

ПРОЧНОСТНЫЕ СВОЙСТВА УГЛЕРОДНЫХ СТРУКТУР РАЗЛИЧНОЙ РАЗМЕРНОСТИ

Баимова Ю. А.

*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия,
julia.a.baimova@gmail.com*

Введение. Применение различных наноматериалов во многом базируется на понимании их механических и прочностных свойств. Знание теоретического предела прочности, области механической устойчивости, значений критических деформаций при конечных температурах играет важную роль в физике твердого тела. Поскольку в последние десятилетия большой интерес исследователей направлен на изучение низкоразмерных углеродных структур, а также родственных графену двумерных наноматериалов, изучение их механических и физических свойств, деформационного поведения, области механической устойчивости приобретает важное значение. Не прекращаются дискуссии о прочности графена, нанотрубок, о возможности получения новых углеродных структур под действием гидростатического сжатия, об их уникальных механических свойствах. В связи с этим, большой интерес представляет изучение прочностных свойств и деформационного поведения углеродных наноструктур различной размерности и влияния деформации на их свойства. В данной работе методом молекулярной динамики исследована прочность и деформационное поведение графена, фуллерита, систем нанотрубок и углеродных алмазоподобных фаз. Показаны критические деформации на растяжение и сжатие, исследованы структурные изменения, проведено сравнение свойств для структур одинаковой размерности.

В настоящее время методы компьютерного моделирования часто применяются как эффективные и не дорогие способы исследования различных свойств углеродных материалов. Например, метод молекулярной динамики позволяет описать движение атомов или частиц методами классической механики, а также реализовать действие сил Ван-дер-Ваальса и рассмотреть достаточно большие системы атомов на коротких временных интервалах.

Методы. Моделирование проводится методом молекулярной динамики с использованием свободно распространяемого пакета LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator), где основным потенциалом для описания межатомного взаимодействия является потенциал AIREBO. Данный потенциал ранее успешно использовался для моделирования различных процессов в углеродных структурах разной размерности: для моделирования теплопроводности графена и графеновых нанолент [1], изучения нелинейных явлений в углеродных структурах [2], исследования деформационного поведения скомканного графена [3]. Кроме того, в работе использовались написанные авторами программные коды и стандартный набор межатомных потенциалов [4] для исследования прочности графена.

На рис. 1 представлены исследованные структуры: графен, скомканный графен, фуллерит, система нанотрубок, пример углеродной алмазоподобной фазы СВ. Структуры представлены в разном масштабе. Графен характеризуется sp^2 -гибридизацией, так же, как и фуллерит, скомканный графен и система нанотрубок, однако в последних названных структурах единичные элементы связаны между собой силами Ван-дер-Ваальса как в графите. В алмазоподобных фазах атомы углерода имеют sp^3 -гибридизацию. Силы Ван-дер-Ваальса в рамках потенциала AIREBO реализуются за счет потенциала Леннарда-Джонса. Моделирование проводилось при нулевой температуре.

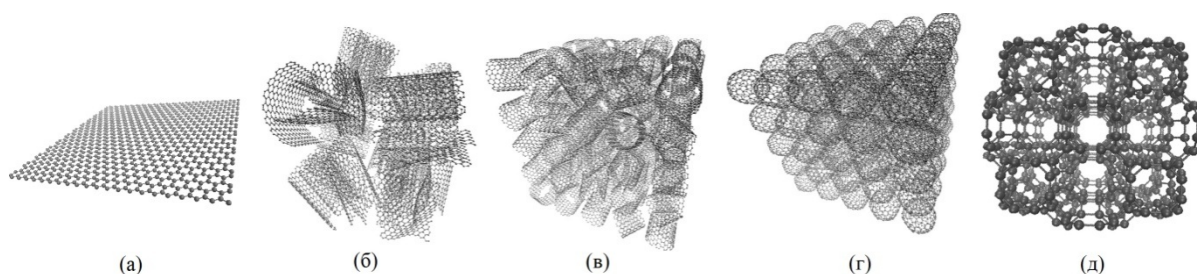


Рисунок 1- Исходные структуры (а) графен, (б) скомканный графен, (в) система нанотрубок, (г) фуллерит и (д) алмазоподобная фаза СВ.

Результаты. Расчет мембранных сил показал, что графен является устойчивым только при $T_x \geq 0$ и $T_y \geq 0$. При отрицательных (сжимающих) компонентах мембранных сил графен теряет свою плоскую форму из-за нулевой изгибной жесткости. Значение максимальных сдвиговых мембранных сил, которые выдерживает графен составляет примерно 17 Н/м, а значение максимальных растягивающих мембранных сил – $T_x \approx T_y \approx 18$ Н/м. При этом критические значения деформаций составили для гидростатического растяжения $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = 0,27$, при одноосной деформации вдоль направления зигзаг графен остается устойчив до $\epsilon_{xx} = 0,35$, при деформации в направлении кресло до $\epsilon_{yy} = 0,25$. Дефекты (дефект Стоуна-Троузера-Уэлса или дислокация), как и температура, сильно понижают критические величины деформаций.

Сравнение кривых напряжение-деформация показано на рис. 2 для четырех структур: скомканного графена, фуллерита, системы нанотрубок и материала, содержащего все четыре структурные единицы. Результаты представлены для трех схем нагружения – гидростатического, двухосного и одноосного сжатия.

