

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ГРАФЕНА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МЕХАНИКИ

С.Н. Коробейников¹, В.В. Алёхин¹, Б.Д. Аннин¹, А.В. Бабичев²

*1 - Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН
630090, Новосибирск, Россия*

*2 - Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН
630090, Новосибирск, Россия*

Графен, как материал обладающий уникальными электропроводящими и механическими свойствами (в частности, имеющими модуль Юнга и предел прочности, почти на порядок превышающими такие величины для стали), известны исследователям уже несколько десятилетий. Уникальность этого материала состоит в том, что его толщина почти равна нулю, т. е. этот материал является реально двумерным материалом. Вплоть до 2004 г. предполагалось, что 2D кристаллы углерода (графены) могут существовать в устойчивом состоянии только в составе графитов. Поэтому до 2004 г. свойства графена изучались только теоретически [1]. В 2004 г. Новоселов и др. экспериментально доказали то, что листы из графена могут существовать в устойчивом состоянии. С этого времени начался бум исследований по изучению механических и прочих свойств как графена, так и однослойных графеновых листов (ОСГЛ), многослойных графеновых листов, узких графеновых полосок и т.д.

В силу малых размеров, экспериментальные исследования по изучению механических свойств графена затруднены. Поэтому имеется лишь небольшое число исследований в этих областях, в частности, в [2] экспериментально определялись механические свойства графена.

Для теоретических исследований по изучению механических свойств графена и ОСГЛ используют три типа уравнений: квантовой механики (КМ), уравнения молекулярной динамики/молекулярной механики (МД/ММ) и уравнения механики сплошной среды (МСС), к которым, в частности, принадлежат и уравнения тонких пластин/оболочек.

В силу своей сложности уравнения КМ можно использовать лишь для ограниченного числа атомов, поэтому исследований в области деформирования 2D кристаллов графена с использованием уравнений КМ сравнительно немного. Однако, среди упомянутых выше типов уравнений, уравнения КМ самые точные. В частности, полученное в [1] методом КМ значение 2D модуля Юнга графена $Y=345$ нН/нм близко к определенному в эксперименте [2] значению $Y=340$ нН/нм. Поэтому полученные в [1] значения коэффициента Пуассона $\nu=0.149$ и модуля изгиба $D=0.238$ аДж можно принять близкими к реальным значениям.

Более широко используемыми методами моделирования деформирования, колебаний и выпучивания графеноподобных наноструктур являются методы МД/ММ и МСС. Методы МД/ММ основаны на решении классических уравнений Ньютона движения материальных частиц (в настоящей работе под материальными частицами понимаются атомы углерода) в силовых полях межатомных взаимодействий. Различают ковалентные и нековалентные взаимодействия атомов. Для атомов углерода, составляющих атомную решетку графена, известен ряд силовых полей, описывающих ковалентные взаимодействия атомов. Для моделирования нековалентных сил Ван-дер-Ваальса общепринятой практикой является использование попарного взаимодействия атомов с потенциальной энергией, описываемой функцией Леннарда - Джонса.

Метод МД основан на применении явных схем интегрирования уравнений движения наноструктур. Метод ММ первоначально предназначался для определения статического равновесия наноструктур. В настоящей работе мы относим к методу ММ также и метод пошагового интегрирования уравнений квазистатического и динамического движений наноструктур, основанный на применении неявных схем интегрирования этих уравнений в силу численной реализации неявных схем интегрирования, близкой к реализации метода определения статического равновесия.

В свою очередь, метод ММ можно разделить на стандартный метод ММ, основанный на прямом применении силовых межатомных и на метод молекулярной структурной механики (МСМ). В МСМ методе потенциальные энергии ковалентных и нековалентных взаимодействий атомов аппроксимируются потенциальными энергиями балок и стержней. В отличие от стандартного метода ММ, метод МСМ можно применять только для моделирования малых деформаций (но, возможно, больших поворотов и перемещений) графеноподобных наноструктур, так как энергии деформаций балок и стержней, составляющих наноструктуру, определяются из гармонических приближений потенциалов силовых полей. Тем не менее, при подходящем выборе механических параметров балок и стержней, для компьютерного моделирования деформирования наноструктур метод МСМ позволяет использовать существующие коммерческие конечно-элементные коды.

Целями настоящего исследования являются, во-первых, уточнение параметров силового поля DREIDING (стандартные значения приведены в [3]) и механических параметров балок, которые мы используем для компьютерного моделирования деформирования ОСГЛ стандартным методом ММ и методом МСМ соответственно; во вторых, определение механических параметров (2D модуля Юнга, коэффициента Пуассона и модуля изгибной жесткости) графена и ОСГЛ с исследованием влияния масштабного фактора на эти параметры, и, в-третьих, определение области применимости метода МСМ по сравнению со стандартным методом ММ (стандартные значения приведены в [4]).

Для достижения поставленных целей выполнены компьютерные моделирования деформирования ряда ОСГЛ с различными размерами сторон. При этом для решения задач стандартным методом ММ использовали адаптированную под решения задач наномеханики версию собственного конечно-элементного кода PIONER [5], а для решения задач методом МСМ – коммерческий конечно-элементный код MSC.Marc 2014 [6].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №15-08-01635.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Kudin K.N., Scuseria G.E., Yakobson B.I.** C2F, BN, and C nanoshell elasticity from ab initio computations // *Phys. Rev. B*. 2001. V. 64. P. 235406.
2. **Lee C., Wei X., Kysar J.W., Hone J.** Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene // *Science*. 2008. V. 123. P. 385-388.
3. **Mayo S.L., Olafson B.D., Goddard III W.A.** DREIDING: A generic force field for molecular simulations // *The Journal of Physical Chemistry*. 1990. V. B 94. P. 8897-8909.
4. **Yengejeh S.I., Kazemi S.A., Öchsner A.** A Primer on the Geometry of Carbon Nanotubes and Their Modifications. N.Y.: Springer, 2015.
5. **Korobeinikov SN, Agapov VP, Bondarenko MI, Soldatkin AN.** The general purpose nonlinear finite element structural analysis program PIONER. *Int. Conf. on Numerical Methods and Applications: Proc. Sofia*, 2004. P. 228–233.
6. **MARC Users Guide**. Vol. B: Element Library. Palo Alta: MSC.Software Corporation, 2014.