



МЕХАНИКА

УДК 539.32

НОВЫЙ ПОДХОД К ИССЛЕДОВАНИЮ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МНОГОСЛОЙНОГО ГРАФЕНА С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

О. Е. Глухова¹, А. В. Доль², А. С. Колесникова³, В. В. Шунаев⁴

¹Доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой радиотехники и электродинамики, Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, oeglukhova@yandex.ru

²Программист отдела математического моделирования, Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, dzero@pisem.net

³Программист отдела математического моделирования, Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, kolesnikova.88@mail.ru

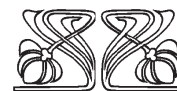
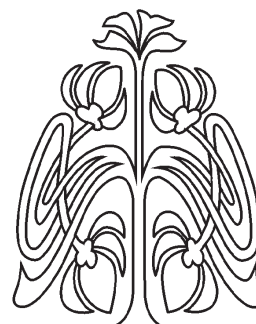
⁴Аспирант кафедры радиотехники и электродинамики, Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, vshunaev@list.ru

Предложен новый подход к исследованию механических свойств многослойного графена. В основе метода лежит идея о том, что ван-дер-ваальсовое взаимодействие между графеновыми листами можно моделировать фиктивным слоем сплошной среды. Напряженно-деформированное состояние многослойного графена описывалось стационарными уравнениями Навье–Ламе. Данный подход был успешно апробирован при моделировании прогиба многослойного графенового листа. В рамках выбранного приближения, согласно которому графеновые слои рассматривались как линейно-упругий материал, для каждого участка кривой, аппроксимирующей зависимость стрелы прогиба графена от приложенной силы, подбирался свой набор упругих констант.

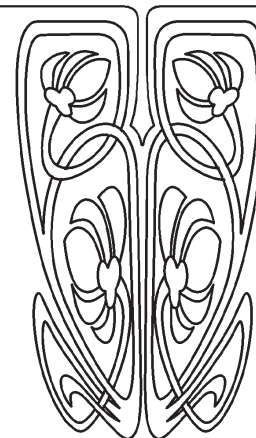
Ключевые слова: многослойный графен, метод конечных элементов, прогиб, модуль упругости, ван-дер-ваальсовое взаимодействие.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время широкий спектр применения многослойного графена и монослоя графена обусловлен их высокой теплопроводностью и подвижностью зарядов, а также уникальными механическими свойствами. В связи с этим актуальной задачей является исследование прочностных свойств этих структур, а также анализ их поведения во время деформации. Для изучения механических свойств графеновых листов ведутся теоретические [1–3] и экспериментальные [4] исследования по наноиндентированию материала. С. Lee с соавторами [4] экспериментально определили модули Юнга монослоя и бислойного графена (1.04 и 0.98 ТПа) с помощью иглы атомно-силового микроскопа, а также установили, что зависимость величины приложенной силы от стрелы прогиба описывается кубической параболой. В связи с тем, что эксперименты по наноинденти-



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ





рованию графеновых листов являются чрезвычайно дорогостоящими и уникальными, их пытаются заменить теоретическими исследованиями. Например, в работе [1] результаты эксперимента, представленные в работе [4], воспроизведены с помощью теории нелинейной гиперупругости для случая наноиндентирования. Zhao Wang с соавторами [2] с помощью метода молекулярной динамики, основанного на потенциале AIREBO, показали, что свободный графен, не лежащий на подложке, способен прогибаться под действием внешнего электрического поля. В этой работе было установлено, что прогиб графенового листа определяется напряженностью поля и резко возрастает с увеличением длины пластины. В работе [3] представлена зависимость стрелы прогиба от приложенной силы.

Основной проблемой при моделировании наноиндентирования графеновых листов молекулярно-механическими методами является необходимость длительных расчетов траектории атомов. До настоящего времени в рамках теории сплошной среды исследований графеновых слоев не проводилось, хотя ее применение значительно бы ускорило исследование процесса индентирования. В связи с этим целью данной работы является создание модели прогиба моно- и бислойного графена в рамках теории сплошной среды методом конечных элементов. В рамках теории сплошной среды в качестве модели графеновых слоев используется модель линейно-упругого материала со своим набором упругих констант, что позволит упростить расчет по сравнению с моделью в работе [5].

1. ПРОГИБ ГРАФЕНОВОГО ЛИСТА МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Многие исследователи используют метод конечных элементов для расчетов графеновых пластин и трубок [5–7] в связи с тем, что графеновый лист, состоящий из конечного числа атомов углерода, может рассматриваться как тонкая упругая пластина в рамках теории больших деформаций. Результаты расчетов методом молекулярной динамики показали, что кривая зависимости приложенной силы от стрелы прогиба изменяется по нелинейному закону [3]. Эту кривую, состоящую из пяти участков, можно аппроксимировать ломаной (рис. 1), и тогда на каждом таком участке можно считать поведение материала близким к идеально упругому. Это позволяет использовать модель линейно-упругого материала с набором упругих констант для каждого отрезка. Погрешность аппроксимации на первом отрезке составила порядка 5%.

