

Мультимасштабное моделирование динамики и свойств наноструктур

Метод конечных элементов →
молекулярная динамика →
квантовая модель

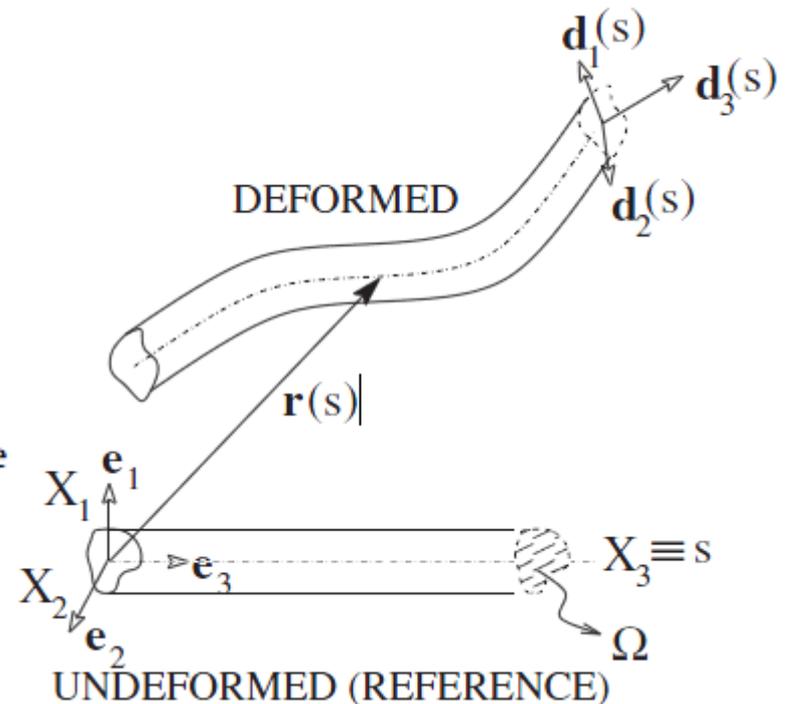
О.Е. Глухова,
Физический факультет,
НИУ Саратовский государственный университет
имени Н.Г. Чернышевского,
e-mail: glukhova@info.sgu.ru

1. Моделирование деформации нанотрубки-стержня

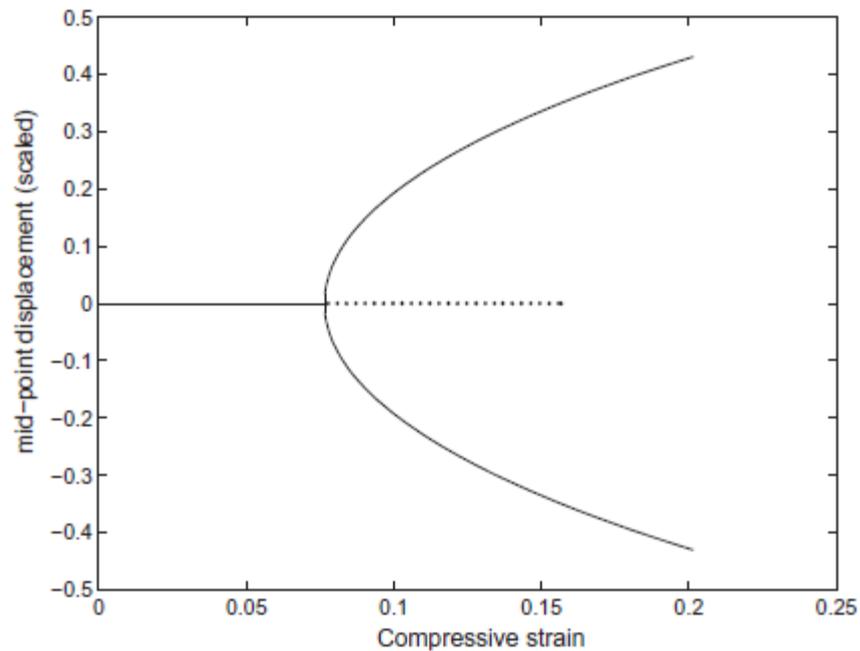
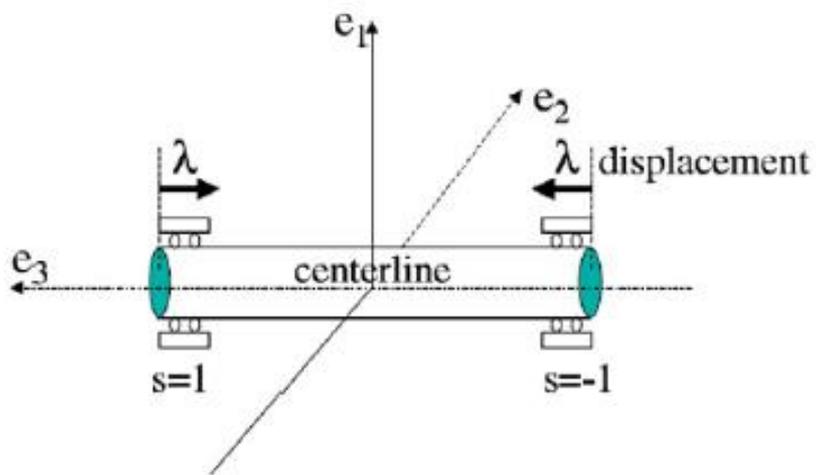
(*International Journal of Solids and Structures* 50 (2013) 49–56)

$$\begin{aligned} \Phi_{chiral}(\cdot) = & \frac{1}{2} \left[A\kappa_\alpha \kappa_\alpha + B\kappa_3^2 + Cv_\alpha v_\alpha + D(v_3 - 1)^2 \right. \\ & + 2E(v_3 - 1)\kappa_3 + 2Fv_\alpha \kappa_\alpha + 2G(v_3 - 1) \left(\frac{a+b}{2} - 1 \right) \\ & + 2H\kappa_3 \left(\frac{a+b}{2} - 1 \right) + I \left(\frac{a+b}{2} - 1 \right)^2 + J \{ (a-1)(b-1) - c^2 \} \\ & \left. + K \left(\frac{a'+b'}{2} \right)^2 + L(a'b' - c'^2) \right] \end{aligned}$$

- A: bending modulus
- B: twist modulus
- C: shear modulus
- D: axial stretch modulus
- E: coupling coefficient between extension and twist
- F: coupling coefficient between shear and bending
- G: Poisson coupling between axial stretch and average cross-sectional stretch

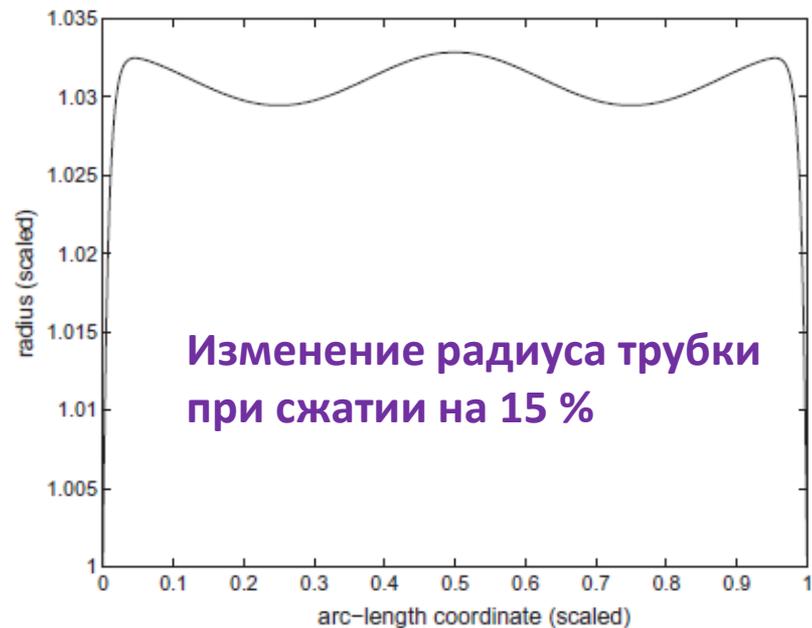
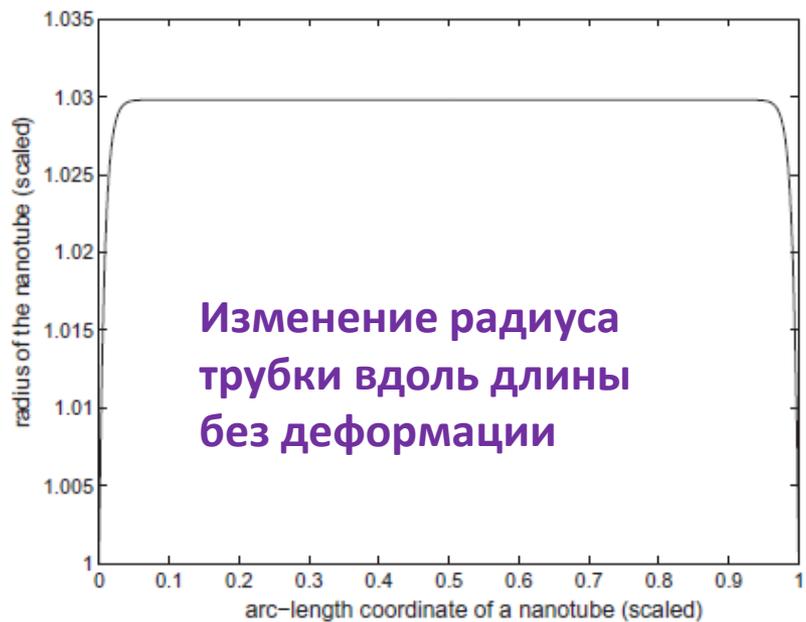
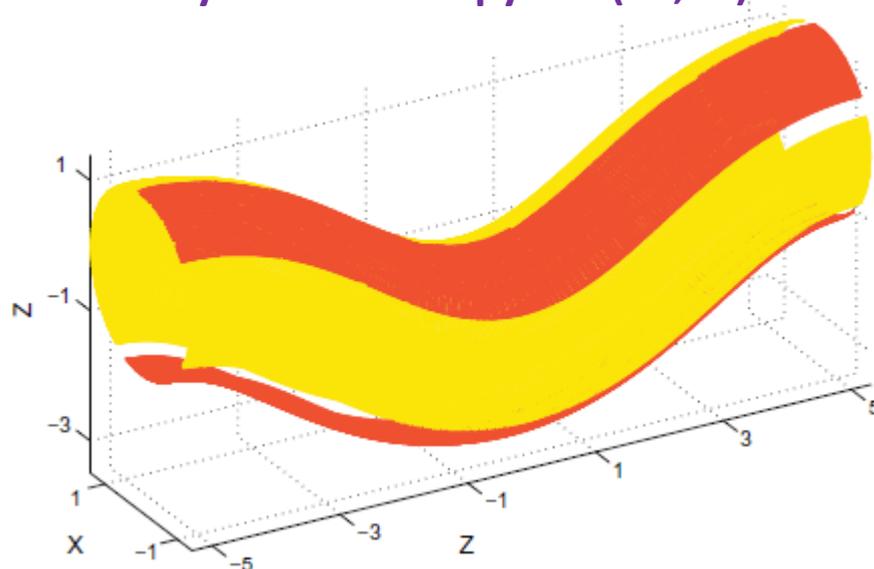
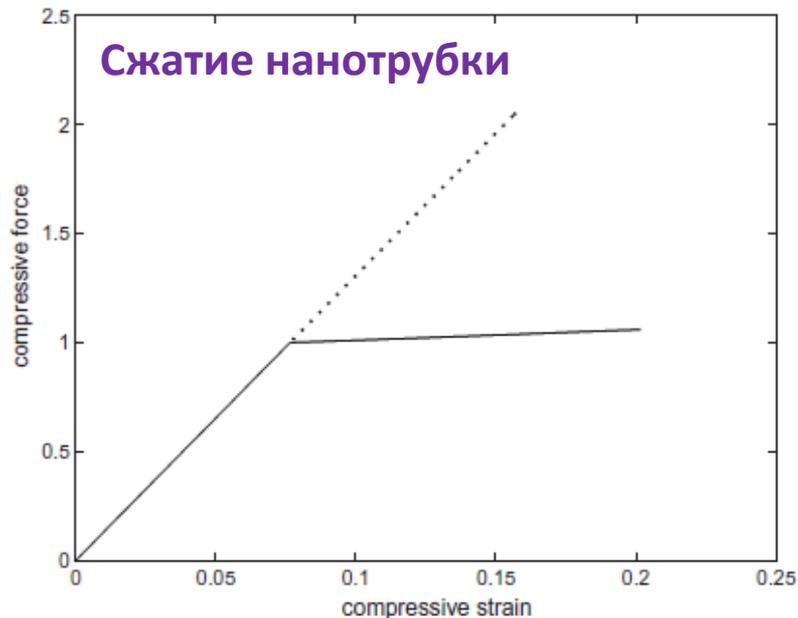


