

УДК 539.3

DOI: 10.15372/PMTF202315320

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОНСТАНТ УПРУГОСТИ ГРАФИНА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

П. В. Полякова, Р. Т. Мурзаев, Ю. А. Баимова

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия

E-mails: polina.polyakowa@yandex.ru, murzaevrt@gmail.com, julia.a.baimova@gmail.com

С использованием метода молекулярной динамики рассчитаны константы жесткости пяти структурных конфигураций графина — монослоя углерода, в котором атомы уложены особым образом и имеют sp - и sp^2 -гибридизацию. Установлено, что укладка атомов в слое графина оказывает существенное влияние на константы жесткости. Обнаружено, что наибольшую константу жесткости c_{11} (1091 ГПа) имеет γ_2 -графин, наименьшую (258 ГПа) — α -графин. Показано, что β_3 -графин и γ_2 -графин являются сильно анизотропными структурами.

Ключевые слова: графин, молекулярная динамика, константы жесткости

Двумерные структуры представляют собой функциональные материалы, обладающие уникальными физико-механическими свойствами [1, 2]. В 2004 г. в эксперименте был получен графен — одноатомный слой графита [3]. У этого материала обнаружено большое количество новых физических свойств, которые обусловлены его двумерной структурой [4]. В настоящее время помимо графена известно большое количество других двумерных структур, одной из которых является графин — монослой атомов углерода, имеющих sp - и sp^2 -гибридизацию и особым образом уложенных в решетке [5]. В данной работе методом молекулярной динамики (МД) рассчитываются константы жесткости для пяти структурных конфигураций графина.

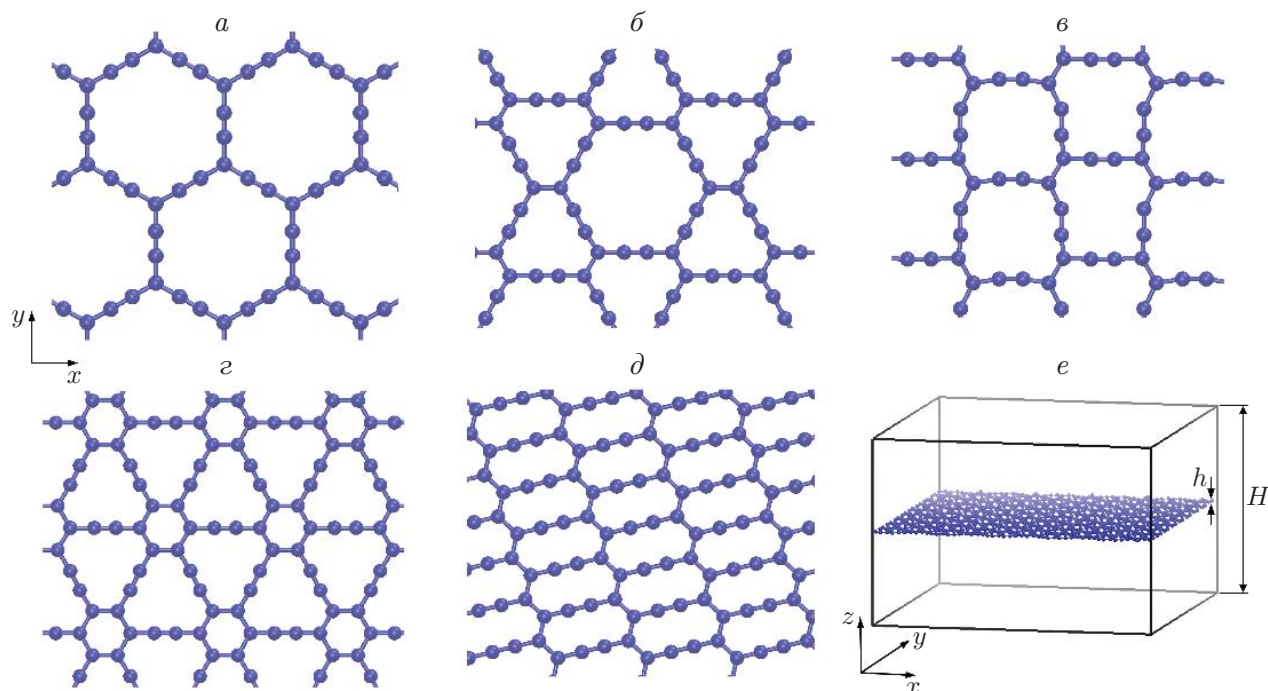
На рисунке показаны фрагменты ячеек моделирования для пяти основных конфигураций графина: α , β_1 , β_3 , γ_1 , γ_2 [6]. Графин α , β_1 , γ_1 имеет гексагональную анизотропию, графин β_3 — ромбическую, а γ_2 — моноклинную. Размеры начальной структуры: $L_x = 250$ Å, $L_y = 250$ Å.