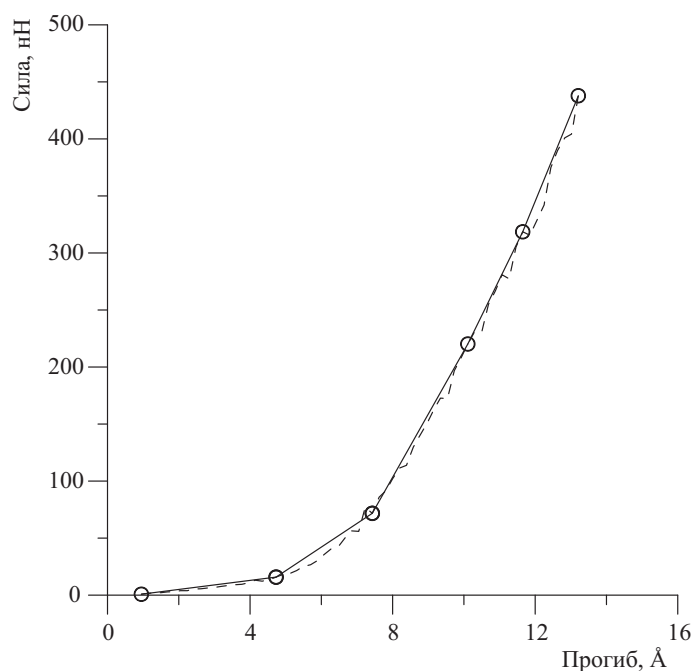


Рис. 1. Аппроксимация кривой зависимости стрелы прогиба от приложенной силы ломаной линией



Для определения упругих констант на первом участке кривой был проведен ряд численных расчетов в программном пакете конечно-элементного моделирования ANSYS. Решалась задача о прогибе пластины с шарнирно закрепленными краями сосредоточенной силой, приложенной в центре. Длина пластины бралась равной 4.118 нм, ширина 3.69 нм, а толщина 0.34 нм. Такие параметры были взяты потому, что на момент исследований уже имелись данные по моделированию прогиба аналогичной пластины методами молекулярной динамики.

Решалась задача о статическом нагружении пластины в предположении о линейной зависимости между напряжениями и деформациями с учетом конечных деформаций.

Конечно-элементная сетка подбиралась таким образом, чтобы погрешность в расчете максимального прогиба не превышала 0.1 нм. Для разбиения модели использовались гексаэдрические элементы SOLID 185. Размер ребра элемента у края пластины составил 0.1 нм. При этом толщина элемента составляла 0.01 нм. В центре пластины сетка сгущалась для увеличения точности расчетов. Минимальный размер ребра элемента в области сгущения составил 0.01 нм.

Методом бинарного поиска подбирался такой модуль Юнга, чтобы величина прогиба совпала со значениями, полученными методом молекулярной динамики (рис. 2).

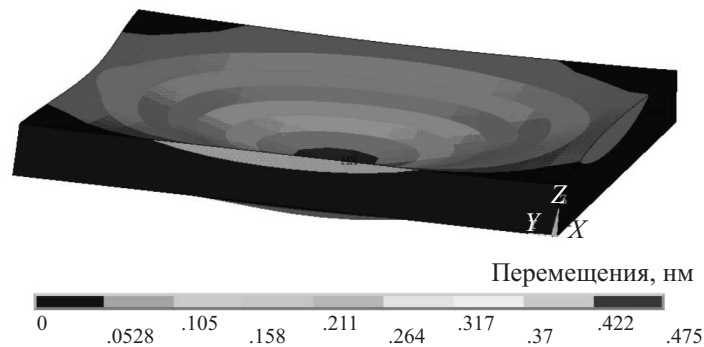


Рис. 2. Расчет прогиба графенового листа в ANSYS

В результате расчетов для первого отрезка кривой было получено значение модуля упругости графенового листа 5.6 ТПа. Аналогично были подобраны упругие константы для остальных отрезков аппроксимирующей ломаной. Подобранные механические константы, можно проводить дальнейшие расчеты для прогиба многослойного графена методом конечных элементов. Коэффициент Пуассона принимался для каждого участка равным 0.3. Расчеты на каждом последующем участке ломаной необходимо проводить на геометрических моделях, полученных на предыдущем этапе, то есть деформированных предыдущей нагрузкой. Такие расчеты следует проводить с использованием нескольких шагов нагружения. Для второго отрезка значение модуля упругости графенового листа составляет 11.5 ТПа, для третьего — 16.9 ТПа, а для последующих — приблизительно 17 ТПа.

