



7. Arroyo M., Belytschko T. Finite crystal elasticity of carbon nanotubes based on the exponential Cauchy–Born rule // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 69. P. 115415.
8. Brenner D. W. Empirical Potential for Hydrocarbons for Use in Simulating the Chemical Vapor Deposition of Diamond Films // Phys. Rev. Ser. B. 1990. Vol. 42. P. 9458–9471.
9. Brenner D. W., Shenderova O. A., Harrison J. A., Stuart S. J., Ni B., Sinnott S. B. A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons // J. Phys. : Condens. Matter. 2002. Vol. 14. P. 783–802.
10. Kudin K. N., Scuseria G. E. and Yakobson B. I. C2F, BN and C nanoshell elasticity from ab initio computations // Phys. Rev. Ser. B. 2001. Vol. 64. P. 235406.
11. Shimpi R. P., Patel H. G. A two variable refined plate theory for orthotropic plate analysis // Intern. J. Solids and Structures. 2006. Vol. 43, iss. 22–23. P. 6783–6799.
12. Tsiatas G. C., Yiotis A. J. A microstructure-dependent orthotropic plate model based on a modified couple stress theory // Recent Developments in Boundary Element Methods : A Volume to Honour Professor John T. Katsikadelis / ed. E. J. Sapountzakis. Southampton : WIT Press, 2010. P. 295–308.
13. Setoodeh A. R., Malekzadeh P., Vosoughi A. R. Nonlinear free vibration of orthotropic graphene sheets using nonlocal Mindlin plate theory // Proc. Mech. Part C : J. Mechanical Engineering Science. 2012. Vol. 226. P. 1896–1906.
14. Narendar S., Gopalakrishnan S. Scale effects on buckling analysis of orthotropic nanoplates based on nonlocal two-variable refined plate theory // Acta Mech. 2012. Vol. 223. P. 395–413.
15. Wang Q. Effective in-plane stiffness and bending rigidity of armchair and zigzag carbon nanotubes // Intern. J. Solid Struct. 2004. Vol. 41. P. 5451–5461.
16. Shokrieh M. M., Rafiee R. Prediction of Young's modulus of graphene sheets and carbon nanotubes using nanoscale continuum mechanics approach // Materials and Design. 2010. Vol. 31. P. 790–795.
17. Глухова О. Е., Терентьев О. А. Теоретическое исследование электронных и механических свойств C-N однослойных нанотрубок // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2007. Т. 10, № 4. С. 85–89.
18. Глухова О. Е. Жесткость Y-образных углеродных нанотрубок при деформации растяжения/сжатия // Нано- и микросистемная техника. 2009. № 1. С. 19–22.
19. Das S., Seelaboyina R., Verma V., Lahiri I., Hwang J. Y., Benerjee R., Choi W. Synthesis and characterization of self-organized multilayered graphene-carbon nanotube hybrid films // J. Mater. Chem. 2011. Vol. 21. P. 7289–7295.

УДК 539.37

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ДЕФОРМИРОВАННЫХ ГРАФЕНОВЫХ НАНОСТРУКТУР

О. Е. Глухова, И. В. Кириллова, М. М. Слепченков, В. В. Шунаев

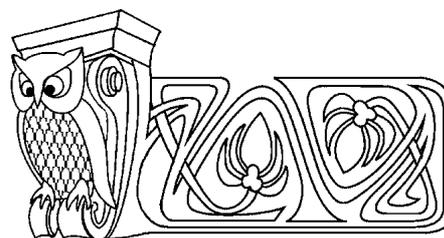
Саратовский государственный университет
E-mail: glukova@info.sgu.ru

В данной работе представлены результаты теоретического исследования свойств деформированных графеновых структур. Исследованы механические свойства бислойных графеновых нанолент с помощью метода молекулярной динамики. Для оценки механических свойств бислойного графена мы применяли нагрузку в виде осевого сжатия. В результате исследования установлено, что бислойный графен становится волнообразным по мере увеличения величины сжатия. Число полуволн, возникающих на поверхности структуры, зависит от размера графенового листа.

Ключевые слова: графен, локальные напряжения, осевое сжатие, молекулярная динамика, кривизна.