Расчеты проводятся с использованием программы LAMMPS и межатомного потенциала AIREBO. С помощью термостата Нозе — Хувера в системе поддерживается постоянная температура, равная 0,001 К. Периодические граничные условия применяются во всех направлениях. Размер расчетной ячейки по нормали к плоскости графина $H = 20$ Å значительно больше толщины графина $h = 3,4$ Å.

Для расчета констант жесткости c к ячейке моделирования прикладывается растягивающая деформация $\varepsilon = 0,1$ %, а затем рассчитываются напряжения σ , возникающие

Работа выполнена в рамках гранта Республики Башкортостан РФ для молодых ученых и государственного задания молодежной лаборатории Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

© Полякова П. В., Мурзаев Р. Т., Баимова Ю. А., 2023



Фрагменты ячейки моделирования конфигураций графина α (а), β_1 (б), β_3 (в), γ_1 (г) и γ_2 (д) в проекции на плоскость x, y , а также ячейка моделирования, используемая для расчета констант упругости графина (е)

в решетке. Константы жесткости рассчитываются на основе закона Гука:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix}.$$

В случае гексагональной сингонии имеется пять независимых констант жесткости c_{11} , c_{12} , c_{13} , c_{33} , c_{44} и константа c_{66} , определяемая по формуле $c_{66} = 0,5(c_{11} - c_{12})$, в случае ромбической сингонии — девять констант c_{11} , c_{12} , c_{13} , c_{22} , c_{23} , c_{33} , c_{44} , c_{55} , c_{66} , в случае моноклинной сингонии — 13 констант c_{11} , c_{12} , c_{13} , c_{15} , c_{22} , c_{23} , c_{25} , c_{33} , c_{35} , c_{44} , c_{46} , c_{55} , c_{66} . Поскольку графин является двумерным материалом, а его толщина вдоль оси z пренебрежимо мала, число констант жесткости для данной структуры уменьшается до четырех: c_{11} , c_{22} , c_{12} , c_{66} .

Значения полученных констант жесткости графина приведены в таблице. Для α -, β_1 -, γ_1 -графина $c_{11} = c_{22}$, для β_3 - и γ_2 -графина константы жесткости c_{11} и c_{22} различаются, что свидетельствует о сильной анизотропности этих материалов. Полученные значения констант жесткости γ_1 -графина согласуются с результатами расчетов в работах [7, 8], где методами теории функционала плотности и МД соответственно определена жесткость данной конфигурации графина, составившая 564,4 и 700 ГПа соответственно.

Таким образом, с использованием метода МД проведен расчет констант жесткости двумерных материалов. Установлено, что атомная структура графина оказывает суще-

Константы жесткости графина различных конфигураций

Конфигурация графина	c_{11} , ГПа	c_{22} , ГПа	c_{12} , ГПа	c_{66} , ГПа
α	257,95	257,95	202,15	25,70
β_1	374,34	374,34	211,30	80,90
β_3	447,22	259,39	31,07	53,61
γ_1	523,96	523,96	192,58	180,62
γ_2	1091,40	349,52	225,46	250,10

ственное влияние на значения констант жесткости. Обнаружено, что среди пяти конфигураций графина наибольшую константу жесткости $c_{11} = 1091$ ГПа имеет γ_2 -графин, а конфигурации графина β_3 и γ_2 являются сильно анизотропными.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Кривцов А. М., Подольская Е. А.** Моделирование упругих свойств кристаллов с гексагональной плотноупакованной решеткой // Изв. РАН. Механика твердого тела. 2010. № 3. С. 77–86.
2. **Беринский И. Е., Кривцов А. М.** Об использовании многочастичных межатомных потенциалов для расчета упругих характеристик графена и алмаза // Изв. РАН. Механика твердого тела. 2010. № 6. С. 60–85.
3. **Geim A. K., Novoselov K. S.** The rise of graphene // Nature Materials. 2007. V. 6. P. 183–191.
4. **Аннин Б. Д., Баимова Ю. А., Мулюков Р. Р.** Механические свойства, устойчивость, коробление графеновых листов и углеродных нанотрубок (обзор) // ПМТФ. 2020. Т. 61, № 5. С. 175–189.
5. **Baughman R. H., Eckhardt H., Kertesz M.** Structure-property predictions for new planar forms of carbon: Layered phases containing sp^2 and sp atoms // J. Chem. Phys. 1987. V. 87. P. 6687–6699.
6. **Belenkov E. A., Mavrinskii V. V., Belenkova T. E., Chernov V. M.** Structural modifications of graphyne layers consisting of carbon atoms in the sp - and sp^2 -hybridized states // J. Exp. Theor. Phys. 2015. V. 120. P. 820–830.
7. **Kang J., Li J., Wu F., et al.** Elastic, electronic, and optical properties of two-dimensional graphyne sheet // J. Phys. Chem. C. 2011. V. 115. P. 20466–20470.
8. **Cranford S. W., Buehler M. J.** Mechanical properties of graphyne // Carbon. 2011. V. 49, N 13. P. 4111–4121.

Поступила в редакцию 30/V 2023 г.,
после доработки — 19/VI 2023 г.
Принята к публикации 26/VI 2023 г.