

07,18

Модуль Юнга и коэффициент Пуассона планарных и нанотубулярных супракристаллических структур

© Р.А. Браже, А.И. Кочаев, В.С. Нефёдов

Ульяновский государственный технический университет,
Ульяновск, Россия

E-mail: a.kochaev@gmail.com

(Поступила в Редакцию 27 декабря 2011 г.)

Предложен метод расчета двумерного модуля Юнга и коэффициента Пуассона для планарных и нанотубулярных структур через компоненты двумерного тензора упругих жесткостей, полученные численными методами. Метод апробирован для графена и двумерных супракристаллических листов.

Работа поддержана премией правительства Ульяновской области.

Планарные графеновые и графеноподобные наноструктуры (листы, наноленты, наносети, нанокружева) и нанотрубки начинают все более широко использоваться в нанoeлектронике, нанoфотонике, водородной энергетике, нанобиологии и наномашиностроении. Наряду с электрическими, оптическими и термическими свойствами этих материалов важную роль, особенно для гибкой углеродной электроники и создания новых композитных материалов, играют их упругие характеристики. Между тем сведения об упругих характеристиках даже графеновых планарных и нанотубулярных структур крайне противоречивы. Не исследовано, в частности, как изменяются (и изменяются ли?) модули упругости нанолент при их сворачивании в нанотрубки. Относительно самих нанотрубок также не все ясно: одни авторы считают, что с увеличением диаметра нанотрубки при фиксированной длине модуль Юнга возрастает [1], другие утверждают прямо противоположное [2]. Некоторые доказывают, что упругие свойства нанотрубки вообще не зависят от ее диаметра и хиральности [3]. Численные значения модуля Юнга как нанолент [4–6], так и нанотрубок [1–3,7,8], полученные экспериментально и с применением различных методов математического моделирования (*ab initio*, сильной связи, молекулярной динамики и др.), различаются в разы.

Причина указанных противоречий, на наш взгляд, состоит в том, что понятие площади поперечного сечения, на которую действует деформирующая сила растяжения/сжатия для однослойных нанолент и нанотрубок, в этом случае становится неопределенным. Понимание этого обстоятельства побуждает исследователей переходить от расчета модуля Юнга в классическом понимании к отысканию так называемого псевдомодуля Юнга, рассчитываемого как отношение деформирующей силы растяжения/сжатия, действующей на ширину недеформированной структуры, к относительному изменению ее длины [9,10]. В указанных работах псевдомодуль Юнга для нанолент и нанотрубок рассчитывались исходя из предварительных расчетов энергии упругой деформации.

В настоящей работе мы предлагаем сделать давно напрашивающийся шаг — полностью отказаться от некорректных объемных представлений о деформациях растяжения/сжатия в двумерных (2D) и однослойных нанотубулярных структурах, вводя в рассмотрение двумерный модуль Юнга и соответствующий коэффициент Пуассона, определяемые по известным правилам кристаллографии через двумерные упругие податливости или жесткости. Для графеноподобных 2D-супракристаллических листов различных классов симметрии (рис. 1) компоненты тензоров двумерных упругих жесткостей были вычислены в работах [11,12] через константы центрального и нецентрального межатомного взаимодействия. Эти константы вычислялись с помощью модифицированного метода Давыдова [13], а затем по схеме, предложенной Давыдовым [14] на основе модели Китинга [15], находились отличные от нуля компоненты тензора упругих жесткостей.

Форма матриц упругих податливостей (s_{ij}) и упругих жесткостей (c_{ij}) для двумерных кристаллов ($i, j = 1, 2$) может быть легко получена путем редукции соответствующих матриц для трехмерных кристаллов [16,17]. Для структур, изображенных на рис. 1, они имеют следующий вид:

для класса $4mm$

$$\begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & 0 \\ s_{12} & s_{11} & 0 \\ 0 & 0 & s_{33} \end{pmatrix}_{(3)}, \quad \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & 0 \\ c_{12} & c_{11} & 0 \\ 0 & 0 & c_{33} \end{pmatrix}_{(3)},$$

для класса $6mm$

$$\begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & 0 \\ s_{12} & s_{11} & 0 \\ 0 & 0 & 2(s_{11} - s_{12}) \end{pmatrix}_{(2)},$$

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & 0 \\ c_{12} & c_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12}) \end{pmatrix}_{(2)}.$$

Здесь использованы матричные представления тензоров четвертого ранга s_{ijkl} и c_{ijkl} путем свертки по парам