ВВЕДЕНИЕ

Одним из самых перспективных на сегодняшний день материалов для наноэлектроники является графен. С открытием графена началось интенсивное развитие новой науки — графеники. Благодаря своей двумерной структуре атомарной толщины, атомы углерода в которой упакованы в гекса-



Theoretical Investigation of the Deformed Graphene Nanostructures

O. E. Glukhova, I. V. Kirillova, M. M. Slepchenkov, V. V. Shunaev

The results of the theoretical investigations of properties of the deformed graphene structures are presented in this work. We investigated mechanical properties of the bi-layer graphene structures by means of the molecular dynamics method. To evaluate mechanical properties of graphene we applied a compression load to graphene. As a result of the investigations it was found that graphene became a wave-like with the increase of the compression. The number of half-wave, generated on the graphene surface depends on the size of graphene.

Key words: graphene, local stress, axial compression, molecular dynamics, curvature.



гональную кристаллическую решетку, графен имеет широкий спектр применения. В частности, на графеновой основе уже конструируются такие устройства, как нанотранзисторы, спиновые фильтры, суперконденсаторы, элементы памяти. В связи с этим для успешной реализации подобных устройств к графену как основному структурному компоненту последних предъявляются повышенные требования относительно его характеристик. В первую очередь, графеновому материалу необходимо выдерживать все требуемые к изделию эксплуатационные нагрузки. Следовательно, графен должен обладать повышенной механической прочностью.

Одним из эффективных способов оценки прочностных характеристик материала является испытание на внешнюю нагрузку в виде деформации различного рода: растяжение, сжатие, изгиб. В настоящее время изучению деформации графеновых нанолент посвящено множество работ. Среди видов деформирующей нагрузки часто используются растяжение и сжатие графенового слоя. Подвергая атомную структуру графена внешнему воздействию, можно оценить прочностные свойства материала, а также посмотреть, как меняется его электронная структура. Полученные результаты способствуют расширению границ областей применения графеновых наноструктур.

Для исследования процессов деформации графена существует ряд теоретических и экспериментальных методов. Исследование сдвига фооновых частот — эффективный способ оценки степени напряжения, передающегося материалу при наложении деформации вдоль выбранной оси. Методы рамановской спектроскопии признаны успешными для наблюдения фоонов широкого диапазона графитовых материалов, включая графен, при осевом сжатии или гидростатическом давлении. В экспериментах по сжатию/растяжению исследуются как образцы взвешенного графенового листа, так и листа на подложке. В работе [1] графеновые образцы подвергались циклической осевой деформации (растяжение–сжатие) с помощью использования полимерных кантилеверов. В результате проведенных исследований было обнаружено, что критическое напряжение для искривленного графена зависит от размера образца и его геометрических параметров относительно оси деформации. По мнению авторов работы [1] такое поведение графеновой структуры при нагрузке обусловлено классическим случаем продольного изгиба Эйлера. В то же время авторы отмечают значимость подложки при проведении эксперимента. В упомянутой работе в качестве подложки использовались полимерные слои. В результате исследования установлено, что жесткость при изгибе графенового образца, осажженного на подложке, возрастает на 6 порядков величины.

В работе [2] стабильность гексагональной структуры графеновых нанолент armchair, подвергнутых осевому сжатию, теоретически исследуется с помощью атомистического моделирования. В качестве метода исследования используется классический молекулярно-динамический метод, основывающийся на потенциале Бреннера. Первоначально координаты всех атомов составляли плоскую поверхность ячеистой решетки, а начальные скорости атомов были получены из распределения Максвелла–Больцмана при данной температуре. Скорость сжатия, проводимого в данной работе, составляла 1.6 м/с. Краевые атомы фиксировались на каждом этапе сжатия. К краям структуры были приложены граничные условия и условия опирания. В ходе исследований, проводимых в работе [2], обнаружено, что после многих этапов сжатия графеновая нанолента начинала искажаться, а форма деформированной ленты определяется ее размером.

Наряду с изучением линейных упругих свойств графеновых структур (модуль Юнга и коэффициент Пуассона), активно ведутся работы по исследованию поведения графена при нелинейной упругой деформации. В частности, в работе [3] исследовалась нелинейная упругая деформация графеновых нанолент при квазистатическом осевом растяжении, принимая во внимание краевую структуру графена. Изучение осуществлялось с помощью атомистического моделирования и модели сплошной среды. Установлена взаимосвязь таких аспектов графеновых структур, как механическая реакция и их электронные свойства в контексте поиска путей управления электронной структурой материала. Анализируя влияние деформации растяжения на электронную структуру графена, авторы работы [3] в рамках линейной теории упругости и метода сильной связи выявили, что растяжение графенового листа на 20% и более индуцирует появление энергетической щели в электронном спектре.

