

С. Н. Коробейников, В. В. Алёхин, А. В. Бабичев

МОЛЕКУЛЯРНАЯ МЕХАНИКА ОДНОСЛОЙНЫХ ГРАФЕНОВЫХ ЛИСТОВ

Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, г. Новосибирск, Россия

Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН, г. Новосибирск, Россия

Аннотация. Получены наборы материальных и геометрических параметров силового поля DREIDING и балочного элемента, точно воспроизводящие механические модули графена в рамках стандартного метода ММ и метода МСМ. Эти методы реализованы в компьютерных кодах Pioneer и MSC.Marc соответственно. Компьютерное моделирование частот и форм собственных колебаний однослойного графенового листа показало, что как частоты, так и соответствующие им формы собственных колебаний, полученные обоими методами, близки между собой, а также близки к частотам и формам колебаний почти квадратной сплошной пластинки, моделирующей ОГЛ.

Ключевые слова: графен, механические модули, метод молекулярной механики.

DOI: 10.37972/chgpu.2020.44.2.009

УДК: 539.3

Введение

Метод молекулярной механики (ММ) широко используется для моделирования деформаций, колебаний и выпучивания углеродных тонкостенных наноструктур: однослойных графеновых листов (ОГЛ), однослойных углеродных нанотрубок, фуллеренов и т. д. Так как графен является структурным материалом для этих наноструктур,

© Коробейников С. Н., Алёхин В. В., Бабичев А. В. 2020

Коробейников Сергей Николаевич

e-mail: korob@hydro.nsc.ru, доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией, Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, г. Новосибирск, Россия.

Алёхин Владимир Витальевич

e-mail: alekhin@hydro.nsc.ru, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, г. Новосибирск, Россия.

Бабичев Алексей Владимирович

e-mail: babichev@igm.nsc.ru, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт геологии и минералогии им. В. С. Соболева СО РАН, г. Новосибирск, Россия.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Правительства Российской Федерации (грант № Р220-14.W03.31.0002).

Поступила 10.03.2020

то разработка как методов ММ, так и компьютерных кодов для их реализации, воспроизводящих с высокой точностью механические модули графена (модуль Юнга, коэффициент Пуассона и модуль изгибной жесткости), позволяют адекватно определить как частоты и формы колебаний, так и критические нагрузки и формы выпучивания этих наноструктур. Метод ММ можно разделить на стандартный метод ММ, основанный на прямом использовании силовых полей атомных взаимодействий и метод молекулярной структурной механики (МСМ), в котором потенциальные энергии атомных взаимодействий аппроксимируются потенциальными энергиями балочных элементов и/или ферм. Мы реализуем стандартный метод ММ с помощью силового поля DREIDING [1], а метод МСМ — с помощью балочных элементов Бернулли–Эйлера с круглым поперечным сечением. Мы реализуем первый метод в коде Pioneer [2], а второй метод — в коммерческом коде MSC.Marc [3]. Цель настоящей работы состоит, во-первых, в установлении параметров силового поля DREIDING, а также материальных и геометрических параметров балочных элементов, точно моделирующих механические модули графена и, во-вторых, в проведении сравнительного анализа частот и форм собственных колебаний почти квадратного ОГЛ, полученных стандартным методом ММ и методом МСМ.

Параметры моделей графена, точно воспроизводящие его механические модули

Мы провели в [4] анализ имеющихся в литературе данных о механических модулях графена, основанных как на квантово-механических расчетах, так и на экспериментальных исследованиях. Из этого анализа следует, что значения модуля Юнга Y , коэффициента Пуассона ν и модуля изгибной жесткости D

$$Y = 345 \text{ Н/м}, \quad \nu = 0.17, \quad D = 0.245 \text{ аДж.} \quad (1)$$

можно полагать близкими к реальным значениям.