Значения упругих жесткостей, двумерного модуля Юнга и коэффициента Пуассона для углеродных 2D-структур

Параметр	(C) ₆	(C) ₄₄	(C) ₆₃₍₆₎	(C) ₆₃₍₁₂₎	(C) ₆₆₄	(C) ₆₃₄
c_{11} , N/m	533	328	9.84	75.7	361	10.5
c_{12} , N/m	331	215	6.15	47.1	226	6.52
c_{33} , N/m		68				
E_2 , N/m	327	187,63.0	6.00	46.4	220	6.45
$ \sigma $	0.62	0.66, 0.88	0.63	0.62	0.63	0.62

имеют размерность силы, деленной на длину в первой степени.

Для верификации полученных результатов имеет смысл сопоставить их с известными экспериментальными данными для графена. В работе [18] приведено значение трехмерного модуля Юнга для графеновой наноленты, равное 1 ТПа при коэффициенте жесткости 342 N/m. Если за характерную толщину графенового слоя принять расстояние между слоями в графите (0.34 nm), то, поделив найденное нами значение $E_2 = 327$ N/m на эту толщину, получаем 0.96 ТПа, что близко к экспериментально найденному результату.

Из таблицы также видно, что углеродные 2D-супракристаллы значительно уступают по своим упругим характеристикам графену, в особенности структуры (C)₆₃₍₆₎ и (C)₆₃₄ с sp^3 -гибридизацией атомов углерода. Причины этого обсуждались в [11].

Что касается нанотубулярных супракристаллических структур, то вычисленные для соответствующих планарных структур значения двумерного модуля Юнга и коэффициента Пуассона пригодны и для однослойных нанотрубок сравнительно большого диаметра ($D \gg 0.17$ nm) и длины ($L_0 \geq 10$ nm). В этом случае атомы на противоположных по диаметру сторонах нанотрубки не будут влиять друг на друга, а продольные деформации растяжения/сжатия будут происходить в пределах упругости.

Список литературы

- [1] E. Hernández, C. Goze, P. Bernier, A. Rubio. Phys. Rev. Lett. **80**, 20, 4502 (1998).
- [2] Z. Xin, Z. Jianjun, O.-Y. Zhong-can. Phys. Rev. B **62**, 20, 13 692 (2000).
- [3] J.P. Lu. Phys. Rev. Lett. **79**, 7, 1297 (1997).
- [4] K.N. Kudin, G.E. Scuseria, B. I. Yakobson. Phys. Rev. B **64**, 235 406 (2001).
- [5] G.V. Lier, C.V. Alsenoy, V. V. Doren, S. P. Greelings. Chem. Phys. Lett. **326**, 181 (2000).
- [6] R. Faccio, P.A. Denis, H. Pardo, C. Goyenola, Á.W. Mombrú. J. Phys.: Cond. Matter **21**, 285 304 (2009).
- [7] C.F. Cornwell, L.T. Wille. Solid State Commun. **101**, 555 (1997).
- [8] B.I. Yakobson, C.J. Brabec, J. Bernholc. Phys. Rev. Lett. **76**, 14, 2511 (1966).
- [9] О.Е. Глухова, О.А. Терентьев. ФТТ **48**, 7, 1329 (2006).
- [10] О.Е. Глухова, А.С. Колесникова. ФТТ **53**, 9, 1856 (2011).

- [11] Р.А. Браже, А. А. Каренин, А.И. Кочаев, Р.М. Мефтахутдинов. ФТТ **53**, 7, 1406 (2011).
- [12] Р.А. Браже, А.А. Каренин, Р.М. Мефтахутдинов. ФТТ **53**, 8, 1614 (2011).
- [13] С.Ю. Давыдов. ФТТ **52**, 4, 756 (2010).
- [14] С.Ю. Давыдов. ФТТ **52**, 1, 172 (2010).
- [15] P.N. Keating. Phys. Rev. **145**, 637 (1966).
- [16] Л.А. Шувалов, А.А. Урусовская, И.С. Желудев, А.В. Залеский, С.А. Семилетов, Б.Н. Гречушников, И.Г. Чистяков, С.А. Пикин. Современная кристаллография. Т. 4. Физические свойства кристаллов. М. (1981). 495 с.
- [17] Н.В. Переломова, М.М. Тагиева. Задачник по кристаллофизике. М. (1972). 288 с.
- [18] C. Lee, X. Wei, J.W. Kysar, J. None. Science **321**, 385 (2008).