Симулирование сжатие нанотрубки (10,10)



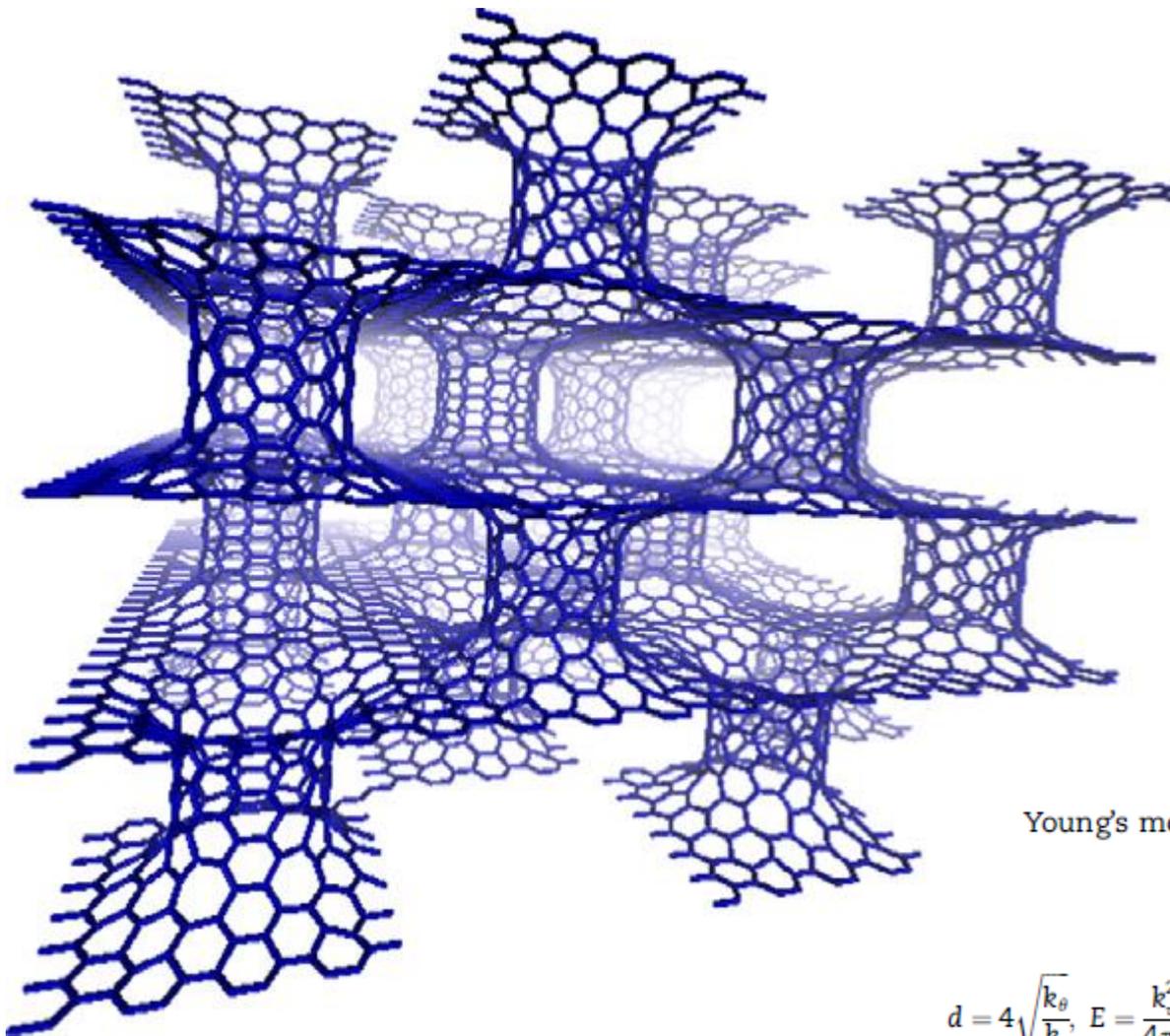
Растяжение/сжатие трубки относительно средней линии

Конечно-элементное изучение нанотрубки (10,10)



2. Исследование композитных углеродных наноструктур

CARBON50(2012)603-611



$$\frac{EA}{L} = k_r, \quad \frac{EI}{L} = k_\theta, \quad \frac{GJ}{L} = k_\tau$$

cross- sectional area (A),

Young's modulus (E), shear modulus (G), length (L)

I, J – моменты инерции

$$d = 4\sqrt{\frac{k_\theta}{k_r}}, \quad E = \frac{k_r^2 L}{4\pi k_\theta}, \quad G = \frac{k_r^2 k_\tau L}{8\pi k_\theta^2}, \quad A = \frac{\pi d^2}{4}, \quad I_y = I_z = \frac{\pi d^4}{64}, \quad J = \frac{\pi d^4}{32}.$$

Table 1 – Schematic view of four types of pillared graphene structures.

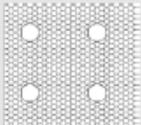
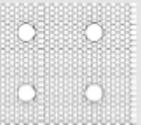
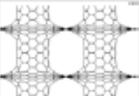
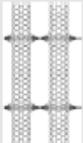
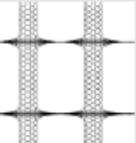
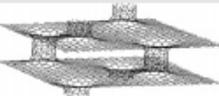
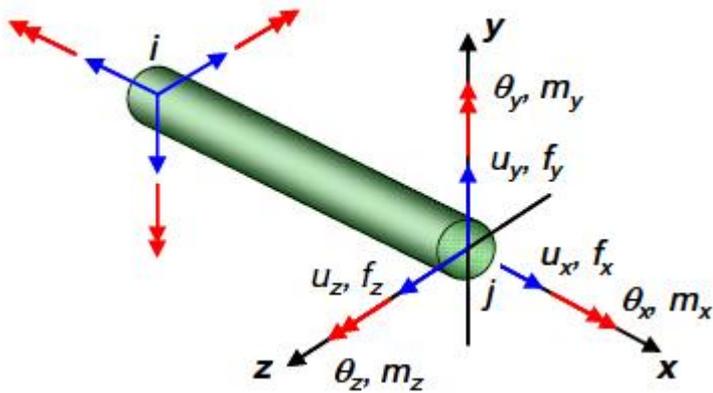
	PGS_I	PGS_II	PGS_III	PGS_IV
Top view				
Side view				
Iso view				
# of atoms	1124	2732	1892	3500
# of C—C bonds	1560	3912	2712	5064

Table 2 – Dimensions of four types of pillared graphene structures.

	Pillar length [nm]	Inter-pillar distance [nm]	Unitcell size [nm]		
			L_x	L_y	L_z
PGS_I	1.21	2.36	3.32	3.35	2.37
PGS_II	1.21	3.94	5.84	5.30	2.53
PGS_III	3.25	2.36	3.32	3.35	6.26
PGS_IV	3.25	3.94	5.84	5.30	6.42



