

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ НАНОСТРУКТУРЫ ГРАФЕНА, СОДЕРЖАЩЕЙ РАЗРЕЗ

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

The mathematical model of graphene nanostructure containing a cut is constructed and realized in package Mathematica. Dependences of forces arising in valence bonds at loading and Young modulus from length of defect are investigated. It is shown, that at edge of a cut forces grow in some times. Young modulus decreases almost in two.

Механика разрушения является необходимой составной частью расчетов на прочность и устойчивость. В классической теории в основе лежит задача Гриффитса о трещине в линейно упругой среде в виде математического разреза в условиях простого однородного напряженно-деформированного состояния. В окрестности вершины трещины поле напряжений имеет особенность вида K_J / \sqrt{r} , где r – расстояние от края, K_J – постоянная, называемая коэффициентом интенсивности напряжений. Её величина зависит от размера трещины. Резкое возрастание напряжений в данном случае приводит, естественно, к уменьшению прочности и увеличению податливости, что обязательно учитывается при проектировании.

Расширение сферы применения наноразмерных систем делает актуальным решение аналогичной задачи в нанобласти. Речь идёт об исследовании изменения их механических свойств при появлении в них трещиноподобных дефектов, когда в какой-либо части системы, например, нарушаются валентные связи между атомами. Понятно, что это приводит к перераспределению нагрузки и росту силовых факторов в элементах, расположенных в непосредственной близости от дефекта.

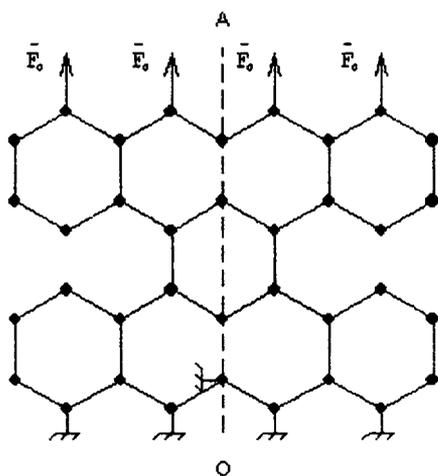


Рис. 1

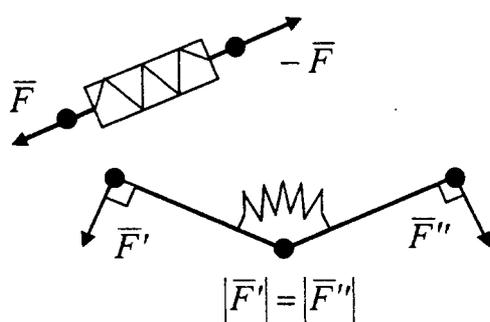


Рис. 2

В данной работе рассматривается простейшая ситуация – нагружению в виде растяжения подвергается регулярная структура графена с нарушениями в виде симметричного разрыва валентных связей по краям (рис. 1). Вычисляются силы, действующие в валентных связях между атомами и силы, раскрывающие упругий структурный элемент в виде трёх атомов (рис. 2). Расчёт проводится в рамках силовой модели [1] с использованием двух элементов показанных на рис. 2. Математическая модель строится на основе алгоритмов МКЭ [2]. Компьютерная модель оригинальна, реализована в пакете Mathematica. Для уменьшения необходимых ресурсов рассматривается половина структуры, показанной на рис. 1. На вертикальной границе ОА выбраны граничные условия в виде закрепления атомов по горизонтали, на горизонтальной границе запрещены смещения по вертикали. Силовые постоянные элементов приняты $k_2 = 126 \text{ kcal mol}^{-1} \text{ rad}^{-2}$ [3].

Необходимо отметить, что сами по себе валентные связи образуют чисто шарнирную систему, не обладающую никакими упругими свойствами. Только когда учитываются угловые элементы ($k_2 \neq 0$) возникает сопротивление нагружению. Точно так же одни угловые элементы тоже не обеспечивают жёсткости.

