

УДК 539.3

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕЖАТОМНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ГРАФЕНЕ С ПРИМЕНЕНИЕМ ЛИНЕЙНОЙ ТЕОРИИ СТЕРЖНЕЙ

© 2011 г.

И.Е. Беринский

Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург

iberinsk@gmail.com

Поступила в редакцию 16.06.2011

Рассмотрена кристаллическая решетка двумерного углеродного материала – графена. Построена модель решетки графена, в которой межатомные связи моделируются линейно-упругими цилиндрическими стержнями. Предложен подход, позволяющий связать дискретное описание взаимодействия частиц, моделирующих атомы решетки, и континуальное описание с помощью классической теории стержней. Определены параметры модели, соответствующие экспериментальным данным графена.

Ключевые слова: графен, механические свойства наноструктур, теория стержней.

Компьютерное моделирование все шире используется для описания свойств материалов на микроуровне. В частности, в связи с развитием нанотехнологий большой интерес представляют углеродные материалы, обладающие исключительными характеристиками, в том числе и механическим. К таким объектам относятся и ранее неизвестные аллотропные модификации углерода, такие как углеродные однослойные и многослойные нанотрубки, фуллерены, углеродные нановолокна, наноалмазы, графен и многие другие. Существует целый ряд возможностей для применения механических свойств графена. Поэтому изучение этих свойств является важной и актуальной задачей.

Методы механики деформируемого твердого тела (МДТТ) получили широкое распространение для моделирования наноструктур. Модели МДТТ получили развитие в комплексах прикладных программ на основе метода конечных элементов, которые могли бы быть полезными для расчета наноструктур. Однако исследования показывают [1–4],

что при построении таких моделей нужно тем или иным способом учитывать микроструктуру материала.

Таким образом, необходимы теории, способные объединить дискретный и континуальный подходы. В [5] предложен структурный подход для описания взаимодействия между атомами углерода. Межатомные связи там заменяются линейными пружинами различной жесткости. В [5] и в последующей литературе [6, 7] эти пружины называются стержнями, хотя изгибная жесткость, характерная для стержней, в этих моделях не учитывается. Другая дискретная модель для наноструктур, в которой межатомные связи представляются стержнями, обладающими жесткостью на растяжение и изгиб, была предложена в [7]. Параметры стержней в ней определялись с использованием известных эмпирических потенциалов взаимодействия. Подобный подход развивался позже в работах [8, 9]. Модели [5, 7] представлены на рис. 1 (а – модель Одегарда, б – модель Ли и Чу).

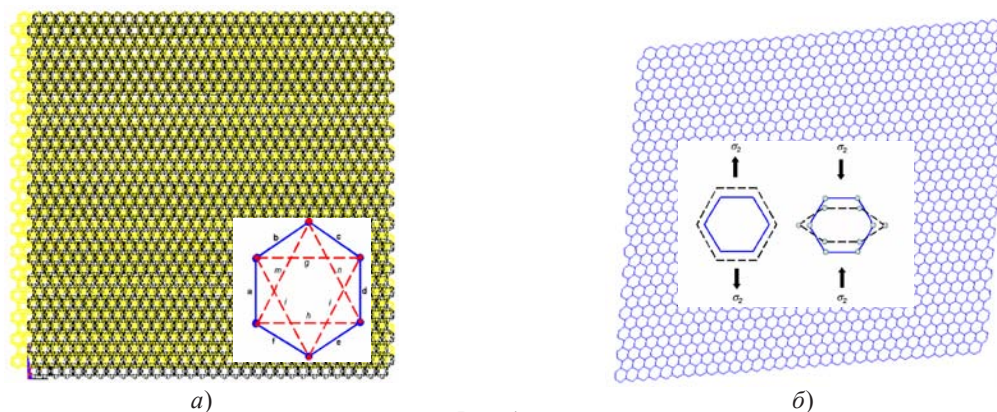


Рис. 1

В настоящем исследовании применяется подход, схожий с подходом из [7], в частности, для моделирования межатомной связи также используются гибкие стержни. Различие состоит в том, что в качестве альтернативного описания межатомной связи используется не эмпирический потенциал взаимодействия, а квадратичная форма векторов, описывающих положение частиц-атомов. Эта квадратичная форма является следствием учета моментного вклада в дополнение к силовому при описании взаимодействия между частицами. В [10] определена связь между упругими характеристиками некоторых материалов с микропараметрами моментной модели, а именно, – со значениями продольной и поперечной жесткостей межатомной связи.