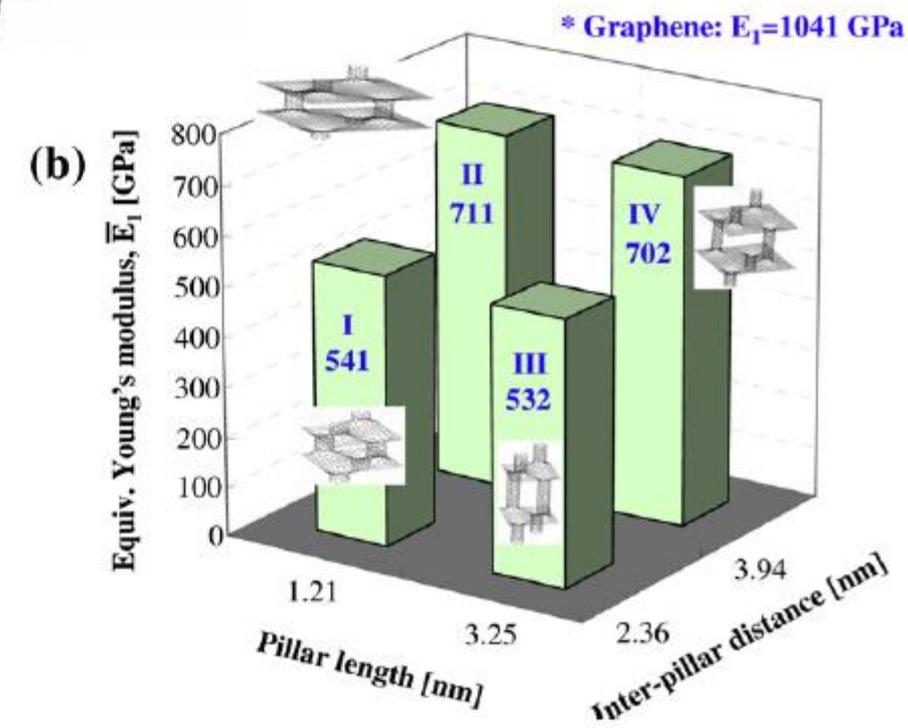
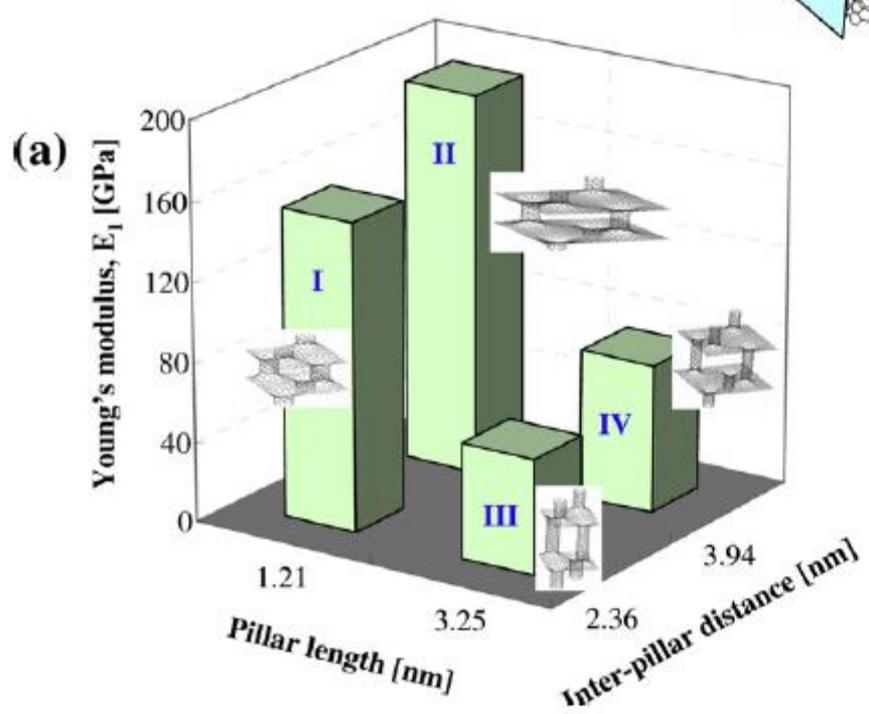
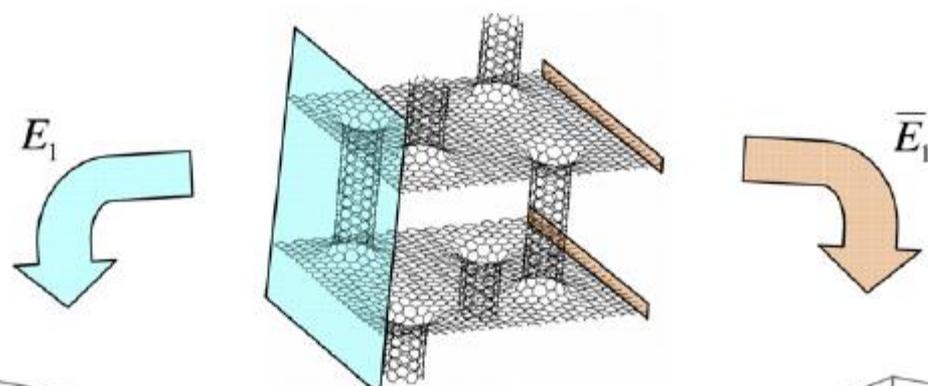
Периодические граничные условия для нормальных напряжений $\bar{\varepsilon}_1 = \bar{u}_{x,x}$

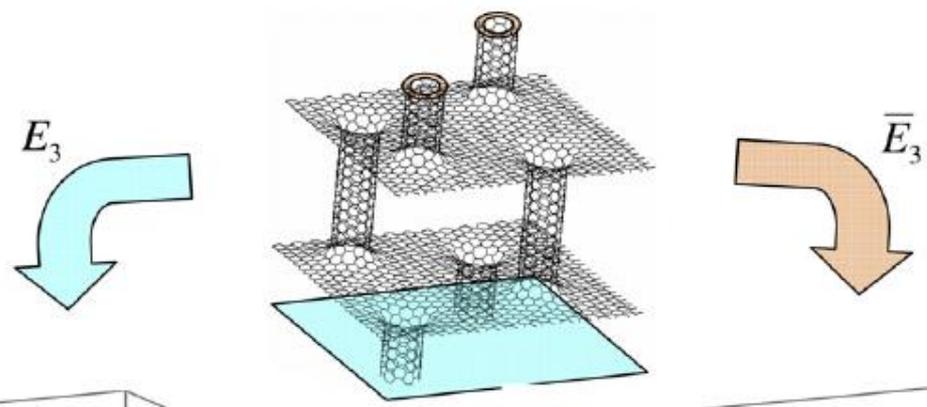
$$\left\{ \begin{array}{l} u_x|_{x=x_{\min}} + \bar{\varepsilon}_1 L_x = u_x|_{x=x_{\max}}, \\ u_y|_{x=x_{\min}} = u_y|_{x=x_{\max}}, \quad u_z|_{x=x_{\min}} = u_z|_{x=x_{\max}}, \quad \theta_i|_{x=x_{\min}} = \theta_i|_{x=x_{\max}}, \\ u_i|_{y=y_{\min}} = u_i|_{y=y_{\max}}, \quad \theta_i|_{y=y_{\min}} = \theta_i|_{y=y_{\max}}, \\ u_i|_{z=z_{\min}} = u_i|_{z=z_{\max}}, \quad \theta_i|_{z=z_{\min}} = \theta_i|_{z=z_{\max}}, \quad (i = x, y, z). \end{array} \right.$$

Периодические граничные условия для нормальных напряжений

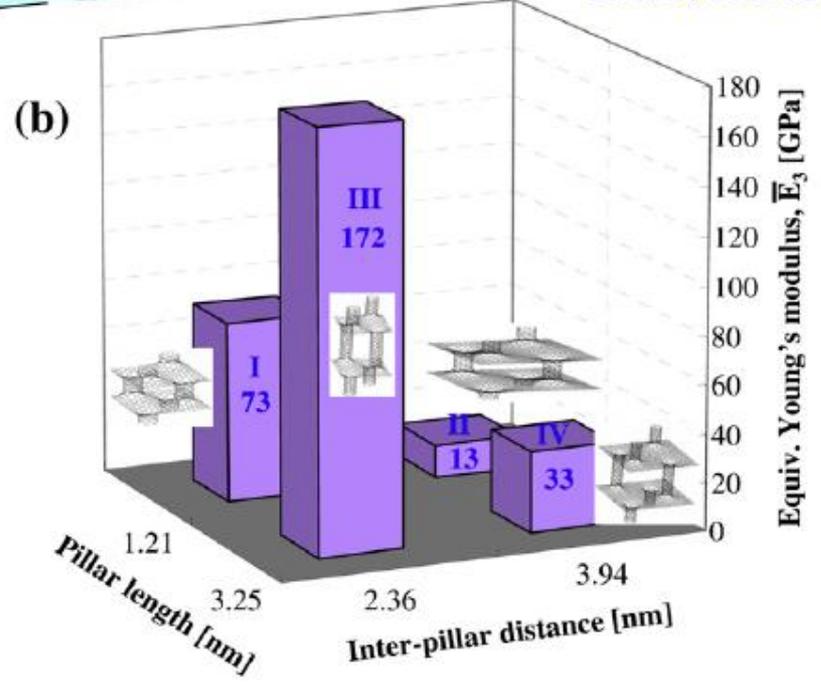
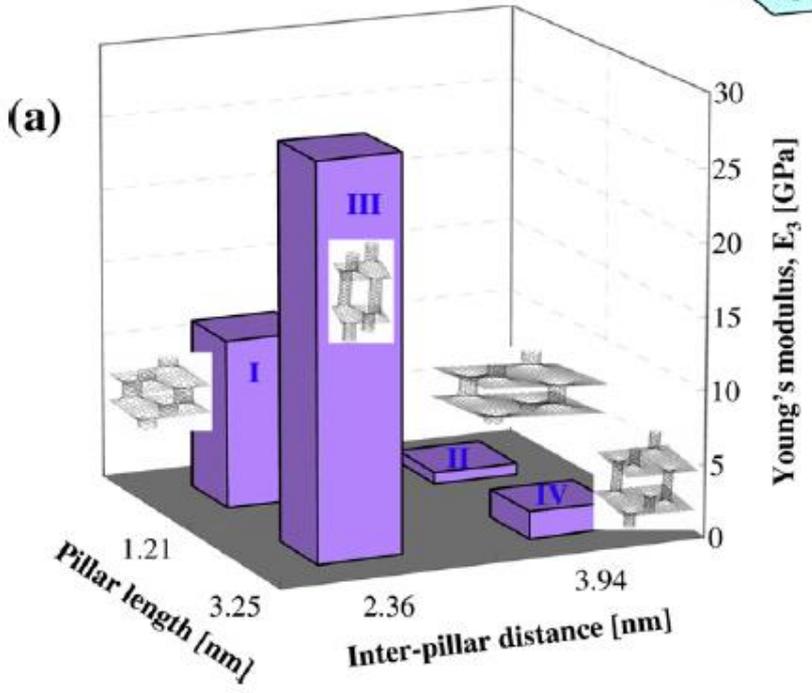
$$\left\{ \begin{array}{l} u_y|_{x=x_{\min}} + \bar{\gamma}_{12} L_x = u_y|_{x=x_{\max}}, \quad \bar{\varepsilon}_2 = \bar{u}_{y,y} \text{ and } \bar{\varepsilon}_3 = \bar{u}_{z,z} \\ u_x|_{x=x_{\min}} = u_x|_{x=x_{\max}}, \quad u_z|_{x=x_{\min}} = u_z|_{x=x_{\max}}, \quad \theta_i|_{x=x_{\min}} = \theta_i|_{x=x_{\max}}, \\ u_i|_{y=y_{\min}} = u_i|_{y=y_{\max}}, \quad \theta_i|_{y=y_{\min}} = \theta_i|_{y=y_{\max}}, \\ u_i|_{z=z_{\min}} = u_i|_{z=z_{\max}}, \quad \theta_i|_{z=z_{\min}} = \theta_i|_{z=z_{\max}}, \quad (i = x, y, z). \end{array} \right.$$