Обнаружено, что бислойный графен обладает высокими прочностными свойствами. На основе молекулярно-динамического моделирования с использованием метода Бреннера авторы работы [4] установили, что модуль Юнга биграфена равен 0.8 ТПа. Также в этой работе выявлена зависимость



модуля упругости биграфена от температуры. При низкой температуре (порядка 20 К) модуль Юнга биграфена оказывается на 14% меньше, чем при комнатной температуре. Особое внимание уделено влиянию межслойного sp^3 связывания на прочностные свойства бислойного графена. В работе [5] проводится молекулярно-динамическое исследование биграфена, между отдельными атомами которого существуют sp^3 -связи. Взаимодействие между атомами описывалось методом, основывающемся на потенциале REBO, хорошо зарекомендовавшим себя при изучении механических свойств углеродных структур. В результате расчетов было установлено, что модуль Юнга биграфена с sp^3 -связыванием составляет 0.907 ТПа, а прочности на растяжение и разрыв структуры такого типа составляют 86.55 ТПа и 0.135 ТПа соответственно.

Целью данной работы является исследование механических свойств бислойного графена с помощью метода молекулярной динамики, основанном на методе атом-атомных потенциалов с оригинальной параметризацией весовых коэффициентов энергетической функции для углеродных наноструктур.

1. МЕТОД АТОМ-АТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ГРАФЕНОВЫХ СТРУКТУР

Полная энергия графеновой структуры определяется моделью валентного силового поля с учетом взаимодействия для несвязанных атомов:

$$E = \sum K_r(r - r_0)^2 + \sum K_\theta(\theta - \theta_0)^2 + \sum \frac{K_a}{r^{12}} + \frac{K_b}{r^6}. \quad (1)$$

В формуле (1) K_r , K_θ , K_a , K_b — весовые коэффициенты, соответствующие каждому слагаемому, первое из которых отвечает за изменение длин связи в графите ($r_0 = 1.42 \text{ \AA}$), второе — за изменение углов между связями по отношению к углу между связями в графите ($\theta_0 = 120^\circ$), третье — за взаимодействие Ван-дер-Ваальса.

Весовые коэффициенты есть суть решения минимаксной задачи:

$$\min \max S(A), S(A) = \sum_{i=1}^n |r_i - r_i^0|, \quad (2)$$

где $A = \{K_r, K_\theta, K_a, K_b\}$ — вектор варьируемых параметров, $\{r_i\}$ — множество длин связей углерод-углерод, $\{r_i^0\}$ — множество известных значений, рассчитанных или экспериментально полученных. Глобальный минимум для каждого набора находился с помощью построения целевой функции и смещения соответственно ее профилю базиса. Множество $\{r_i\}$ находилось минимизацией полной энергии (1) графенового листа по координатам всех атомов.

Чтобы решить минимаксную задачу, потребовались большие затраты ресурсов компьютеров, поскольку, чтобы достичь глобального минимума энергии (1) для одного набора параметров, необходимо было выполнить несколько тысяч итераций, каждая из которых соответствовала поиску минимума около базисной точки.

В результате решения минимаксной задачи (2) получены следующие значения весовых коэффициентов: $K_r = 3.25 \cdot 10^2 \text{ Дж/м}^2$, $K_\theta = 4.4 \cdot 10^{-19} \text{ Дж/рад}^2$, $K_a = 4.0 \cdot 10^{-39} \text{ Дж/м}^{12}$, $K_b = 1.5 \cdot 10^{-80} \text{ Дж/м}^6$.

В нашем исследовании расчет энергии вычислялся молекулярно-динамическим методом в реальном времени. Через каждую фемтосекунду, принятую за квант времени, вычисляется сила, действующая на каждый атом. Например, если Δx — сдвиг по оси X , то из разницы энергий и вычисляется проекция силы на ось X :

$$F_x = \frac{(E(x - \Delta x) - E(x + \Delta x))}{2 \cdot \Delta x}. \quad (3)$$

Изменение конфигурации объекта на данном шаге определяется в результате решения уравнений Ньютона. На следующем шаге процесс повторяется.

2. МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГРАФЕНОВЫХ НАНОСТРУКТУР

С целью изучения механических свойств биграфена мы применили деформацию осевого сжатия к бислойным графеновым нанолентам. Объектами исследования были наноленты zigzag. Симулирование осевого сжатия осуществлялось с помощью молекулярно-динамического метода. Равномерное сжатие шло вдоль направления продольной оси. Скорость равномерного сжатия 20 м/с.