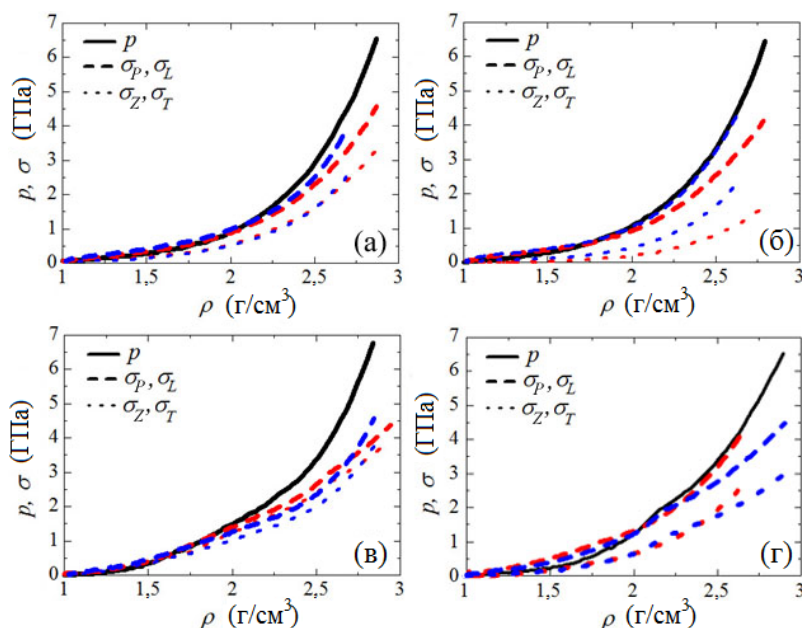


Рисунок 2 - Давление (напряжение) как функция плотности при T = 300 К для (а) скомканный графен, (б) система нанотрубок, (в) фуллерит и (г) смешанный материал для трех схем нагружения: гидростатическое сжатие (сплошная линия), двухосное сжатие (красная пунктирная линия) и одноосное сжатие (синие штриховая линия)

Как видно из рис. 2, происходит увеличение жесткости и прочности при сжатии, что является уникальным свойством подобных материалов и может быть объяснено образованием не поддающихся сжатию складок. Получено, что для скомканного графена влияние схемы нагружения наиболее слабое, и все кривые близки друг к другу, в то время как для фуллерита наблюдается значительное отличие гидростатического нагружения от других двух видов сжатия. Интересно, что для системы нанотрубок, кривые гидростатического и одноосного сжатия совпадают,

однако отличаются от кривой для двухосного нагружения. Смешанный материал показывает более сложное поведение, поскольку все структурные единицы вносят разный вклад в деформацию.

На рис. 3а представлены кривые изменения напряжения от деформации для пяти устойчивых углеродных алмазоподобных фаз. Для А3 и А9 наблюдается появление участка упругой деформации, причем А3 может быть упруго растянут вплоть до значений деформации 0.019, а А9 до деформации 0.0038. Остальные структуры выраженной стадии упругой деформации не имеют, и даже при малых приложенных деформациях, происходят необратимые структурные изменения. На кривой растяжения наблюдается две стадии неупругой деформации. При гидростатическом сжатии все структуры, кроме А3 (толстая сплошная линия) переходят в аморфное состояние уже при давлении 40-50 ГПа.

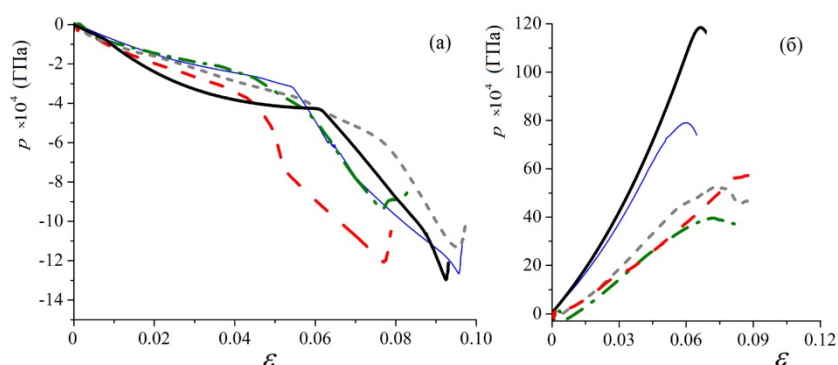


Рисунок 3 - Зависимость гидростатического давления от деформации для пяти различных углеродных алмазоподобных фаз при растяжении (а) и сжатии (б).

Выводы. Методом молекулярной динамики исследовано деформационное поведение и прочность большого многообразия структур. Получены критические деформации на растяжение для графена. Выявлено, что дефект и температура понижают прочность. Структуры в основе которых лежат различные аллотропы углерода при сжатии демонстрируют увеличение прочности, а для углеродных алмазоподобных фаз, сжатие приводит к переходу в аморфное состояние. Достаточно большие степени растягивающей деформации для углеродных алмазоподобных фаз реализуются за счет изменения длин валентных связей и валентных углов.

Работа поддержана грантом Президента Российской Федерации для поддержки молодых российских учёных - докторов наук (МД-1651.2018.2)

Список литературы:

1. B. Liu, C.D. Reddy, J. Jiang, H. Zhu, J.A. Baimova, S.V. Dmitriev, K. Zhou // J. Phys. D: Appl. Phys. 2014. V. 47. N 16. P. 165301.
2. С.В. Дмитриев // Письма о материалах, 2016. Т. 6. №1. С. 86-89.
3. Ю.А. Баимова, Б. Лиу, К. Жоу // Письма о материалах, 2014. Т. 4. №2. С. 139-142.
4. Ю.А. Баимова, А.В. Савин // Письма о материалах, 2011. Т. 1. №3. С. 171-175.