Результаты расчётов отображены на графиках (рис. 3–7). Рассматриваются наиболее только наиболее нагруженные вертикальные валентные связи. На первом графике показано распределение сил в бездефектной системе размером 15×15 ячеек. По горизонтали откладываются координаты середин связей и к ним привязываются нормированные значения сил F_i / F_0 , где i – номер связи. Видно, что распределение практически равномерное, только на границах слева и справа усилия немного меньше, примерно $0,95F_0$. Если удалить одну связь (рис. 1), то происходит перераспределение нагрузки – два элемента на краю ниже и выше “разреза” оказываются разгруженными. Зато усилие в связи, непосредственно примыкающей к дефекту, возрастает почти в два раза (график на рис. 4).

Характер распределения не изменяется с ростом длины дефекта, что иллюстрирует график на рис. 5 для системы с $L=5$ из $L_0=15$ отсутствующими связями. Естественно увеличится максимальное значение силы – примерно в четыре с половиной раза.

Зависимость максимальной силы от размера разреза близка к линейной и показана на рис. 6. Понятно, что прочность образца уменьшается в обратной пропорции.

Когда дефектов нет, вертикальные смещения атомов на верхней границе очень мало отличаются друг от друга. При наличии “разреза” край испытывает большие смещения чем центр. Смещения точек на краю и в центре могут различаться в несколько раз (рис. 7), то есть отклонение от однородности весьма существенно. Если, тем не менее, ввести среднее значение по всем точкам на верхнем крае и вычислить упругий коэффициент по формуле

$$E = \frac{F_0}{\sqrt{3}at} \cdot \frac{l}{\Delta l},$$

где $a = 0.142$ нм – длина валентной связи, соответственно $\sqrt{3}a$ – расстояние между двумя противоположно расположенными связями, $t = 0.34$ нм – величина межслоевого расстояния в графите, принимается в качестве толщины пластины графена, l – высота модели, Δl – среднее удлинение, то получаются значения меньшие исходного E_0 . Соответственно податливость системы возрастает. Зависимость E / E_0 от длины дефекта приведена на графике рис. 8.

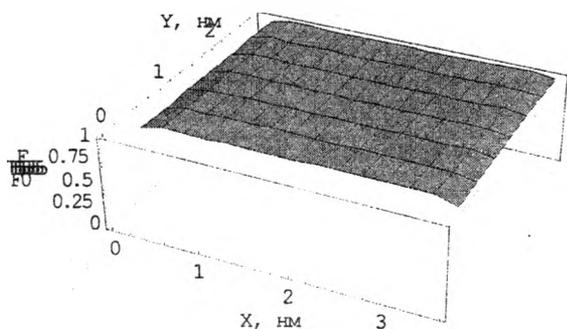


Рис. 3 Зависимость нормированного значения силы в вертикальной валентной связи от координат при отсутствии дефектов

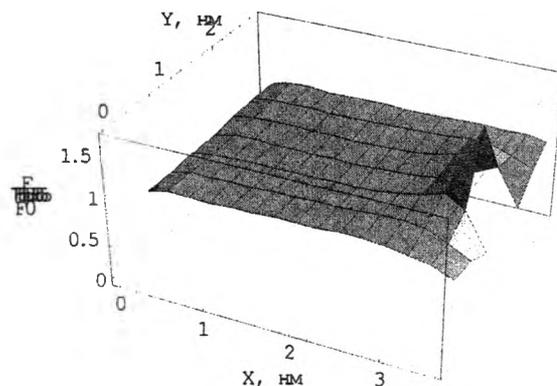


Рис. 4 Зависимость нормированного значения силы в вертикальной валентной связи от координат при наличии одного дефекта