Модель биграфена, подвергнутого осевому сжатию, представляла собой 2 наноленты, каждая из которых состояла из 646 атомов углерода и имела длину 65 Å, а ширину 19.8 Å. Расстояние между слоями графена составляло 3.4 Å. На начальном этапе сжатия графеновая структура сохраняла плоскую конфигурацию. Однако при сжатии на 0.4% наблюдался фазовый переход: структура из плоской становилась волнообразной. Последующее сжатие привело к формированию двух полуволн. Далее, атомная структура бислойного графена снова перестаривалась: с двух полуволн он вышел на одну дугу. При сжатии структуры до 98% исходной длины картина формирования полуволны принимала явный вид. Дальнейшее сжатие не изменило атомной структуры биграфена. Следовательно, конфигурация с одной полуволной является устойчивой модой искривленного биграфена.

Для установления закономерности поведения бислойных графеновых структур под действием осевого сжатия была проведена серия численных экспериментов для нанолент различной протяженности. Нарастивался зигзагоподобный край структуры, а ширина оставалась неизменной. Структура наращивалась последовательно увеличением числа гексагонов на один. Фазовый переход для нанолент различной длины происходил при сжатии структуры на 0.4–0.5%. При этом осевое сжатие до 98% приводило также к образованию нескольких полуволн, однако полуволны были не всегда одинаковыми по амплитуде и длине. Картина нескольких одинаковых полуволн возникала только при определенной исходной длине. Такие значения длин биграфена нами были установлены. Были получены наноленты с тремя и четырьмя идентичными полуволнами, симметрично расположенными вдоль оси сжатия.

Из данных, приведенных в таблице, видно, что бислойные графеновые наноленты с тремя и четырьмя полуволнами характеризуются приблизительно одинаковой амплитудой полуволн и их длиной.

Геометрические характеристики искривленных графеновых нанолент zigzag, сжатых до 98% от своей первоначальной длины

Количество полуволн	Количество атомов в структуре	Длина наноленты, Å	Длина полуволны, Å	Амплитуда полуволны, Å	Количество гексагонов в полуволне	Ширина наноленты, Å
2	1100	65	32.32	3.1	13	19.88
3	2780	165.18	55.06	5.48	20	
4	3340	198.7	49.8	5.55	20	

На рис. 1 и 2 (а, б) показаны подвергнутые осевому сжатию до 98% бислойные наноленты с длинами из таблицы и карты распределения локальных напряжений по атомам структуры.

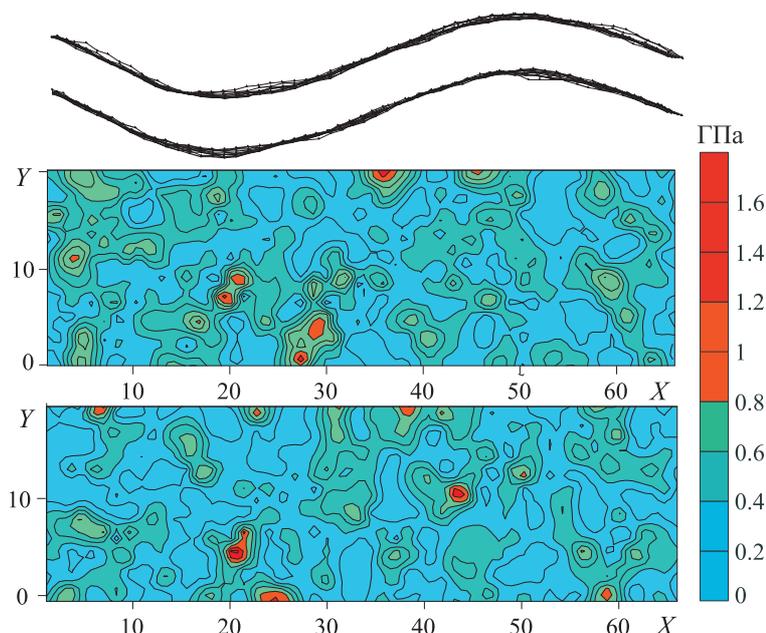


Рис. 1. Карта распределения локальных напряжений для наноленты zigzag при количестве полуволн, образующихся на поверхности, равном двум