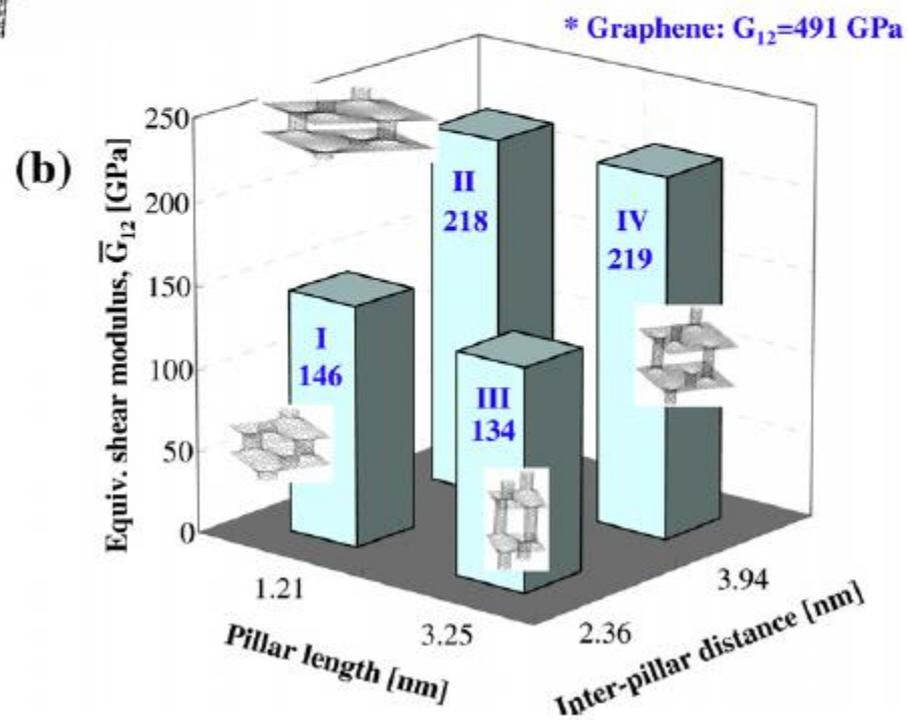
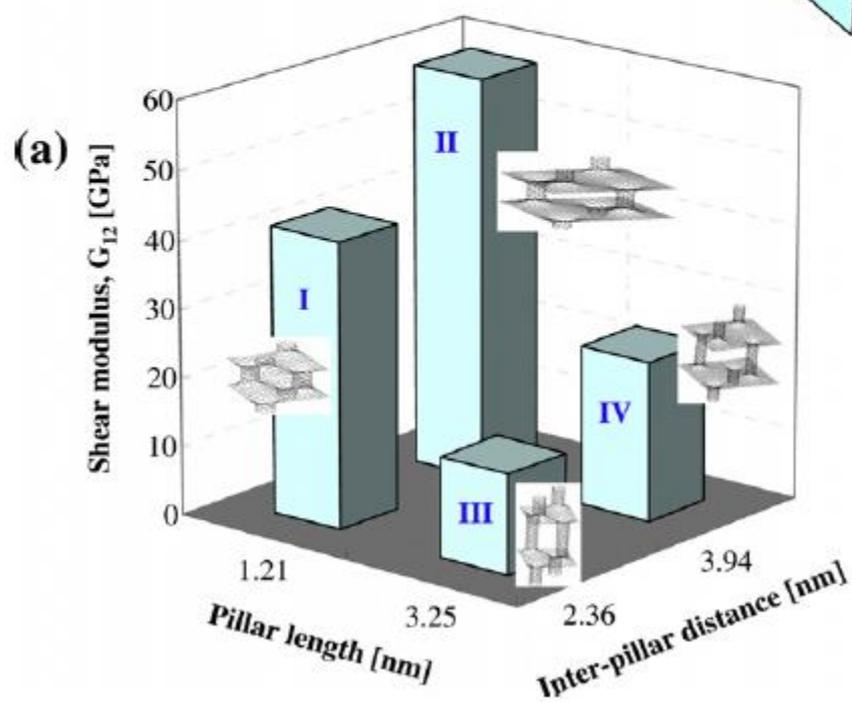
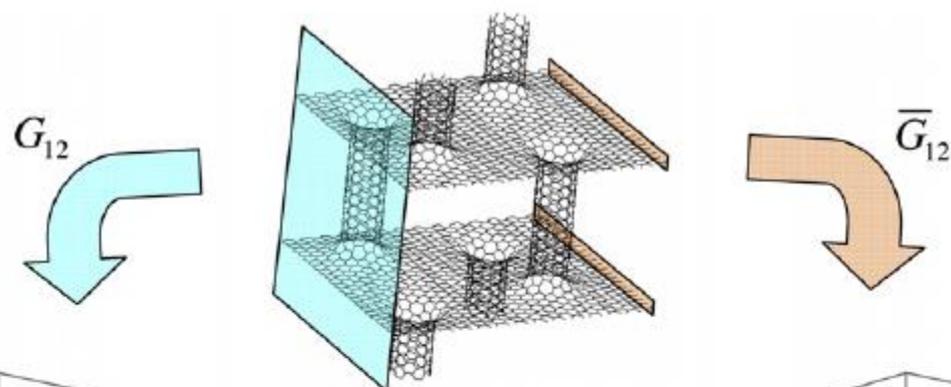
Вычисленные модули Юнга для четырех типов композита

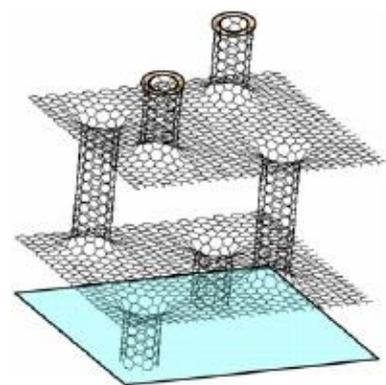




* CNT: $E_3=1041$ GPa

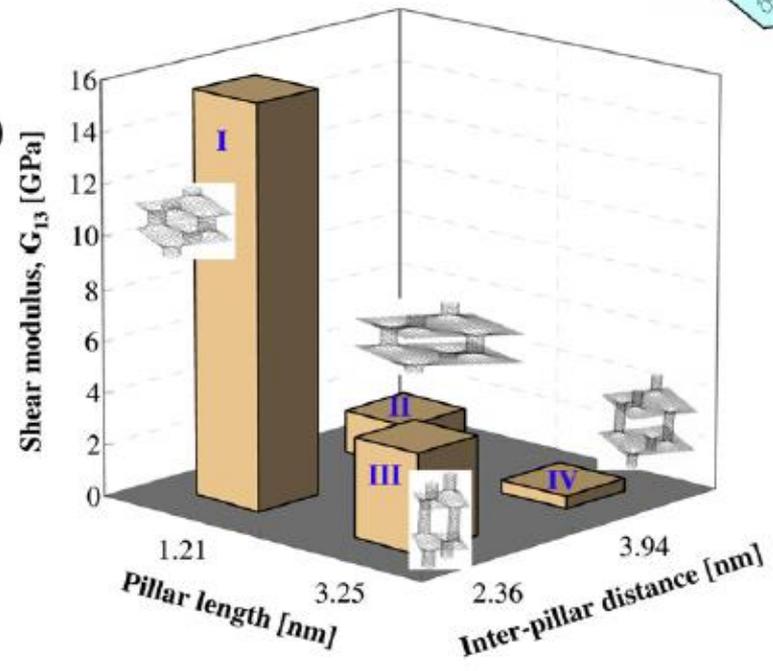




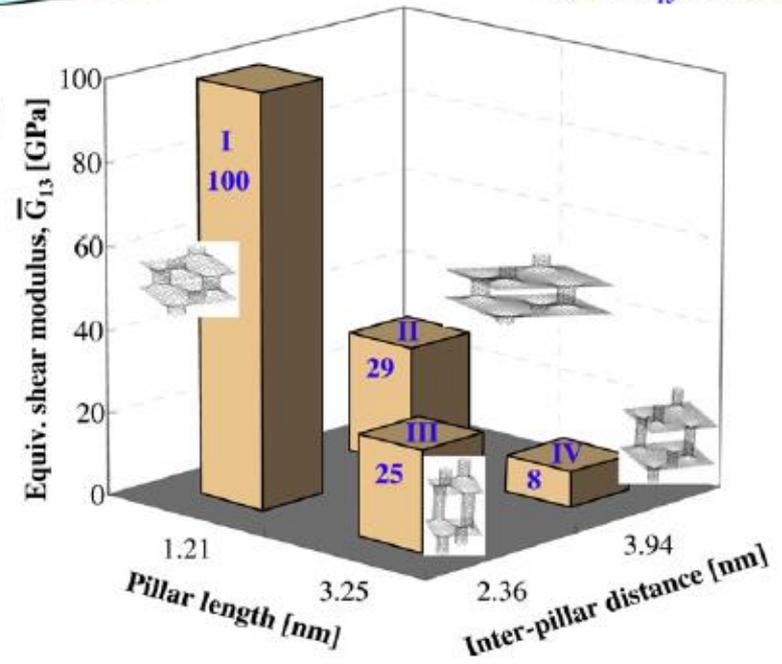


* CNT: $G_{13}=491$ GPa

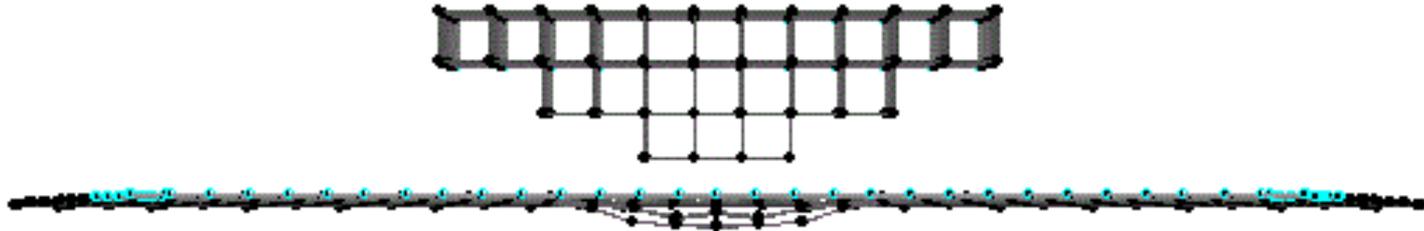
(a)



(b)



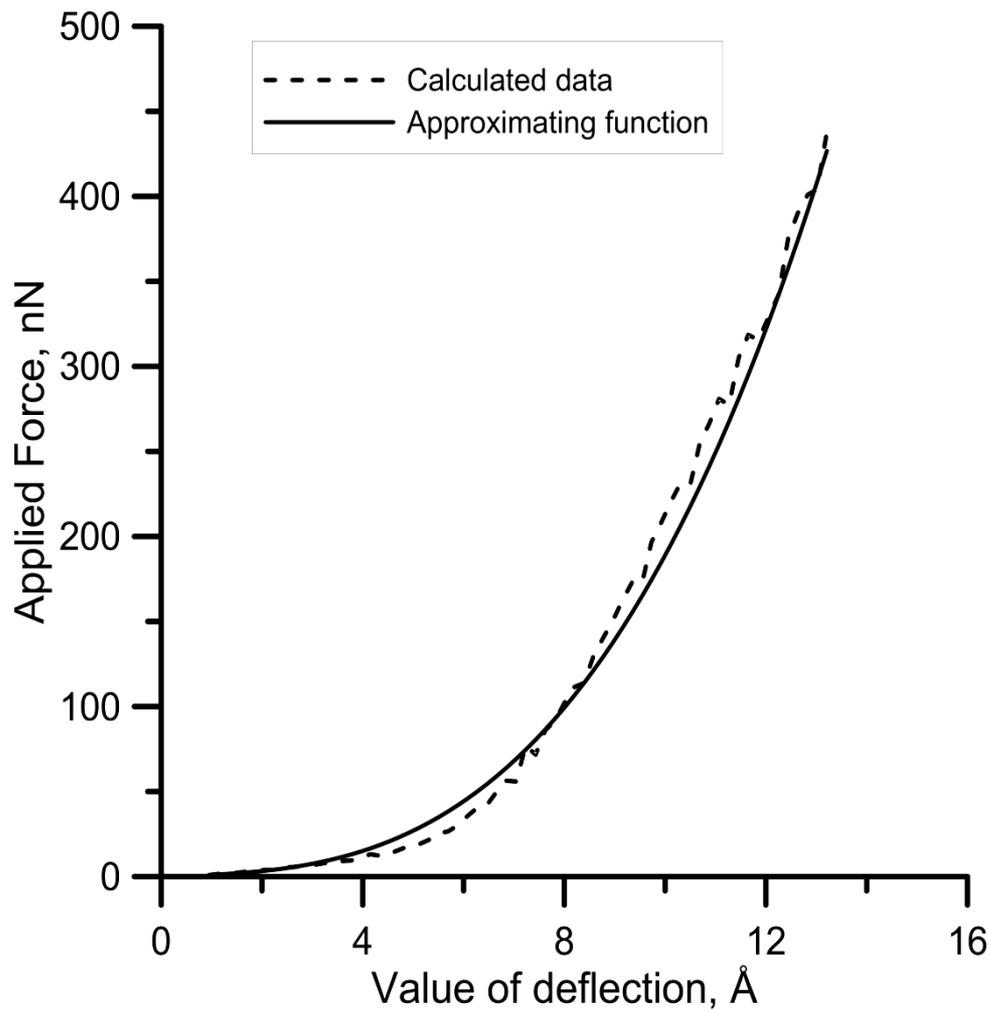
3. Прогиб графена



Монослой графена:

длина 36.9\AA , ширина 41.18\AA

Прогиб графенового листа, жестко закрепленного по краям, осуществлялся методом наноиндентирования. Игла атомно-силового микроскопа моделировалась платиновой пирамидой, имеющей гранецентрированную кубическую решетку. Расстояние между соседними атомами пирамиды было взято 1.42\AA , площадь верхнего слоя пирамиды составила 243.98\AA^2 , площадь нижнего слоя – 18.14\AA^2 , площадь поверхности пирамиды – 346.78\AA^2 .



