

Исследование методом молекулярной динамики влияния атомной укладки графина на его упругие свойства

Полякова П.В.¹, Лисовенко Д.С.², Баимова Ю.А.¹

polina.polyakowa@yandex.ru

¹ Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия

² Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, Россия

В настоящее время во всем мире активно исследуются новые двумерные материалы, подобные хорошо известному графену. В то время как свойства графена достаточно подробно изучены и активно разрабатываются методы его промышленного производства, свойства схожих материалов либо мало изучены, либо не исследованы вовсе. Одной из таких структур является графин – двумерная аллотропная модификация углерода со смешанной гибридизацией (sp и sp^2) [1]. В настоящей работе методом молекулярной динамики исследованы константы упругости графина пяти конфигураций (α , β_1 , γ_1 – гексагональная анизотропия и β_3 , γ_2 – ромбическая).

Размер ячейки моделирования: $L_x=250 \text{ \AA}$, $L_y=250 \text{ \AA}$, $L_z=20 \text{ \AA}$. Все расчеты проводятся с использованием свободно распространяемого программного пакета LAMMPS и межатомного потенциала AIREBO. В системе постоянно температура 0.001 К обеспечивает термостат Носе-Хувера. Периодические граничные условия применяются во всех направлениях. Константы жесткости, полученные методом молекулярной динамики, используются в аналитических расчетах модуля Юнга, модуля сдвига и коэффициента Пуассона [2]. Полученные константы жесткости графина разных конфигураций представлены в таблице.

Таблица. Константы упругости графина разных конфигураций

	α	β_1	β_3	γ_1	γ_2
C_{11} , Н/м	87.44	126.9	151.6	177.62	369.98
C_{22} , Н/м	-	-	100.13	-	118.48
C_{12} , Н/м	68.53	71.63	10.53	65.28	76.43
C_{66} , Н/м	8.7	27.43	18.17	61.23	84.98

Атомная укладка графина оказывает существенное влияние на упругие свойства [3]. Среди гексагональных графинов α -графин демонстрирует самый низкий модуль Юнга, но самый высокий коэффициент Пуассона, а графины β_1 и γ_1 обладают коэффициентом Пуассона, близким к 0.5, что характерно для несжимаемого трехмерного материала. Обнаружено, что графины с ромбической анизотропией (β_3 и γ_2) имеют коэффициент Пуассона близкий к 0.7. Показано, что для β_3 -графина наблюдается более высокая анизотропия, чем для γ_2 -графина.

Работа Поляковой П.В. и Баимовой Ю.А. проводилась в рамках госзадания молодежной лаборатории ИПСМ РАН. Работа Лисовенко Д.С. проводилась в рамках государственной программы ИПМех РАН (проект № 124013000674-0).

Ссылки

1. R. N. Baughman, H. Eckhardt, M. Kertesz, J. Chem. Phys. (1987), 87, 6687.
2. P.V. Polyakova, L.K. Galiakhmetova, R.T. Murzaev, D.S. Lisovenko, J.A. Baimova, Lett. Mater. (2023), 13, 171.
3. П.В. Полякова, Р.Т. Мурзаев, Ю.А. Баимова, ПМТФ (2023), 6, 176.