

ОПРЕДЕЛЕНИЕ УПРУГИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ГРАФЕНА В РАМКАХ МОДЕЛИ ОБЩЕГО ГАРМОНИЧЕСКОГО ПОЛЯ ПРИ ИЗМЕНЕНИИ НЕЗАВИСИМОГО КОЭФФИЦИЕНТА ЖЁСТКОСТИ

Ю. Е. Нагорный¹, Д. Н. Политаев²

Белорусский государственный университет, пр. Независимости 4, Минск, Республика Беларусь,

¹ Nagorny@bsu.by, ² Politaev@bsu.by

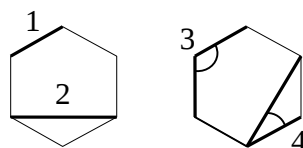
Аннотация. Представлены результаты применения модели общего гармонического поля для численного моделирования механических свойств наноструктур графена. Проведён расчёт коэффициентов жёсткости элементов для этой модели на основе жёсткостей пары базовых через собственные частоты колебаний трёхузлового фрагмента. Приведены зависимости упругих модулей от линейных размеров образцов.

Ключевые слова: общее гармоническое поле; графен; упругие коэффициенты; собственные частоты колебаний; модуль Юнга; коэффициент Пуассона.

Графеном называется двумерная аллотропная модификация углерода, представляющая слой толщиной в один атом углерода. Графен является объектом наноструктур размером от 1 до 100 нанометров. Такая структура углерода состоит из ячеек в виде шестиугольников, в вершинах которых располагаются атомы.

В настоящее время потребность в знаниях о графене является весьма актуальной. Ввиду малости размеров данной модификации углерода практически невозможно выполнить механические испытания, а также сложно получить бездефектные структуры. Поэтому проведение численного моделирования состояния графена представляется наиболее эффективным и целесообразным. В молекулярной структуре имеет место взаимодействие всех атомов со всеми, такое предположение является моделью общего гармонического поля [1]. Так как сила взаимодействия резко уменьшается с ростом расстояния между атомами, то рассматривать все связи не целесообразно. Учитывая, что минимальное расстояние действия сил равно длине валентной связи, то в качестве базовой модели рассматривается структура из атома в центре и окружающих его трёх атомов, на расстоянии равном длине валентной связи [2].

Структурный элемент соответствует такому набору взаимодействующих атомов. Его матрица жесткости состоит из матриц жёсткости четырёх отдельных типов элементов (см. рисунок): упругих отрезков, моделирующих валентную связь – тип 1 и силу Ван-дер-Ваальса – тип 2; а также два угловых элемента между парой валентных связей, исходящих из одного атома – тип 3, и угловой элемент между валентной связью и связью Ван-дер-Ваальса – тип 4, причем у каждого элемента своя жёсткость. Коэффициенты для матриц жёсткости этих четырёх элементов получены пересчётом, через собственные частоты колебаний трёхузловых фрагментов графена. Данные фрагменты применяются для моделирования системы из атома и двух его ближайших соседей.



Образцы связей.

Решается матричное уравнение для вычисления частот [2]:

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

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

В качестве базовой модели 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 [3]. Полученный с их помощью набор из трёх частот подставляется в (1) и получается система из трёх уравнений. При этом в ней используется $[K]$ – матрица жёсткости трёхузлового фрагмента в рамках модели общего гармонического поля, которая содержит в себе 4 коэффициента. После решения системы получается решение, в котором три коэффициента зависят от четвёртого. Конкретнее, через $k_{2(GHF)}$ – жёсткость элемента, моделирующего силы Ван-дер-Ваальса связи, выражаются $k_{1(GHF)}$ – жёсткость валентной связи, $k_{\gamma 1(GHF)}$ и $k_{\gamma 2(GHF)}$ – жёсткости угловых элементов типа 3 и 4.

Пределы изменения $k_{2(GHF)}$, при котором получаются действительные значения зависящих от него коэффициентов составляют:

$$-123,413 \leq k_{2(GHF)} \leq 521,782 \text{ Дж/м}^2 \quad (2)$$

Варьируя значение $k_{2(GHF)}$ в указанных пределах, можно получить набор значений остальных коэффициентов.

Рассчитаем набор коэффициентов для графена, взяв значения на краях допустимого множества, и близкое к середине допустимых значений. В этом случае получаем три набора коэффициентов:

1. $k_{2(GHF)} = -100$ Дж·м⁻², $k_{1(GHF)} = 619$ Дж·м⁻², $k_{\gamma 1(GHF)} = 8,78 \cdot 10^{-19}$ Дж·м⁻², $k_{\gamma 2(GHF)} = 2,01 \cdot 10^{-19}$ Дж·рад⁻².