Зависимость приложенной силы от стрелы прогиба в центре графеновой пластины. Пунктирная линия соответствует данным, полученным в результате эксперимента, сплошная – аппроксимирующей функции

Скорость прогиба графенового фрагмента

$$v = \frac{\delta}{200\Delta t} = 100m / sec$$

$\Delta t = 1\text{фс}$ - временная итерация

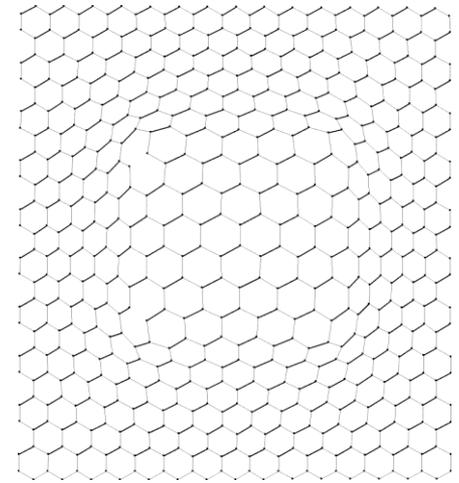
$\delta = 0.2\text{Å}$ - величина сдвига пирамиды

Сила F , необходимая для прогиба ζ

$$F = \frac{W}{\zeta}, \text{ где } W - \text{полная энергия}$$

Аппроксимирующая функция

$$F = 0.18\zeta^3 + 1.57\zeta$$

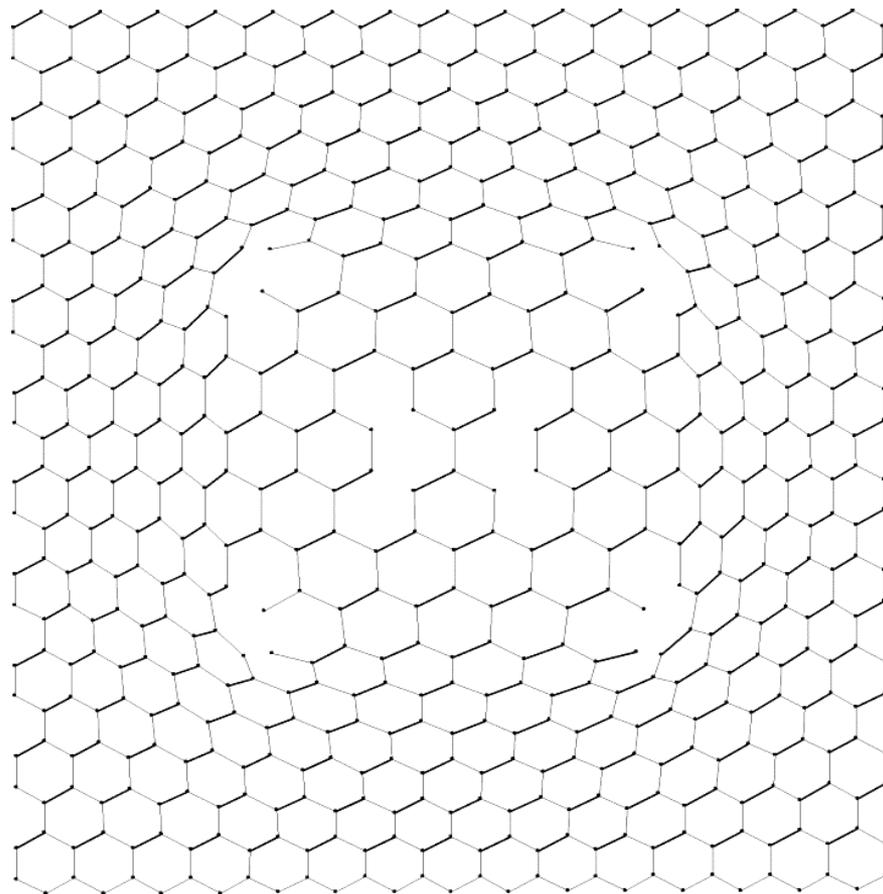
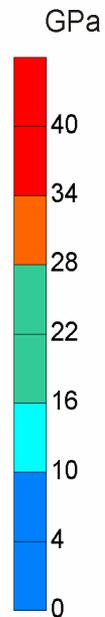
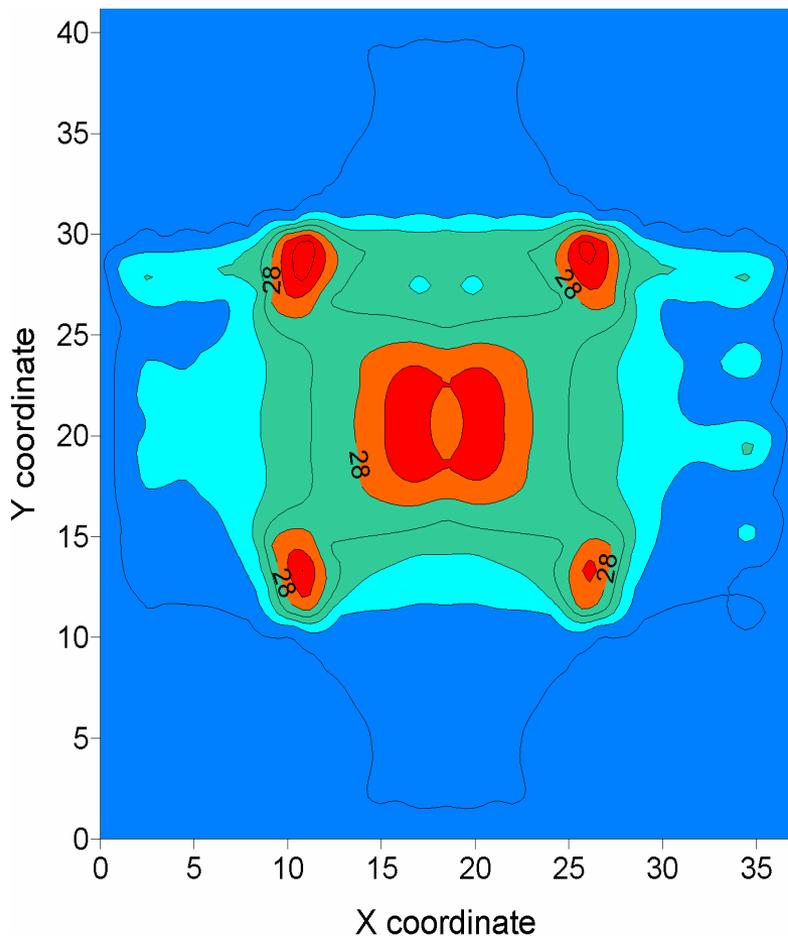


Через 13200 итераций, соответствующих времени $t=13.2$ пс, в графеновом листе наблюдались разрушения связей.

Предельная приложенная сила, которую может выдержать исследуемый нами графеновый фрагмент $F_{\text{пред}} = 437.84$ нН.

Критическое напряжение для графенового листа $\sigma_{\text{critical}} = \frac{F_{\text{lim}}}{S_{\text{surface}}} = 126 \text{ GPa}$