В соответствии с силовым полем DREIDING [1], потенциальную энергию ковалентных взаимодействий атомов углерода в атомной решетке графена можно представить в виде разложения на элементарные потенциальные энергии вида:

- потенциальная энергия растяжения связи (потенциал Морзе)

$$V_{\text{bs}}(r) \equiv \bar{D}[e^{-2\bar{\alpha}(r-r_e)} - 2e^{-\bar{\alpha}(r-r_e)}], \quad (2)$$

где r — расстояние между атомами углерода, r_e — межатомное расстояние, соответствующее минимальной потенциальной энергии растяжения связей, \bar{D} — глубина потенциальной ямы, а $\bar{\alpha}$ — заданный параметр, определяющий форму потенциала;

- потенциальная энергия изменения угла между соседними связями

$$V_{\text{ba}}(\theta) \equiv \frac{1}{2}k_{\text{ba}}(\cos \theta - \cos \theta_0)^2 / \sin^2 \theta_0, \quad (3)$$

где θ_0 и θ — отсчетное и текущее значения угла между соседними связями, а k_{ba} — параметр модели;

- потенциальная энергия кручения связи

$$V_{\text{da}}(\phi) \equiv \frac{1}{2}k_{\text{da}}(1 - \cos 2\phi), \quad (4)$$

где ϕ — текущее значение двугранного угла, а k_{da} — параметр модели;

- потенциальная энергия инверсии связи (энергия угла, соответствующая выходу атома из плоскости трех соседних атомов)

$$V_{ia}(\psi) \equiv k_{ia}(1 - \cos \psi), \quad (5)$$

где ψ — текущее значение угла инверсии, а k_{ia} — параметр модели.

В [4] показано, что при использовании стандартного метода ММ, следующий набор параметров силового поля DREIDING

$$\bar{\alpha} = 22.92 \text{ нм}^{-1}, \quad \bar{D} = 0.685240 \text{ аДж}, \quad r_e = 0.142 \text{ нм}, \quad k_{ba} = 1.329928 \text{ аДж}, \\ k_{da} = 0.090289 \text{ аДж}, \quad k_{ia} = 0.144463 \text{ аДж}. \quad (6)$$

точно воспроизводит механические модули графена (1).

Потенциальную энергию малых деформаций прямолинейной балки Бернулли-Эйлера из упругого материала можно представить суммой трех элементарных энергий:

- энергия продольной деформации балки при изменении ее длины на ΔL

$$V_A(\Delta L) \equiv \frac{1}{2} E_b \frac{A}{L} (\Delta L)^2; \quad (7)$$

- энергия изгиба балки на угол $\Delta\alpha$

$$V_B(\Delta\alpha) \equiv \frac{1}{2} E_b \frac{I}{L} (2\Delta\alpha)^2; \quad (8)$$

- энергия кручения балки на угол $\Delta\beta$

$$V_T(\Delta\beta) \equiv \frac{1}{2} G_b \frac{J}{L} (\Delta\beta)^2. \quad (9)$$

Здесь L — длина балки, A — площадь ее поперечного сечения, I и J — момент инерции и полярный момент инерции поперечного сечения балки соответственно, E_b и G_b — модуль Юнга и модуль сдвига материала балки. Параметры A , I , J круглого поперечного сечения балки выражаются через ее диаметр d_b следующим образом:

$$A = \frac{\pi}{4} d_b^2, \quad I = \frac{\pi}{64} d_b^4, \quad J = \frac{\pi}{32} d_b^4. \quad (10)$$

В [5] показано, что при использовании метода МСМ, следующий набор параметров балки

$$d = 0,121565 \text{ нм}, \quad L = 0,142 \text{ нм}, \quad E_b = 8808,127 \text{ нН/нм}^2, \quad G_b = 705,997 \text{ нН/нм}^2 \quad (11)$$

точно воспроизводит механические модули графена (1).

Компьютерные коды, реализующие метод ММ

Для реализации стандартного метода ММ мы используем конечно-элементный код Pioneer [2]. При этом для каждой из элементарных энергий (2)-(5) силового поля DREIDING развита формулировка специализированного конечного элемента [6]. Компьютерные моделирования собственных колебаний ОГЛ, представленные ниже, проведены с использованием набора параметров (6) силового поля DREIDING. Для реализации метода МСМ мы используем коммерческий конечно-элементный код MSC.Marc [3]. При этом для моделирования ковалентных связей атомов углерода мы используем конечные элементы прямолинейной балки Бернулли-Эйлера (элемент №52 в классификации MSC.Marc) с круглым поперечным сечением с использованием набора параметров (11).

