональная матрица, содержащая на главной диагонали массы атомов соответственно углерода $m_C = 2,00824 \cdot 10^{-26}$ кг и кремния $m_{Si} = 2,6929 \cdot 10^{-26}$ кг, ω – собственная частота колебаний структуры.

Для графена рассматривается система из двух линейных упругих отрезков, моделирующих валентные связи, и упругого угла с жёсткостью соответственно $k_1 = 938$ ккал·моль⁻¹·Å⁻², $k_\gamma = 126$ ккал·моль⁻¹·рад⁻² [5]. Для силицена к паре отрезков добавляется третий упругий отрезок, предназначенный для моделирования связи атомов, расположенных через один. Их жёсткости составляют: $k_1 = 161,7$ Дж·м⁻² и $k_2 = 9,3$ Дж·м⁻² [6].

Решение уравнения даёт набор из трёх частот. С их помощью составляются системы из трёх уравнений (1): где $[K]$ – матрица жёсткости трёхузлового фрагмента (GHF – general harmonic field). Она состоит из матрицы жёсткости, построенной на предыдущем этапе с добавлением двух матриц жёсткости упругих углов типа 4 и одного упругого отрезка типа 2 для графена. Для силицена вместо матрицы жёсткости

упругого отрезка используется матрица угла типа 3. Результирующая матрица содержит полный набор из четырех независимых коэффициентов. Превышение числа коэффициентов над числом уравнений приводит к неоднозначности решений. Возникает зависимость трёх коэффициентов от четвёртого. Для графена это [7]:

$$\begin{aligned}
k_{1(GHF)} &= \frac{1}{6} \left(3k_1 - 6k_{2(GHF)} + 10 \frac{k_{\gamma 1}}{a^2} + \right. \\
&+ \left. \sqrt{9k_1^2 + 18k_1k_{2(GHF)} - 36k_{2(GHF)}^2 - 60k_1k_{\gamma 1} + 60k_{2(GHF)}k_{\gamma 1} + 100k_{\gamma 1}^2} \right), \\
k_{\gamma 1(GHF)} &= \frac{1}{5} a^2 \left(-3k_1 - 8k_{2(GHF)} + 15 \frac{k_{\gamma 1}}{a^2} + \right. \\
&+ \left. \sqrt{9k_1^2 + 18k_1k_{2(GHF)} - 36k_{2(GHF)}^2 - 60k_1k_{\gamma 1} + 60k_{2(GHF)}k_{\gamma 1} + 100k_{\gamma 1}^2} \right), \\
k_{\gamma 2(GHF)} &= \frac{1}{2} a^2 \left(3k_1 + 6k_{2(GHF)} - 10 \frac{k_{\gamma 1}}{a^2} - \right. \\
&- \left. \sqrt{9k_1^2 + 18k_1k_{2(GHF)} - 36k_{2(GHF)}^2 - 60k_1k_{\gamma 1} + 60k_{2(GHF)}k_{\gamma 1} + 100k_{\gamma 1}^2} \right).
\end{aligned} \tag{2}$$

В общем виде для силицена зависимость выглядит так [8]:

$$\begin{aligned}
k_{1(GHF)} &= \frac{1}{6} \left(3k_1 - 6k_{2(GHF)} + 4k_2 + \right. \\
&+ \left. \sqrt{9k_1^2 + 18k_1k_{2(GHF)} - 36k_{2(GHF)}^2 - 6k_1k_2 + 24k_{2(GHF)}k_2 + 16k_2^2} \right), \\
k_{\gamma 1(GHF)} &= \frac{1}{5} a^2 \left(-3k_1 - 8k_{2(GHF)} + 6k_2 + \right. \\
&+ \left. \sqrt{9k_1^2 + 18k_1k_{2(GHF)} - 36k_{2(GHF)}^2 - 6k_1k_2 + 24k_{2(GHF)}k_2 + 16k_2^2} \right), \\
k_{\gamma 2(GHF)} &= \frac{1}{2} a^2 \left(3k_1 + 6k_{2(GHF)} - 4k_2 - \right. \\
&- \left. \sqrt{9k_1^2 + 18k_1k_{2(GHF)} - 36k_{2(GHF)}^2 - 6k_1k_2 + 24k_{2(GHF)}k_2 + 16k_2^2} \right),
\end{aligned} \tag{3}$$

где k_1 и $k_{1(GHF)}$ – жёсткость валентной связи соответственно в рамках поля центральных сил и ОГП, k_2 и $k_{2(GHF)}$ – жёсткость элемента, моделирующего силы Ван-дер-Ваальса связи соответственно в рамках поля центральных сил и ОГП, $k_{\gamma 1(GHF)}$ и $k_{\gamma 2(GHF)}$ – жёсткости угловых элементов типа 3 и 4 в рамках ОГП, a – длина валентной связи.