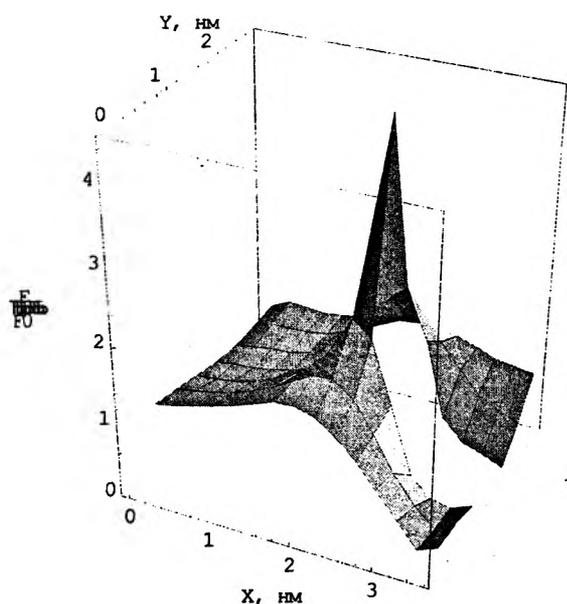


Рис. 5. Зависимость нормированного значения силы в вертикальной валентной связи от координат при наличии пяти дефектов

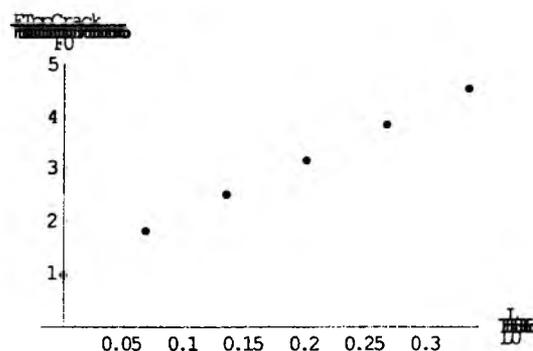


Рис. 6. Зависимость максимальной силы от размера дефекта

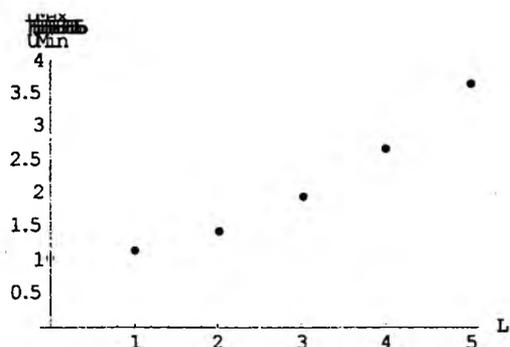


Рис. 7. Эпюра перемещения атомов на верхней границе

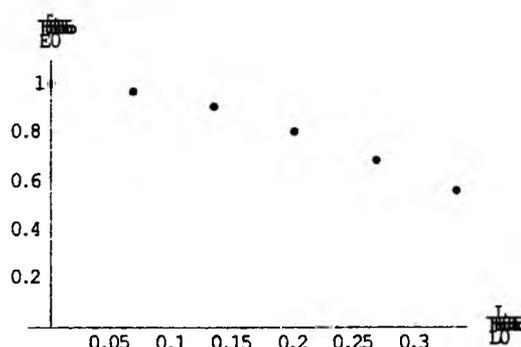


Рис. 8. Зависимость приведенного значения модуля Юнга от размера дефекта

Подобные зависимости наблюдаются и для сил в угловых элементах.

Приведенные выше результаты представляются важными в двух аспектах. Во-первых, необходимо отдавать себе отчет в том, что прочность наноразмерных структур существенно зависит от наличия в них дефектов. Даже при небольшом их количестве прочность может снижаться в разы. Во-вторых, значения упругих постоянных, получаемые в экспериментах скорее всего всегда будут меньше предсказанных теоретически, поскольку существование в природе регулярных наноструктур является скорее исключением, чем правилом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Волькенштейн, М., Ельяшевич, М., Степанов, Б. Колебания молекул. – М.-Л.: Гос. изд. технико-теоретической литературы, 1949. – 600 с.
2. Репченков, В.И., Нагорный, Ю.Е., Репченкова, Е.В. Векторная параметризация номеров степеней свободы и номеров элементов в МКЭ. – Минск: Белгосуниверситет, 2003. – 13 с. Деп. в БелИСА.
3. 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.