2. ПРОГИБ ДВУСЛОЙНОГО ГРАФЕНА МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Основной сложностью при конечно-элементном моделировании прогиба многослойного графена является учет ван-дер-ваальсового взаимодействия между атомами углерода различных слоев. Это связано с тем, что моделирование проводится в рамках теории сплошной среды, которая не позволяет рассматривать в отдельности каждый атом. Однако без учета взаимодействия Ван-дер-Ваальса невозможно правильно осуществить прогиб нескольких (в частности, двух) графеновых листов. Описанная проблема была решена путем введения между двумя листами графена фиктивного слоя, который описывает взаимодействие Ван-дер-Ваальса. Для данного слоя, материал которого считался линейно-упругим, изотропным, упругие константы подбирались так, чтобы значения прогибов верхней и нижней пластин для каждой нагрузки совпадали с величинами, полученными в результате численного эксперимента методом молекулярной динамики [3]. Упругие константы слоев графена принимались равными значениям, полученным в п. 1. Методом бинарного поиска было установле-



но, что модуль Юнга фиктивного слоя равен 25 ГПа. В этом случае величины прогиба верхней и нижней пластин графена при действии на них силы в 12 нН оказалась равными 0.13 нм и 0.104 нм соответственно (рис. 3). Эти значения совпадают с результатами, полученными с помощью метода молекулярной динамики [3].

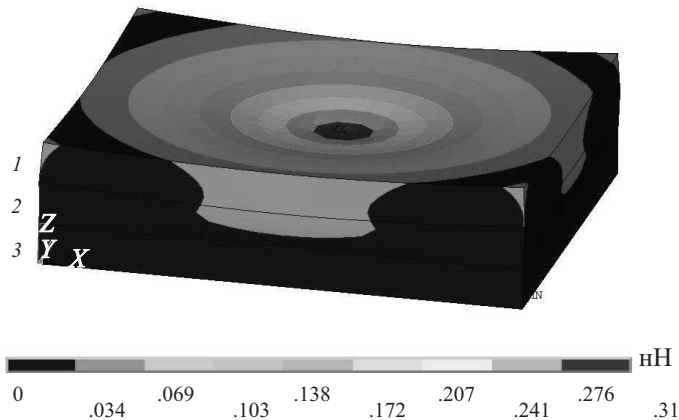


Рис. 3. Прогиб двуслойного графена приложенной силой 12 нН: 1 — верхний слой графена, 2 — «прослойка», 3 — нижний слой графена

3. ВЫВОДЫ

В данной работе на основании проведенных нами численных экспериментов по прогибу моно- и многослойного графена предложена модель, имитирующая диполь-дипольное взаимодействие листов графена виртуальным слоем сплошной среды. К достоинствам метода можно отнести значительное сокращение времени расчетов и снижение требований к вычислительному оборудованию. Установлено, что значение модуля упругости фиктивного слоя, моделирующего ван-дер-ваальсово взаимодействие, составляет 25 ГПа. Воспроизведение прогиба моно- и бислойного графена в рамках теории сплошной среды отвечает численному эксперименту, проведенному в работе [3] методом молекулярной динамики. Полученные значения могут быть в дальнейшем использованы для расчета более сложных систем, в частности, для прогиба трех и более графеновых пластин.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 12-02-00807, 13-08-00986, 14-01-31429, 14-01-31508) и Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009—2013 годы», XLI очередь мероприятия 1.2.1, технические науки, номер соглашения 14.В37.21.1094, Президентской стипендии 2013—2016 гг. (проект СП-2302.2013.1).

Библиографический список

1. Gil A. J., Adhikari S., Scarpa F., Bonet J. The formation of wrinkles in single-layer graphene sheets under nanoindentation // J. Phys. Condens. Matter. 2010. Vol. 22, № 14. P. 145302-1–145302-6. DOI: 10.1088/0953-8984/22/14/145302.
2. Wang Z., Laetitia P., Jamil E. Deflection of suspended graphene by a transverse electric field // Phys. Rev. B. 2009. Vol. 81, iss. 15. P. 155405-1–155405-5.
3. Глухова О. Е., Шунаев В. В. Исследование прочности на разрыв моно- и бислойного графена // Нано- и микросистемная техника. 2012. № 7. С. 25–29.
4. Lee C., Wei X., Li Q., Carpick R., Kysar J. W., Hone J. Elastic and frictional properties of graphene // Physica Status Solidi. 2009. Vol. 246, № 11–12. P. 2562–2567.
5. Rouhi S., Ansari R. Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets // Physica E : Low-dimensional Systems and Nanostructures. 2012. Vol. 44, iss. 4. P. 764–772.
6. Mikhailov S. Physics and Applications of Graphene – Theory. Rijeka, Croatia : InTech, 2011. 534 p.
7. Nahas M. N., Abd-Rabou M. Finite element modeling of carbon nanotubes // Intern. J. of Mech. and Mechatronics IJMME-IJENS. 2010. Vol. 10, № 3. P. 19–24.