Расчет локальных напряжений на атомах структуры

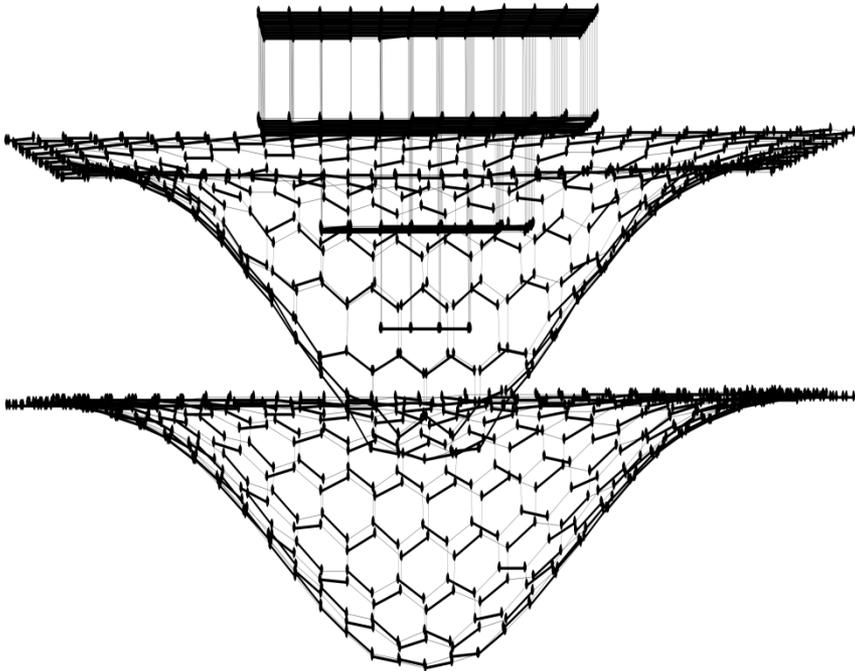


14200 итераций, t=14.2 пс

Критическое напряжение
для графенового листа $\Sigma 41.82 \pm 0.82$ ГПа

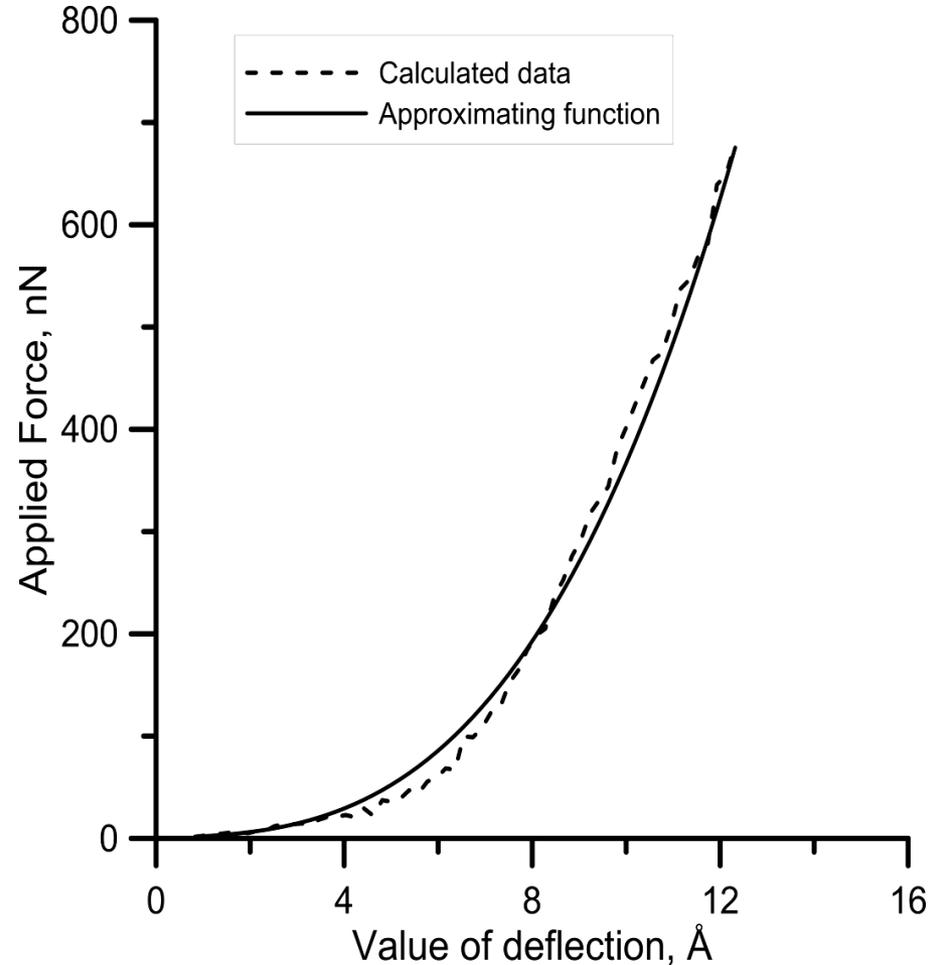
Прогиб бислойного графена

Первые разрушения С-С связей в верхнем графеновом листе наблюдались через 12200 итераций а сила, необходимая для разрыва связей в структуре, оказалась выше – 679.81 nN.



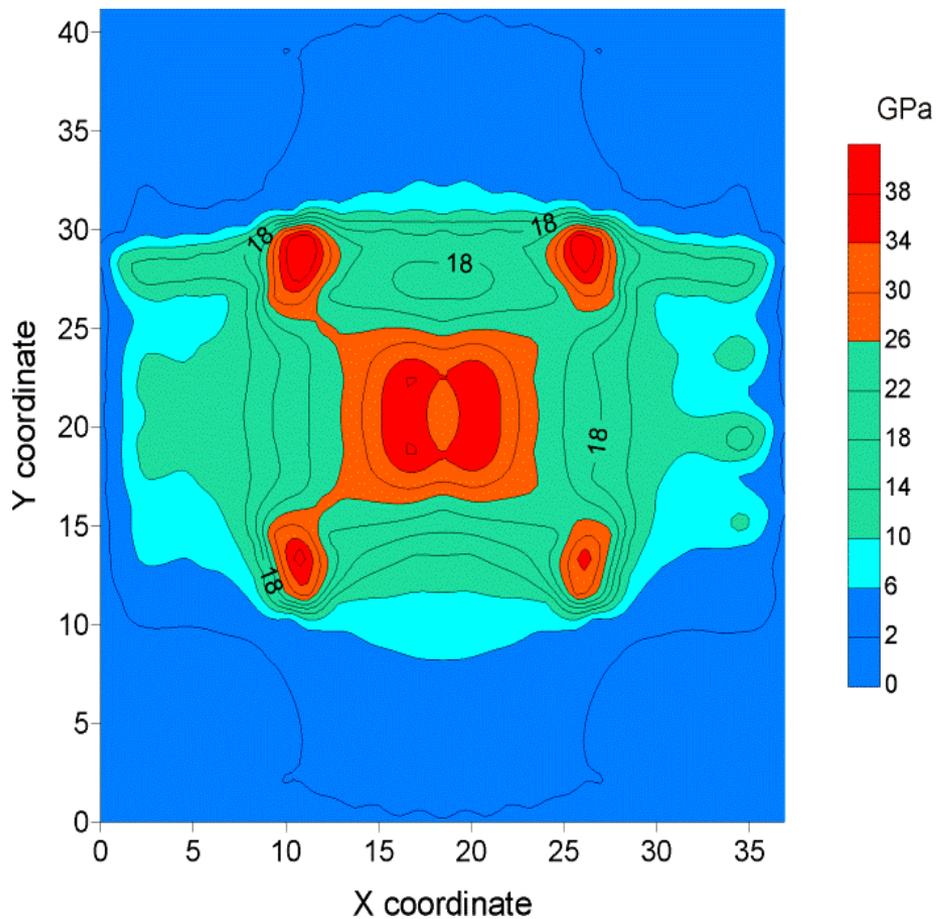
Критическое напряжение для бислойного графенового листа 196 ГПа

Аппроксимирующая функция $F = 0.35\zeta^3 + 1.7\zeta$



Зависимость приложенной силы от стрелы прогиба в центре верхней пластины

Расчет локальных напряжений на атомах структуры



Критическим для данной структуры является локальное напряжение $\Sigma 39 \pm 0.82$ ГПа.

Карта локальных напряжений для верхнего графеного листа за один временной шаг (200фс) до разрыва связей

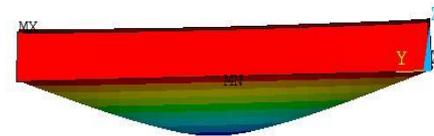
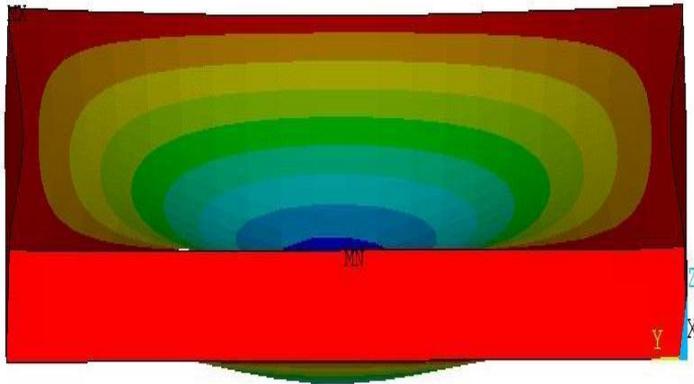
Моделирование процесса прогиба графена

Однослойный графен

1
STEP=1
SUB =1
TIME=1
UZ (AVG)
RSYS=0
DMX =.457591
SMN =-.457465
SMX =.010085

ANSYS 1
JAN 21 2013
10:00:15
STEP=1
SUB =1
TIME=1
UZ (AVG)
RSYS=0
DMX =.457591
SMN =-.457465
SMX =.010085

ANSYS
JAN 21 2013
09:56:49

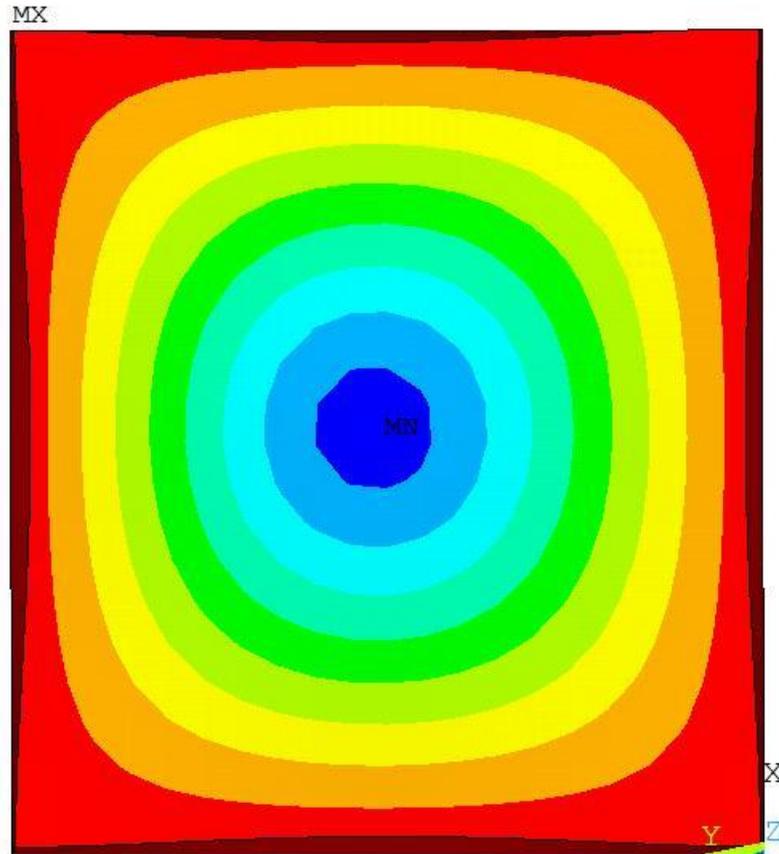


1

STEP=1
SUB =1
TIME=1
UZ (AVG)
RSYS=0
DMX =.457591
SMN =-.457465
SMX =.010085

ANSYS

JAN 21 2013
09:57:51

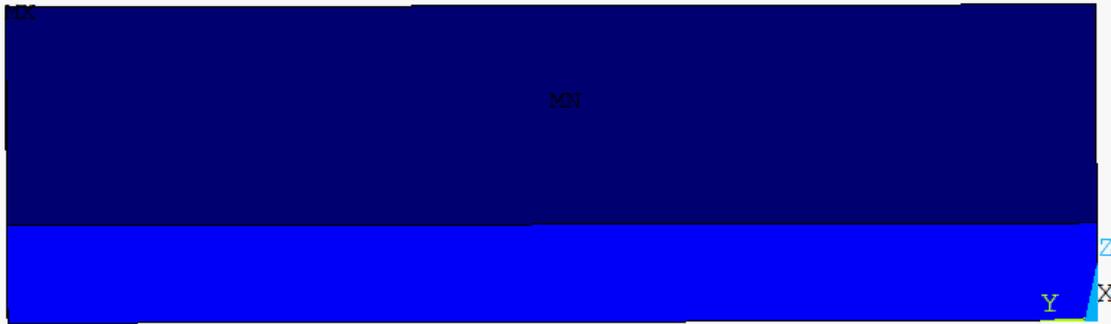


1

ANSYS

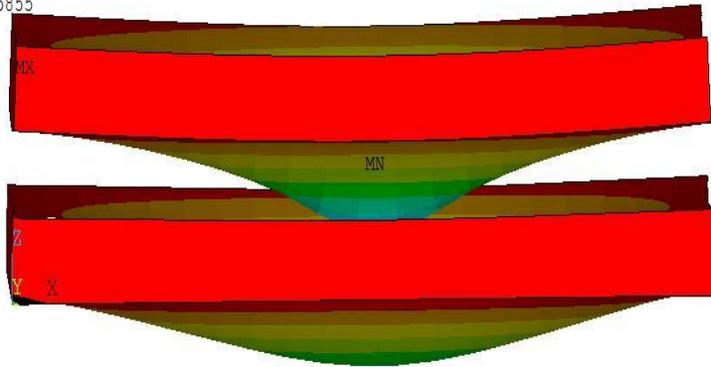
STEP=1
SUB =1
TIME=1
UZ (AVG)
RSYS=0
DMX =.457591
SMN =-.457465
SMX =.010085