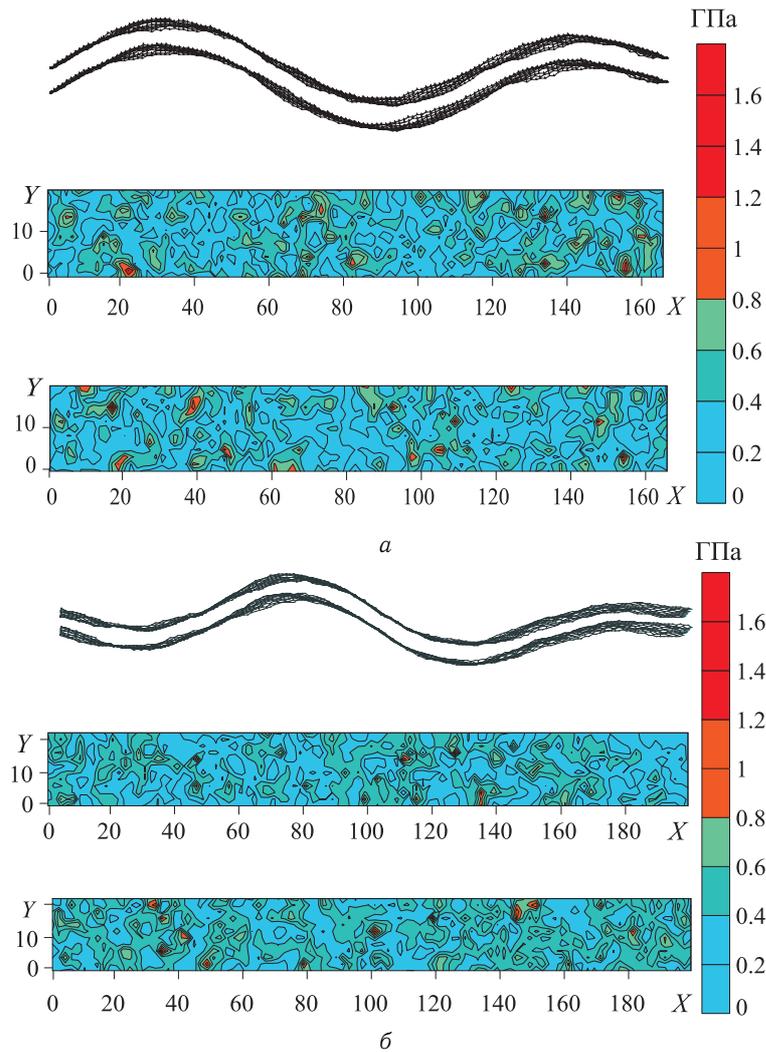


Рис. 2. Карта распределения локальных напряжений для наноленты zigzag при количестве полуволн, образующихся на поверхности, равном трем (а) и четырем (б)

В качестве двух координат были взяты координаты X , Y атомов, а третья ось демонстрирует напряжение на атомах. Таким образом, искривленная лента как бы спроецирована на плоскость XY , что позволяет наглядно видеть наиболее напряженные участки. Наибольшее напряжение ~ 1.6 – 1.7 ГПа наблюдается вблизи края zigzag. Возникающие отдельные небольшие островки повышенного напряжения обусловлены исключительно математическими особенностями моделирования во времени процесса сжатия. По мере сжатия происходит перестройка атомной сетки, но полностью сетка не успевает релаксировать, поскольку процесс сжатия динамический. Из-за этого в атомном каркасе на каждом шаге сжатия присутствуют флуктуации напряжения, но все они меньше 1.8 ГПа и не приводят к появлению дефектов.

ВЫВОДЫ

В ходе теоретического исследования установлено, что бислойные графеновые наноленты zigzag теряют свою устойчивость уже при сжатии на 0.2 – 0.4% и трансформируются в несколько полуволн при сжатии на 2% . Устойчивым состоянием искривленного бислойного графена является конфигурация атомной структуры с одной полуволной, на которую бислойный графен выходил при сжатии на 7 – 10% . Количество полуволн на промежуточном этапе определяется исключительно длиной ленты. Длина полуволн и их амплитуда определяются топологией атомной сетки.



Работа выполнена в рамках Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы (XLI очередь мероприятия 1.2.1, технические науки, номер заявки в информационной компьютеризированной системе 2012-1.2.1-12-000-2013-064).