The New Approach to Investigation of Multilayer Graphene Mechanical Properties by the Finite-element Method

O. E. Glukhova, A. V. Dol', A. S. Kolesnikova, V. V. Shunaev

Saratov State University, 83, Astrahanskaya str., 410012, Saratov, Russia, oeglukhova@yandex.ru, dzero@pisem.net, kolesnikova.88@mail.ru, vshunaev@list.ru

A new approach to investigate the mechanical properties of multilayer graphene was suggested. The method is based on the idea that the van der Waals interaction between the graphene sheets can be simulated by a fictitious layer of continuum. The stress-strain state of multilayer graphene is described by stationary equations of Navier–Lame. This approach has been successfully tested on graphene deflection. The graphene layers were considered as linear-elastic material. For each part of the curve that approximates the dependence of the graphene deflection on the applied force, corresponding elastic constants of graphene layers were found.

Key words: multilayer graphene, finite element method, deflection, modulus of elasticity, van der Waals interactions.

References

1. Gil A. J., Adhikari S., Scarpa F., Bonet J. The formation of wrinkles in single-layer graphene sheets under nanoindentation. *J. Phys. Condens. Matter.*, 2010, vol. 22, no. 14, pp. 145302-1–145302-6. DOI: 10.1088/0953-8984/22/14/145302.
2. Wang Z., Laetitia P., Jamil E. Deflection of suspended graphene by a transverse electric field. *Physical Review B.*, 2009, vol. 81, iss. 15, pp. 155405-1–155405-5.
3. Glukhova O. E., Shunaev V. V. Investigation of the tensile strength of mono-and bilayer graphene. *J. Nano and microsystem technique*, 2012, no. 7, pp. 25–29 (in Russian).
4. Lee C., Wei X., Li Q., Carpick R., Kysar J. W., Hone J. Elastic and frictional properties of graphene. *Physica Status Solidi*, 2009, vol. 246, no. 11–12, pp. 2562–2567.
5. Rouhi S., Ansari R. Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets. *Physica E : Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 2012, vol. 44, iss. 4, pp. 764–772.
6. Mikhailov S. *Physics and Applications of Graphene – Theory*. Rijeka, Croatia, InTech, 2011, 534 p.
7. Nahas M. N., Abd-Rabou M. Finite element modeling of carbon nanotubes. *Intern. J. of Mechanical and Mechatronics IIMME-IJENS*, 2010, vol. 10, no. 3, pp. 19–24.

УДК 539.374

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ СВЯЗАННЫХ ПЛОСКИХ ГАРМОНИЧЕСКИХ ТЕРМОУПРУГИХ ВОЛН В МИКРОПОЛЯРНЫХ КОНТИНУУМАХ ПЕРВОГО ТИПА

В. А. Ковалев¹, Е. В. Мурашкин², Ю. Н. Радаев³

¹Доктор физико-математических наук, профессор кафедры управления проектами и инвестициями, Московский городской университет управления Правительства Москвы, vlad_koval@mail.ru

²Кандидат физико-математических наук, научный сотрудник, Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского РАН, Москва, murashkin@ipmnet.ru, evmurashkin@gmail.com

³Доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник, Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского РАН, Москва, radayev@ipmnet.ru, y.radayev@gmail.com

В представляемой работе в рамках линейной теории обобщенной микрополярной термоупругости первого типа (GNI/CTE) с помощью связанной системы уравнений движения и теплопроводности выполнен анализ плоских гармонических связанных термоупругих волн перемещений, микровращений и температуры. Исследованы также закономерности распространения волновых поверхностей слабых разрывов перемещений, микровращений и температуры в термоупругом микрополярном континууме первого типа. Вычислены нормальные скорости распространения указанных волновых поверхностей. Получено и проанализировано с помощью пакета символьных вычислений *Mathematica* детерминантное уравнение для определения волновых чисел (постоянных распространения (PC)) плоских гармонических связанных термоупругих волн перемещений, микровращений и температуры. Факторизация полученного частотного полиномиального уравнения 14-й степени позволила свести его к биквадратному и бикубическому уравнениям относительно волновых чисел. Для волновых чисел поперечных и продольных волн получены алгебраические формы, содержащие многозначные комплексные квадратные и кубические радикалы.

Ключевые слова: микрополярная термоупругость, континуум первого типа, слабый разрыв, продольная волна, поперечная волна, волновое число, частотное уравнение.