JAN 21 2013
10:00:15

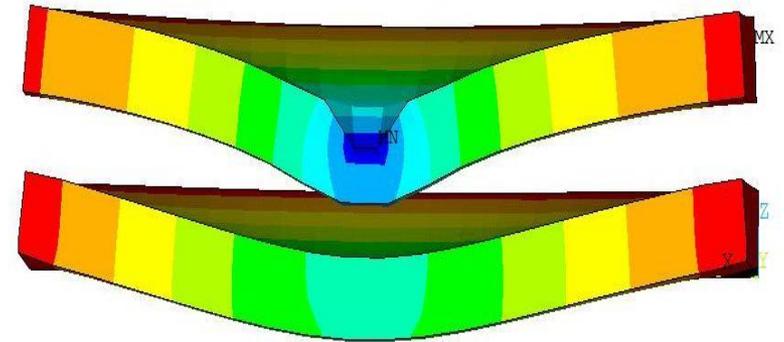


Бислойный графен

1
NODAL SOLUTION
STEP=1
SUB =1
TIME=1
UZ (AVG)
RSYS=0
DMX =.593657
SMN =-.592043
SMX =.015855



ANSYS¹
JAN 21 2013
10:23:47
NODAL SOLUTION
STEP=1
SUB =1
TIME=1
UZ (AVG)
RSYS=0
DMX =.593657
SMN =-.592043
SMX =.015855



ANSYS¹
JAN 21 2013
10:25:49

1

NODAL SOLUTION

ANSYS

JAN 21 2013
10:25:36

STEP=1
SUB =1
TIME=1
UZ (AVG)
RSYS=0
DMX =.593657
SMN =-.592043
SMX =.015855

MN



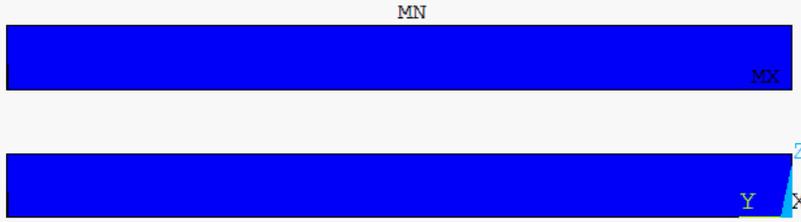
1

NODAL SOLUTION

STEP=1
SUB =7
TIME=1
UZ (AVG)
RSYS=0
DMX =.868711
SMN =-.868711
SMX =.484E-03



DEC 13 2012
16:01:34



1

NODAL SOLUTION

STEP=1

SUB =1

TIME=1

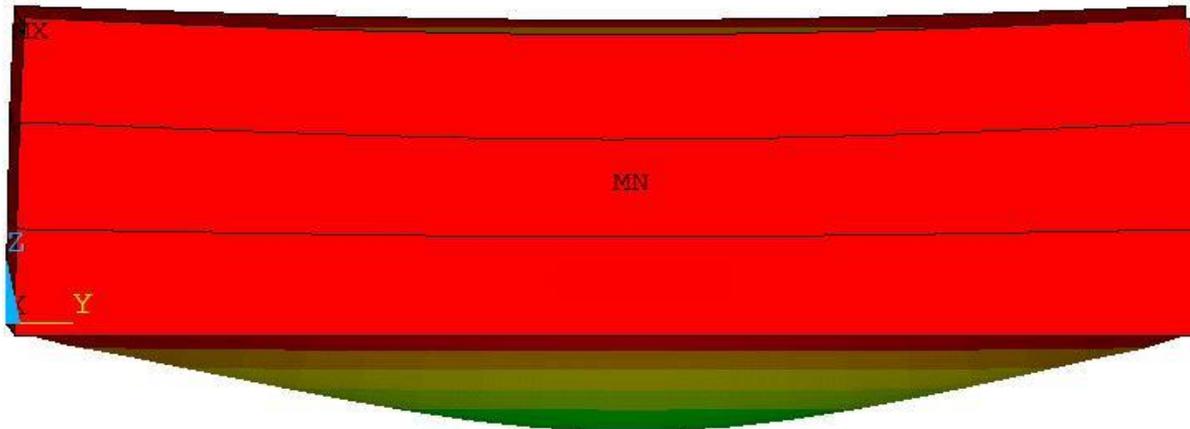
UZ (AVG)

RSYS=0

DMX =.593657

SMN =-.592043

SMX =.015855



МКЭ/МД

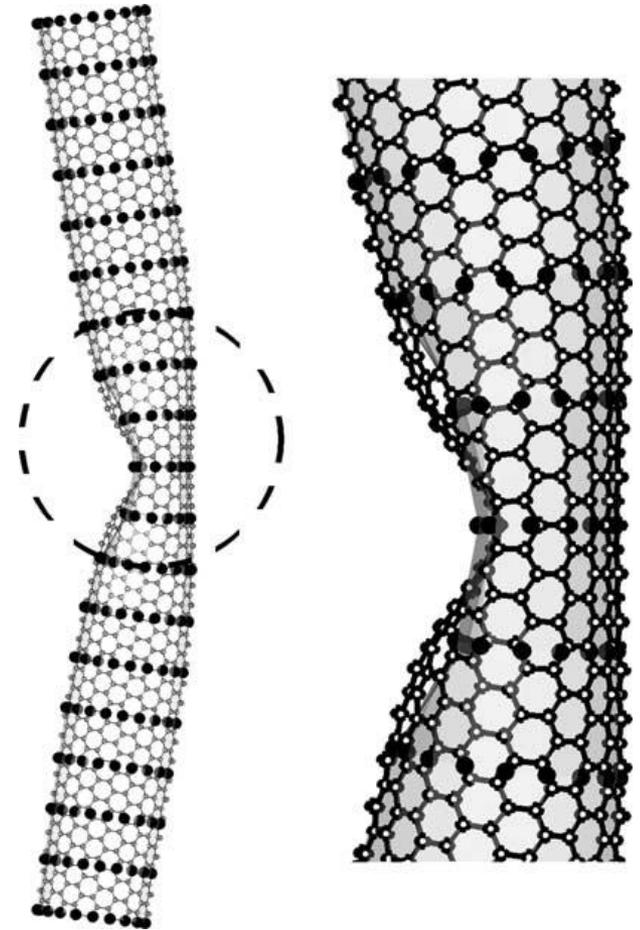
В рамках двухшкальной декомпозиционной схемы величина полного смещения шкалы для α -атома в наномасштабной системе может быть разложена на две составляющие, т.е.

$$u_\alpha = \bar{u}_\alpha + \tilde{u}_\alpha$$

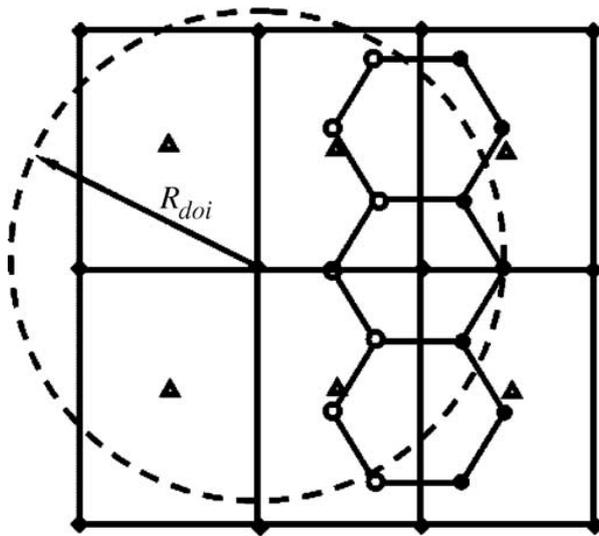
\bar{u}_α - компонента крупнозернистой шкалы, которая определена с помощью конечно-элементного разбиения или функции добавочной формы на множестве узловых точек, т.е.

$$\bar{u}_\alpha = \sum_I N_I(X_\alpha) d_I$$

где $N_I(X_\alpha)$ - функция формы, определенная в вычислительном узле I и вычисленная для атома α с координатой Лагранжа X_α , d_I - вектор смещения в узле I .



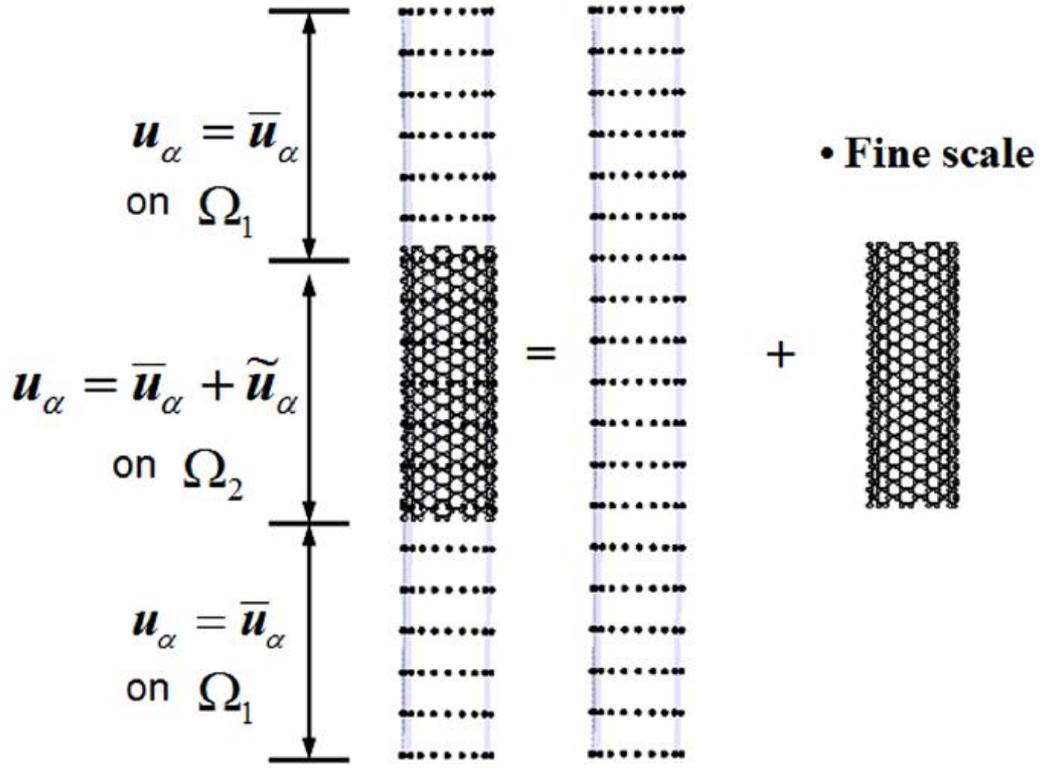
Мультимасштабное разбиение для деформированной одностенной углеродной нанотрубки