Рассматриваются модели, построенные с применением различных вариантов механической теории стержней – теории Бернулли – Эйлера и теории Тимошенко [11]. Цель исследования – получение соотношений, связывающих жесткости межатомных связей с параметрами стержневой модели и вычисление их на основе экспериментальных данных для графена. Считается, что связь между двумя атомами в кристаллической решетке моделируется линейно-упругими круглыми в сечении стержнями постоянного диаметра с длиной, равной длине межатомной связи. Модель Эйлера позволяет получить выражения для модуля Юнга и диаметра через значения продольной и поперечной жесткостей связи:

$$E = \frac{3C_A^2}{8C_D}, \quad d = \frac{2\sqrt{3}}{3} \sqrt{\frac{C_D}{C_A}} l,$$

которые полностью определяют поведение стержня для данной модели. Параметры C_A и C_D (продольная и поперечная жесткость межатомной связи) могут быть однозначно определены из упругих характеристик материала. В частности, в [10] показано, как определить такие характеристики для графена. Из данной работы следует, что в модель Тимошенко в качестве независимого параметра, кроме модуля Юнга и диаметра стержня, входит коэффициент Пуассона, который не может быть определен по известным значениям продольной и поперечной жесткостей связей, и должен быть задан из дополнительных соотношений.

Экспериментальные данные для графена [10]: $C_A = 730.2$ Н/м, $C_D = 401.6$ Н/м, $l = 0.142$ нм позволяют вычислить модуль Юнга и диаметр стержня

$$E = 8.928 \text{ ТПа}, \quad d = 0.122 \text{ нм}.$$

Таким образом, удалось определить парамет-

ры стержня Бернулли Эйлера, которые могут быть использованы для моделирования упругих свойств графена.

В результате исследования была построена модель решетки графена, в которой межатомные связи моделируются линейно-упругими цилиндрическими стержнями. Предложен подход, позволяющий связать дискретное описание взаимодействия частиц, моделирующих атомы решетки, и континуальное описание с помощью классической теории стержней.

Соотношения, полученные в результате применения этого подхода для продольной и изгибной жесткости стержня, совпадают с полученными ранее в [7, 8]. Однако в вышеупомянутых работах параметры стержней определяются, в частности, из сравнения энергии изгиба стержня с энергией изменения угла между атомными связями. В данной работе предложено сравнивать поперечную жесткость стержня с поперечной жесткостью связи, определенной на основании моментной теории. Такой подход представляется более рациональным с точки зрения физического смысла. В результате определены параметры стержней, соответствующие кристаллической решетке графена. Предложенная модель может использоваться в стандартных прикладных конечно-элементных пакетах программ с целью исследования упругих свойств графена и нанотрубок.

Список литературы

1. Yakobson B.I., Brabeck C.J., Bernholc J. // Phys. Rev. Lett. 1995. Vol. 76. P. 2511–2514.
2. Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. // Докл. РАН. 2001. Т. 381. Вып. 3. С. 345–347.
3. Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. // Физика твердого тела. 2002. Т. 44. Вып. 12. С. 2158–2163.
4. Гольдштейн Р.В., Осипенко Н.М., Ченцов А.В. // Изв. РАН. МТТ. 2008. №3. С. 164–181.
5. Odegard G.M., Gates T.S., Nicholson L.M., Wise K.E. // Compos. Sci. Technol. 2002. Vol. 62. P. 1869–1880.
6. Scarpa F., Adhikari S., Srikantha Phani A. // Nanotechnology. 2009. Vol. 20. P. 065709.
7. Li C., Chou T.W. // Int. J. Solids Struct. 2003. Vol. 40. P. 2487–2499.
8. Tserpes K.I., Papanikos P. // Composites: Part B. 2005. Vol. 36. P. 468–477.
9. Wan H., Delale F. // Meccanica. 2010. Vol. 45. P. 43–51.
10. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. // ПММ. 2007. Т. 71. Вып. 4. С. 595–615.
11. Жилин П.А. Прикладная механика. Теория тонких упругих стержней. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2007. 101 с.

MODELING INTER-ATOMIC INTERACTIONS IN GRAPHENE USING THE THEORY OF LINEAR RODS*I.E. Berinskii*

A model of graphene crystal lattice is presented. The interatomic bonds are simulated with linear elastic cylindrical rods. The approach that connects the discrete mechanical description of the system of atoms and continuum description based on rod theory is proposed. The parameters of the model that correspond to the graphene crystal lattice are determined.

Keywords: graphene, theory of rods, mechanical properties of nanostructures.