Библиографический список

1. Frank O., Tsoukleri G., Parthenios J., Papagelis K., Riaz I., Jalil R., Novoselov K. S. Compression Behavior of Single-Layer Graphenes // ACS Nano. 2010. Vol. 4. P. 3131–3138.
2. Neek-Amal M., Peeters F. M. Graphene nano ribbons subjected to axial stress // Phys. Rev. Ser. B. 2010. Vol. 82, iss. 8. P. 085432–085437.
3. Lu Q., Gao W., Huang R. Atomistic simulation and continuum modeling of graphene nanoribbons under uniaxial tension // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2011. Vol. 19, № 5. P. 054006–054022.
4. Neek-Amal M., Peeters F. M. Nanoindentation of a circular sheet of bilayer graphene // Phys. Rev. Ser. B. 2010. Vol. 81, iss. 23. P. 235421–235426.
5. Zhang Y. Y., Wang C. M., Cheng Y., Xiang Y. Mechanical properties of bilayer graphene sheets coupled by sp³ bonding // Carbon. 2011. Vol. 49, iss. 13. P. 4511–4517.

УДК 539.374

ТОЧНО СОХРАНЯЮЩИЕСЯ ИНВАРИАНТЫ СВЯЗАННОГО МИКРОПОЛЯРНОГО ТЕРМОУПРУГОГО ПОЛЯ

В. А. Ковалев, Ю. Н. Радаев*

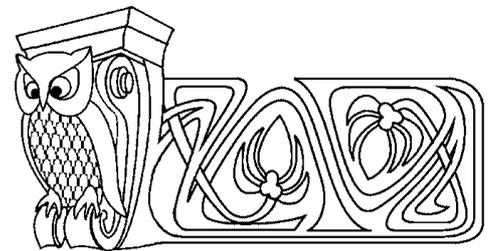
Московский городской университет управления Правительства Москвы

E-mail: vlad_koval@mail.ru

*Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского РАН, Москва

E-mail: radayev@ipmnet.ru, y.radayev@gmail.com

Теория микрополярной термоупругости рассматривается как ковариантная физическая теория поля. Получены 4-ковариантные уравнения нелинейного гиперболического микрополярного термоупругого континуума с «нежестким» репером локальных поворотов. Исследования по чисто упругому микрополярному континууму восходят к известной работе Э. Коссера и Ф. Коссера 1909 г. Задается естественная плотность термоупругого действия (естественная плотность лагранжиана), вариационный интегральный функционал и сформулирован соответствующий принцип наименьшего термоупругого действия. Наряду с дифференциальными уравнениями поля, дается вывод определяющих уравнений микрополярного термоупругого континуума, выступающих при теоретико-полевым подходе просто как *сокращенные обозначения* для канонических полевых производных. Теоретико-полевая концепция позволяет также сформулировать *связанные* уравнения гиперболической микрополярной термоупругости с уравнением транспорта тепла гиперболического аналитического типа. В случае плоского 4-пространства–времени вариационные симметрии интегрального функционала термоупругого действия используются для построения ряда канонических тензоров и законов сохранения связанного микрополярного термоупругого поля. В настоящей статье с помощью вариационных симметрий, соответствующих трансляциям и вращениям плоского 4-пространства–времени определены компоненты канонического тензора энергии–импульса и углового импульса; сформулированы законы сохранения полной энергии, канонического импульса и канонического углового импульса поля. Канонический угловой импульс поля в качестве составляющей включает момент рефе-



On Precisely Conserved Quantities of Coupled Micropolar Thermoelastic Field

V. A. Kovalev, Yu. N. Radayev

The paper is devoted to the 4-covariant formulation in four-dimensional space–time of dynamics of non-linear hyperbolic micropolar thermoelastic continuum. Theory of micropolar continuum are due to E. Cosserat and F. Cosserat and their study of 1909. The complement microdeformations and microrotations of an element are described by a non-rigid trihedron (the case of deformable micropolar directors). Hyperbolic micropolar type-II thermoelastic continuum is considered as a physical field theory with the action density taking account of wave nature of heat transport (the second sound phenomenon in solids) according to the Green&Naghdi type-II model. The principle of the least action for a micropolar thermoelastic field is formulated. The canonical Euler–Lagrange field equations are derived from the principle of least action. These equations include a hyperbolic heat transport equation. Currents corresponding 4-translations and 4-rotations of the four-dimensional space–time are obtained. The 4-covariant representations are rewritten in three-dimensional forms as usual for continuum mechanics. The currents are required in order to formulate conservation laws particularly the conservation of energy. The latter may be represented as path- or surface-independent integrals known from the continuum mechanics and often used in applied problems. Regular explicit covariant formulae for the field current are obtained provided the symmetry