2. $k_{2(GHF)} = 200$ Дж·м⁻², $k_{1(GHF)} = 521$ Дж·м⁻², $k_{\gamma 1(GHF)} = -3,91 \cdot 10^{-18}$ Дж·м⁻², $k_{\gamma 2(GHF)} = 7,93 \cdot 10^{-18}$ Дж·рад⁻².

3. $k_{2(GHF)} = 500$ Дж·м⁻², $k_{1(GHF)} = 15,0$ Дж·м⁻², $k_{\gamma 1(GHF)} = -1,86 \cdot 10^{-17}$ Дж·м⁻², $k_{\gamma 2(GHF)} = 3,85 \cdot 10^{-17}$ Дж·рад⁻².

Наличие отрицательных жёсткостей во всех трёх наборах допустимо, т.к. работает система, содержащая все элементы в совокупности.

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

Матрица жёсткости системы формируется из матриц отдельных элементов. Затем в ней и в столбце нагрузок учитываются граничные условия. В результате получаем следующую систему линейных алгебраических уравнений:

$$[K] \cdot \bar{U} = \bar{F} \quad (3)$$

где $\bar{U}$ – вектор перемещений, $\bar{F}$ – вектор усилий.

Относительные деформации получаем на основе полученного решения:

$$\varepsilon_Y = \frac{\Delta l_Y}{l_Y}, \quad \varepsilon_X = \frac{\Delta l_X}{l_X} \quad (4)$$

где Δl_Y – среднее арифметическое смещения узлов верхней грани вдоль оси OY, а l_Y – размер образца вдоль оси OY, Δl_X – разность средних арифметическое смещения узлов правой и левой грани вдоль оси OX, l_X – размер образца по ширине.

Напряжение в образцах вычисляется по формуле:

$$\sigma = \frac{\sum F_i}{S}, \quad \varepsilon_X = \frac{\Delta l_X}{l_X} \quad (5)$$

где $\sum F_i$ – сумма всех приложенных усилий на верхней грани вдоль оси OY , а $S = l_X \cdot l_Z$ – площадь сечения образца. Для графена берётся $l_Z = 0,34$ нм, что равно межслоевому расстоянию в графите.

Из формулы

$$E \cdot \varepsilon_Y = \sigma \quad (6)$$

получим значение продольного модуля упругости E .

Вычисляем коэффициенты поперечной деформации:

$$\nu_X = -\frac{\varepsilon_X}{\varepsilon_Y} \quad (7)$$

где ε_X – относительная деформация вдоль оси OX , ε_Y – относительная деформация вдоль оси OY .

Сравнения значений модуля продольной упругости позволяет прийти к следующим выводам. Во всех случаях наблюдается выход на асимптоту с ростом длины образца. Только в первом случае происходит падение модуля, в отличие от роста в двух других. При этом обнаружена очень слабая зависимость от ширины образца. Абсолютные значения модуля продольной упругости находятся в пределах: $0,083 < E < 0,44$ ТПа, $0,66 < E < 1,49$ ТПа и $1,71 < E < 3,72$ ТПа для 1, 2 и 3 набора данных соответственно.

Поведение коэффициента поперечной деформации для образцов графена для разного набора жёсткостей также имеет как качественные, так и количественные отличия. Общим является его уменьшение с ростом ширины образцов наноструктур с выходом значения на асимптоту. Увеличение же длины образцов даёт качественно отличные результаты: для первого набора снижение данного показателя, а у остальных его рост, во всех случаях с выходом на асимптоту. Абсолютные значения лежат в пределах: $-0,83 < \nu < -0,06$, $0,31 < \nu < 0,58$ и $0,14 < \nu < 0,34$. При первом наборе коэффициентов наблюдается сужение образца при его растяжении, что не подтверждается опытами. При втором наборе максимальное значение коэффициента превышает теоретически допустимое равное 0,5 и только третий набор даёт приемлемые значения.

Библиографический список

1. Грибов Л. А. Колебания молекул. М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2009. 544 с.
2. Zhuravkov M. A., Nagornyi Yu.E., Repchenkov V. I. Finite element modeling of nanoscale structures // Nanotechnologies in Russia. 2011. V. 6. № 9-10. P. 597-606. DOI: 10.1134/S1995078011050168.
3. Li C., Chou T.-W. A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes// International Journal of Solids and Structures. 2003. V. 40. I. 10. P. 2487-2499. DOI: 10.1016/S0020-7683(03)00056-8.