

ИЗГИБ КРУГЛОЙ ПЛАСТИНЫ ГРАФЕНА В МОДЕЛИ ВАЛЕНТНО-СИЛОВОГО ПОЛЯ

Алехно Е.А., Нагорный Ю.Е., Репченков В.И., Чижик С.А.

Белорусский государственный университет

It was developed computer model of single graphite atomic layer (graphene) crystal lattice on basis of valence-force-field approach. One performed computational experiments to determine mechanical characteristic – in-plane Young's modulus of graphene sheet for the bending. One realized comparison present results with results obtained within numerical experiments on a tension.

Графен представляет собой плоскую структуру углерода в которой атомы лежат в вершине правильного шестиугольника и образуют с тремя соседями идентичные валентные связи (Рис. 1а). При формировании механической модели обычно учитывается взаимодействие внутри группы из четырёх атомов (Рис. 1б). Наибольшие силы возникают при деформировании этого фрагмента в его плоскости. Это обусловлено относительно большими значениями силовых коэффициентов, соответствующих валентной связям ($k_1=652.15$ Дж·м⁻²) и взаимодействию направленных валентностей ($k_2=43.44$ Дж·м⁻²). Третий коэффициент, характеризующий выход периферийного атома из плоскости фрагмента, равен $k_3=119.19$ Дж·м⁻² [1, 2]. Упругие свойства графена, проявляющиеся при нагружении его в его плоскости достаточно хорошо изучены [3 - 6]. В данной работе рассматривается ситуация когда нагрузка прикладывается ортогонально плоскости слоя, в котором лежат атомы.

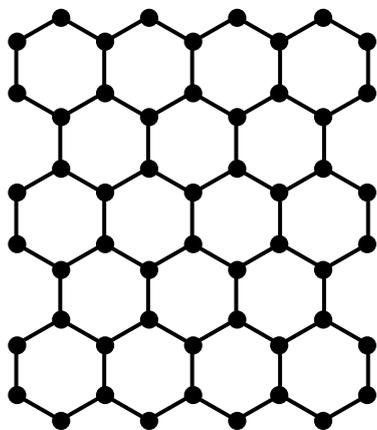


Рис. 1а) Модель графена

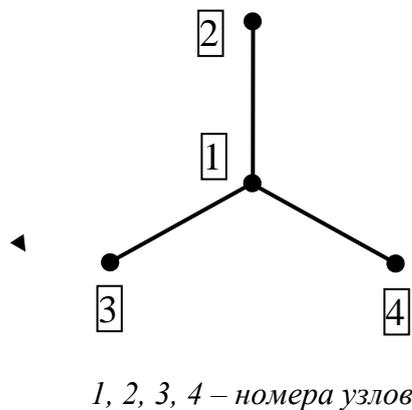


Рис. 1б) 4-х узловой конечный элемент

В качестве структурного элемента для построения механической модели выберем фрагмент из четырёх атомов (Рис. 1б). Составим матрицу жёсткости этого элемента, предполагая, что атомы могут смещаться только ортогонально к его плоскости, то есть имеют одну степень свободы. Воспользуемся физическим смыслом столбцов матрицы жёсткости – элементы i -го столбца образуют уравновешенную систему сил, необходимых для того, чтобы изменить i -ю степень свободы на единицу, оставив остальные без из-

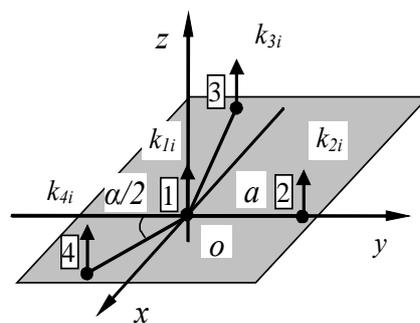


Рис. 2 Уравновешенная система узловых сил

менений. Запишем уравнения равновесия для сил и моментов (Рис. 2), учитывая, что длины валентных связей одинаковы и равны a , валентные углы равны $\alpha = 2\pi / 3$:

$$\sum F_z = k_{1i} + k_{2i} + k_{3i} + k_{4i} = 0, \quad i = \overline{1,4} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \sum M_x &= k_{2i} \cdot a - k_{3i} \cdot a \cdot \cos \frac{\alpha}{2} - k_{4i} \cdot a \cdot \cos \frac{\alpha}{2} = \\ &= a(k_{2i} - \frac{k_{3i}}{2} - \frac{k_{4i}}{2}) = 0, \quad i = \overline{1,4} \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \sum M_y &= k_{3i} \cdot a \cdot \sin \frac{\alpha}{2} - k_{4i} \cdot a \cdot \sin \frac{\alpha}{2} = \\ &= a \frac{\sqrt{3}}{2} (k_{3i} - k_{4i}) = 0, \quad i = \overline{1,4} \end{aligned} \quad (3)$$

Из (3) следуют равенства

$$k_{3i} = k_{4i}, \quad i = \overline{1,4} \quad (4)$$

Подставив (4) в (2) получим

$$k_{2i} = k_{4i}, \quad i = \overline{1,4} \quad (5)$$

Учитывая (4) и (5), выразим из (1) элементы первой строки:

$$k_{1i} = -3k_{4i}, \quad i = \overline{1,4} \quad (6)$$

Кроме того, учтём условие симметрии матрицы жёсткости:

$$k_{ij} = k_{ji}, \quad i, j = \overline{1,4} \quad (7)$$

Это позволяет прийти к соотношениям:

$$\begin{aligned} k_{4i} &= k_{i4}, \quad i = \overline{1,4} \\ k_{41} &= -3k_{44}, \\ k_{42} &= k_{44}, \\ k_{43} &= k_{44}, \end{aligned} \quad (9)$$

Окончательно можно записать:

$$[K] = k_{44} \begin{bmatrix} 9 & -3 & -3 & -3 \\ -3 & 1 & 1 & 1 \\ -3 & 1 & 1 & 1 \\ -3 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad (10)$$

где $k_{44}=k_3$.