Подставив соответствующие значения k_1 , $k_{1(GHF)}$ и k_2 для графена и силицена, получим ограничения на коэффициент $k_{2(GHF)}$. Для графена пределы изменения составляют:

$$-123,413 \leq k_{2(GHF)} \leq 521,782 \text{ Дж}\cdot\text{м}^{-2}. \tag{4}$$

У силицена они лежат на промежутке:

$$47,13 \leq k_{2(GHF)} \leq 134,18 \text{ Дж}\cdot\text{м}^{-2}. \tag{5}$$

Рассчитаем набор коэффициентов для графена и силицена, взяв значение $k_{2(GHF)}=50$ Дж·м⁻², близкое к середине допустимых значений для силицена (5), и входящее в разрешённую область для графена (4). В этом случае для графена остальные коэффициенты равны: $k_{1(GHF)}=634,4$ Дж·м⁻², $k_{\gamma_1(GHF)}=4,417 \cdot 10^{-20}$ Дж·м⁻², $k_{\gamma_2(GHF)}=1,07 \cdot 10^{-18}$ Дж·рад⁻², для силицена имеем: $k_{1(GHF)}=127,5$ Дж·м⁻², $k_{\gamma_1(GHF)}=2,97 \cdot 10^{-18}$ Дж·рад⁻², $k_{\gamma_2(GHF)}=5,32 \cdot 10^{-18}$ Дж·рад⁻².

Моделирование выполняем для фрагментов графена и силицена, имеющих прямоугольную форму максимальным размером $4 \cdot 10^{-9}$ м шириной и $4 \cdot 10^{-9}$ м длиной. Граничные условия для обеих моделей предполагают равномерное растяжение за вершины шестиугольников границы «зигзаг».

Выполнение сравнения абсолютных значений модуля продольной упругости не корректно, так как его величина зависит от толщины образца, выбор которого для структур, толщиной в один атомный слой неоднозначен. Поэтому можно говорить только о качественном сравнении полученных результатов. В обоих случаях наблюдается выход на асимптоту с ростом длины образца и очень слабая зависимость от ширины образца. Абсолютные значения модуля продольной упругости находятся в пределах: $0,58 < E < 0,95$ ТПа и $0,70 < E < 1,66$ ТПа для графена и силицена соответственно.

Поведение коэффициента поперечной деформации для образцов графена и силицена имеет как качественные, так и количественные отличия. Общим является его уменьшение с ростом ширины образцов наноструктур с выходом на асимптоту. Увеличение же длины образцов даёт качественно отличные результаты: у графена рост данного показателя, а у силицена – его снижение. Абсолютные значения так же отличаются: $0,326 < \nu < 0,472$ для графена и $0,063 < \nu < 0,258$ для силицена.

Литература

1. Грибов, Л.А. Колебания молекул / Л.А. Грибов. – М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2009. – 544 с.
2. Zhuravkov, M.A. Finite element modeling of nanoscale structures / M.A. Zhuravkov, Yu.E. Nagomyi, V.I. Repchenkov // *Nanotechnologies in Russia*. – 2011. – V. 6. – № 9-10. – P. 597-606. DOI: 10.1134/S1995078011050168.
3. Нагорный, Ю.Е. Исследование механических свойств силицена в рамках модели поля центральных сил / Ю.Е. Нагорный, Д.Н. Политаев // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2017. – Вып. 9. – С. 341-346. DOI: 10.26456/pcascnn/2017.9.341.
4. Нагорный, Ю.Е. Исследование механических свойств силицена в рамках модели валентно-силового поля / Ю.Е. Нагорный, Д.Н. Политаев // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2018. – Вып. 10. – С. 485-491. DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.485.
5. Li, C. A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes / C. Li, T.-W. Chou // *International Journal of Solids and Structures*. – 2003. – V. 40. – I. 10. – P. 2487-2499. DOI: 10.1016/S0020-7683(03)00056-8.
6. Кривцов, А.М. Сравнение микромоделей описания упругих свойств алмаза / А.М. Кривцов, О.С. Лобода, С.С. Хакало // *Механика твёрдого тела*. – 2012. – № 5. – С. 44-52.
7. Журавков, М.А. Сравнительный анализ результатов численного моделирования механического поведения графена и силицена в рамках общего гармонического поля / М.А. Журавков, Ю.Е. Нагорный, Д.Н. Политаев // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2020. – Вып. 12. – С. 415-423. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.415.
8. Нагорный, Ю.Е. Численное моделирование механического поведения силицена в рамках обобщённого гармонического поля / Ю.Е. Нагорный // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2019. – Вып. 11. – С. 336-344. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.336.