Формы (m, n)	Циклические частоты свободных колебаний (в ТГц)		
	ММ метод	МСМ метод	$\tilde{\omega}_{mn}$ (12)
(1,1)	0.0459	0.0465	0.0464
(2,1)	0.1138	0.1149	0.1149
(1,2)	0.1161	0.1171	0.1171
(2,2)	0.1829	0.1857	0.1857
(3,1)	0.2270	0.2287	0.2291
(1,3)	0.2330	0.2347	0.2350
(3,2)	0.2949	0.2995	0.2998
(2,3)	0.2989	0.3034	0.3035

Таблица 1. Циклические частоты свободных колебаний и соответствующие формы ОГЛ

Результаты компьютерных моделирований

В первую очередь, используя представительные ячейки графена для моделирования однородных деформаций, мы подтвердили, что наборы параметров (6), (11) с высокой точностью воспроизводят механические модули графена обоими методами (стандартным ММ и МСМ).

Затем мы провели частотный анализ почти квадратного шарнирно опертого по всем сторонам ОГЛ, состоящего из 1530 атомов углерода со сторонами 6.149 нм \times 6.248 нм в направлениях «кресло» и «зигзаг» соответственно. Атомы моделируются сосредоточенными частицами с массами $m_a = 0.019927$ нН пс²/нм, равным массам атомов углерода. Далее частоты и формы собственных колебаний ОГЛ мы будем сравнивать с соответствующими частотами и формами собственных колебаний эквивалентной упругой пластинки. Обозначая через $\tilde{\omega}_{mn}$ и W_{mn} циклические частоты (в ТГц) и нормальный к поверхности пластинки прогиб (в нм) для соответствующей формы собственных колебаний пластинки соответственно, где m и n — количество полуволн вдоль сторон пластинки с длинами a_1 и a_2 (в нм) соответственно, имеем

$$\tilde{\omega}_{mn} = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{D_p}{\rho_s}} \left(\frac{m^2}{a_1^2} + \frac{n^2}{a_2^2} \right), \quad W_{mn} = A \sin \frac{m\pi x_1}{a_1} \sin \frac{n\pi x_2}{a_2}. \quad (12)$$

Здесь x_1, x_2 — декартовы координаты поверхности пластинки вдоль ее сторон с длинами a_1 и a_2 соответственно, A — амплитуда прогиба пластинки (в нм), которая принимает произвольные значения, D_p — изгибная жесткость материала пластинки (в аДж) и ρ_s — плотность массы материала пластины на единицу ее площади (масса/площадь) (в нН \cdot пс²/нм³). При моделировании ОГЛ пластинкой, мы приравниваем изгибную жесткость материала упругой пластинки изгибной жесткости графена, т.е. полагаем $D_p = 0.245$ аДж, для значения ρ_s мы используем значение массовой плотности графена на единицу площади

$$\rho_s = m_a/S_a = 0.7607524 \text{ нН} \cdot \text{пс}^2/\text{нм}^3 (= 0.7607524 \cdot 10^{-6} \text{ кг}/\text{м}^2),$$

а значения a_1 и a_2 приравниваем длинам сторон в направлениях «кресло» и «зигзаг» соответственно.

Результаты частотного анализа приведены в табл. 1 (m и n — числа полуволн вдоль сторон «кресло» и «зигзаг» соответственно).

Так как все полученные моды свободных колебаний близки друг с другом, то на рис. 1 представлены только формы свободных колебаний ОГЛ, полученные в компьютерных моделированиях стандартным методом ММ.

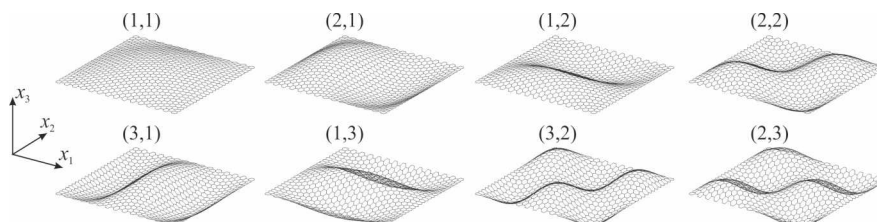


Рис. 1

Из приведенных в табл. 1 значений циклических частот собственных колебаний и отмеченной близости соответствующих им форм (рис. 1) следует, что оба метода (стандартный ММ и МСМ) могут успешно применяться к определению частот и форм собственных колебаний ОГЛ.