Отметим, что ранг получившейся матрицы равен единице, то есть удовлетворяются обычные условия – равновесие объекта возможно только при опирании, как минимум, на три точки. Это требует наложения трёх граничных условий при решении задачи статики для элемента. Однако, как показало исследование различных частных случаев, закрепление трёх узлов системы элементов не достаточно. Необходимо фиксировать большее число степеней свободы. В этом смысле данная механическая модель группы из четырёх атомов не полна.

Ниже сопоставляется численное решение для круглой пластинки графена (Рис. 3) на основе конечного элемента с матрицей жёсткости (10) и аналитическое решение для тонкой упругой пластинки с защемлённым краем в центре которой приложена сила F . На Рис. 3 узлы, лежащие внутри окружности, свободны, вне – зафиксированы. Каждый узел, примыкающий к окружности изнутри, образует вместе с тремя внешними узлами элемент. Поскольку плоскость в которой лежат закреплённые атомы неподвижна, а движется только четвёртый атом каждого элемента на границе, то расчётная сетка реализует схему защемления.

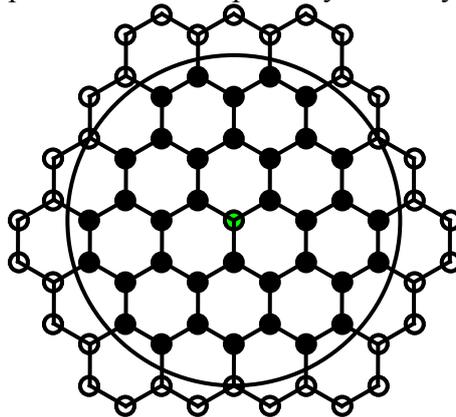


Рис. 3 Расчётная сетка, светлые кружки – зафиксированные узлы

Перемещение точек круглой пластинки с защемлённым краем даётся формулой [7]:

$$u(r) = \frac{F}{8\pi D} \cdot \left(\frac{1}{2} (R^2 - r^2) - r^2 \ln \left(\frac{R}{r} \right) \right), \quad (11)$$

где $D = \frac{E h^3}{12(1-\nu^2)}$; E , ν – модуль Юнга и коэффициент Пуассона материала пла-

стинки, $h=3.4\text{Å}$ – толщина, радиус действия межслоевых молекулярных сил в графите. Эта формула позволяет вычислить комбинацию констант D , если приравнять прогиб по центру для численного решения к $u(r)$ при $r \rightarrow 0$ для аналитического. Теперь становится возможно построить график зависимости

$E = E(\nu)$ (Рис. 4):

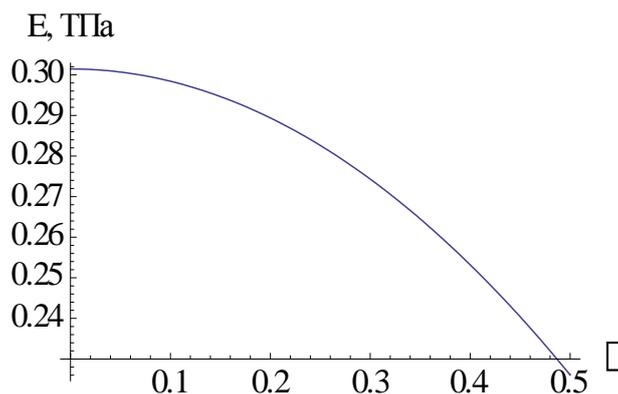


Рис. 4

В работе [5] приведены результаты расчёта модуля Юнга пластины графена работающей на растяжение–сжатие. В зависимости от размеров пластины модуль меняется в пределах $0.7 \text{ ТПа} < E_2 < 0.78 \text{ ТПа}$. Таким образом в случае изгиба расчётный модуль оказывается в ~ 2.5 раз меньше. По-видимому, выбор 4-х атомного кластера в качестве конечного элемента приводит к неполному учёту изгибных свойств. Поэтому необходимо либо рассмотрение более сложных моделей, либо уточнение силового коэффициента.

Литература

1. A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes. Chunyu Li, Tsu-Wei Chou // International journal of Solids and Structures. — 2003. — Vol. 40 — P. 2487-2499.
2. Odegard G.M., Gates T.S., Nicholson L.M., Wise K.E. Equivalent-Continuum Modeling With Application to Carbon Nanotubes // NASA Langley Research Center: Technical Memorandum NASA/TM-2002-211454. 2002.
3. Елецкий А. В. // Механические свойства углеродных наноструктур и материалов на их основе // Усп. физ. наук, 2007, т. 177, №3
4. В. И. Репченко, С. В. Сыроежкин, С. А. Чижик. Зависимость механических свойств наночастиц графена от доли граничных атомов // Тепло- и массоперенос: Сб. ст. — 2005. — С. 106-111
5. Нагорный Ю.Е., Репченко В.И., Сыроежкин С.В., Чижик С.А. // Расчёт механических свойств графена в модели валентно-силового поля // Теоретическая и прикладная механика : Сб. ст. — 2007, вып 22, с. 182-186
6. Нагорный Ю.Е., Репченко В.И., Чижик С.А. // Численное моделирование механического поведения наноструктуры графена, содержащего разрез. // Теоретическая и прикладная механика: Сб. ст. — 2008. — вып 23 — с. 157-159
7. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. // Теоретическая физика Т VII. — М.: Наука, 1987. — С. 68