Заключение

Получены наборы материальных и геометрических параметров силового поля DREIDING и балочного элемента, точно воспроизводящие механические модули графена в рамках стандартного метода ММ и метода МСМ. Эти методы реализованы в компьютерных кодах Pioneer и MSC.Marc соответственно. Компьютерное моделирование частот и форм собственных колебаний ОГЛ показало, что как частоты, так и соответствующие им формы собственных колебаний, полученные обоими методами, близки между собой, а также близки к частотам и формам колебаний почти квадратной сплошной пластинки, моделирующей ОГЛ.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Mayo S.L., Olafson B.D., Goddard III W.A. DREIDING: A generic force field for molecular simulations // J. Phys. Chem. 1990. V. 94. P. 8897–8909.
- [2] Korobeynikov S.N., Agapov V.P., Bondarenko M.I., Soldatkin A.N. The general purpose nonlinear finite element structural analysis program PIONER // Proceedings of the International Conference on Numerical Methods and Applications. Sofia: Publishing House of the Bulgarian Academy of Science, 1989. P. 228–233.
- [3] MARC Users Guide. Vol. A. Theory and Users Information // Newport Beach: MSC.Software Corporation, 2015.
- [4] Korobeynikov S.N., Alyokhin V.V., Babichev A.V. Simulating of graphene mechanical parameters by the DREIDING force field // Acta Mech. 2018. V. 229. P. 2343–2378.
- [5] Korobeynikov S.N., Alyokhin V.V., Babichev A.V. On the molecular mechanics of single layer graphene sheets // Int. J. Eng. Sci. 2018. V. 133. P. 109–131
- [6] Korobeynikov S.N., Alyokhin V.V., Annin B.D., Babichev A.V. Quasi-static buckling simulation of single-layer graphene sheets by the molecular mechanics method // Math. Mech. Solids. 2015. V. 20. P. 836–870.

Korobeynikov S. N., Alyokhin V. V., Babichev A. V.

MOLECULAR MECHANICS OF SINGLE LAYER GRAPHENE SHEETS

Lavrentyev Institute of Hydrodynamics of the Siberian Branch of the RAS, Novosibirsk, Russia

Sobolev Institute of Geology and Mineralogy of the Siberian Branch of the RAS, Novosibirsk, Russia

Abstract. Sets of material and geometric parameters of the DREIDING force field and beam element, which accurately reproduce the mechanical modules of graphene in the framework of the standard MM method and the MSM method, are obtained. These methods are implemented in computer codes Pioneer and MSC.Marc, respectively. Computer simulation of the frequencies and modes of natural vibrations of a single-layer graphene sheet showed that both the frequencies and the corresponding modes of natural vibrations obtained by both methods are close to each other, as well as close to the frequencies and modes of vibration of an almost square continuous plate simulating a single-layer graphene sheet.

Keywords: graphene, mechanical moduli, molecular mechanics method.

REFERENCES

- [1] Mayo S.L., Olafson B.D., Goddard III W.A. DREIDING: A generic force field for molecular simulations // *J. Phys. Chem.* 1990. V. 94. P. 8897–8909.
- [2] Korobeynikov S.N., Agapov V.P., Bondarenko M.I., Soldatkin A.N. The general purpose nonlinear finite element structural analysis program PIONER // *Proceedings of the International Conference on Numerical Methods and Applications.* Sofia: Publishing House of the Bulgarian Academy of Science, 1989. P. 228–233.
- [3] MARC Users Guide. Vol. A. Theory and Users Information // Newport Beach: MSC.Software Corporation, 2015.
- [4] Korobeynikov S.N., Alyokhin V.V., Babichev A.V. Simulating of graphene mechanical parameters by the DREIDING force field // *Acta Mech.* 2018. V. 229. P. 2343–2378.
- [5] Korobeynikov S.N., Alyokhin V.V., Babichev A.V. On the molecular mechanics of single layer graphene sheets // *Int. J. Eng. Sci.* 2018. V. 133. P. 109-131
- [6] Korobeynikov S.N., Alyokhin V.V., Annin B.D., Babichev A.V. Quasi-static buckling simulation of single-layer graphene sheets by the molecular mechanics method // *Math. Mech. Solids.* 2015. V. 20. P. 836-870.

Korobeynikov Sergey Nikolaevich, D.Sc., Head of Laboratory, Lavrentyev Institute of Hydrodynamics of the Siberian Branch of the RAS, Novosibirsk, Russia.

Alyokhin Vladimir Vitalyevich, D.Sc., Leading Researcher, Lavrentyev Institute of Hydrodynamics of the Siberian Branch of the RAS, Novosibirsk, Russia.

Babichev Aleksey Vladimirovich, PhD, Major Researcher, Sobolev Institute of Geology and Mineralogy of the Siberian Branch of the RAS, Novosibirsk, Russia.