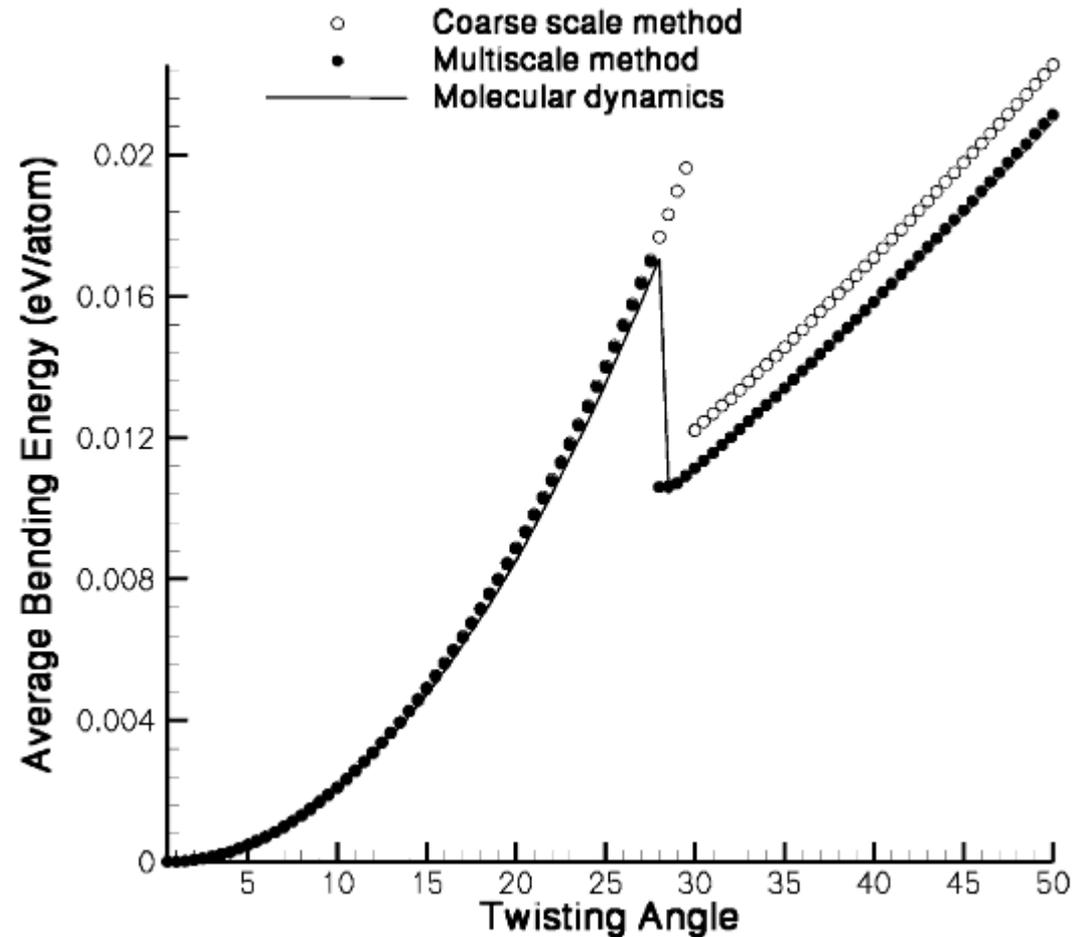
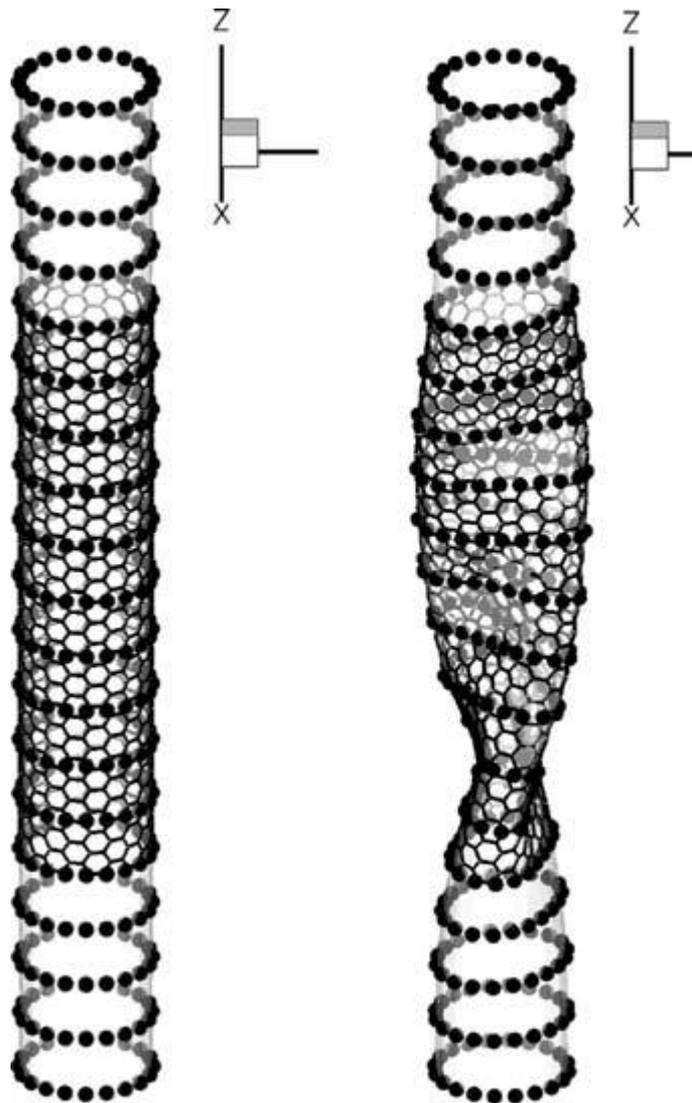
- Ghost atom
- Real atom
- ◆ Meshfree/FEM node
- ▲ Quadrature point

Coarse scale domain Ω_1 Coupled domain Ω_2

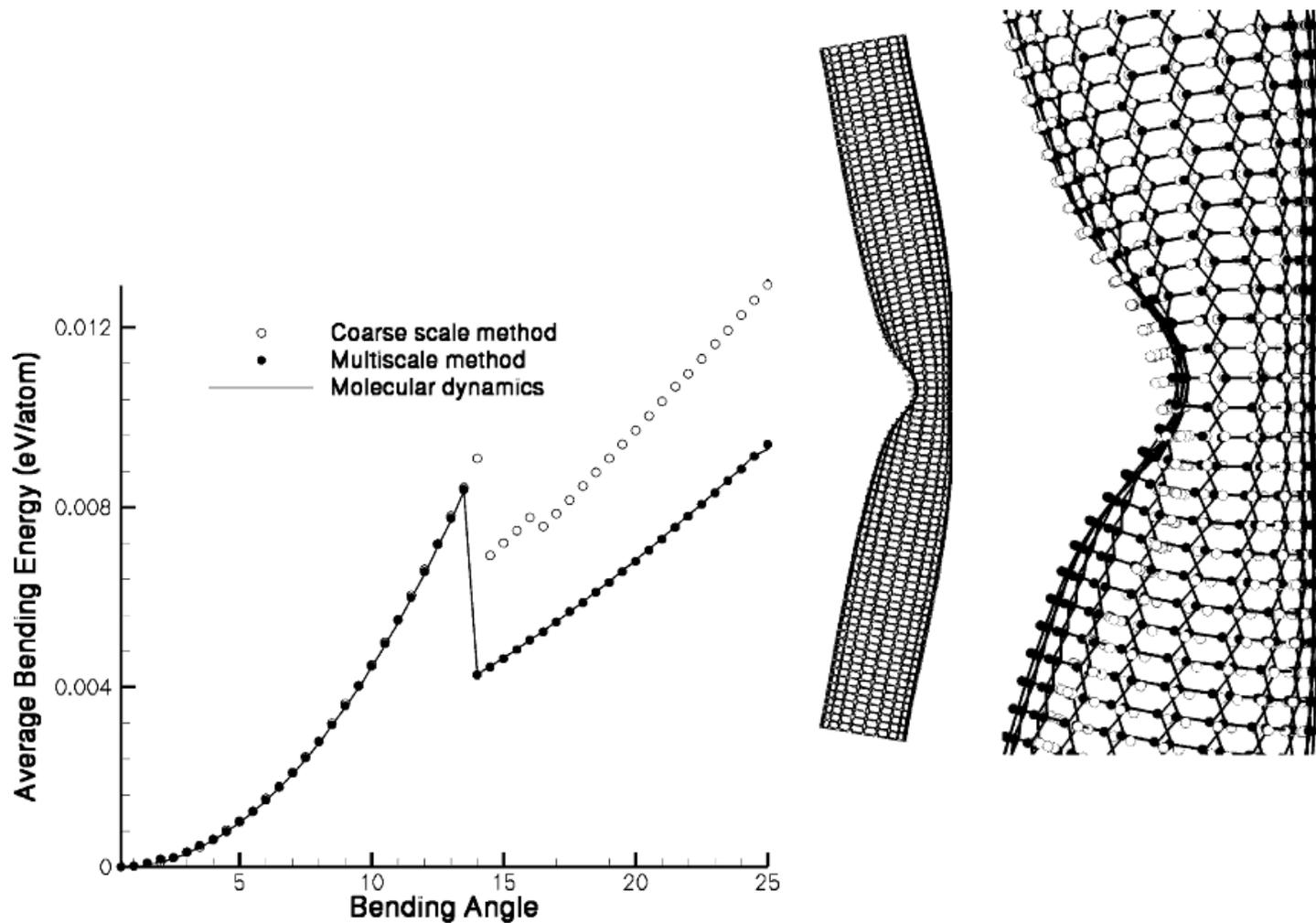
• Coarse scale



(Слева) Начальное распределение частиц и сложенная молекулярная структура углеродной нанотрубки в случае скручивания. (Справа) Конечная деформация частицы и молекулярная структура нанотрубки при скручивании на угол 50°



(Слева) Начальное распределение частиц и сложенная молекулярная структура углеродной нанотрубки в случае скручивания. (Справа) Конечная деформация частицы и молекулярная структура нанотрубки на конечной стадии изгиба.



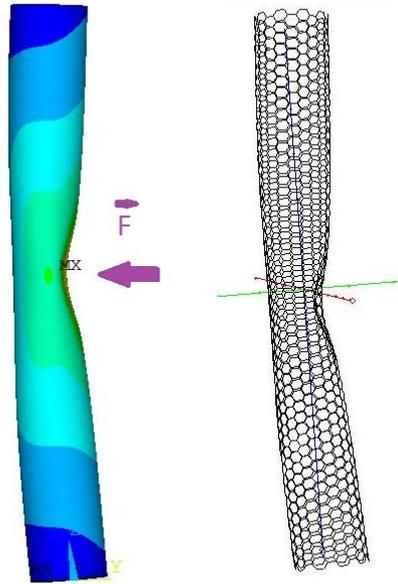
Изгиб нанотрубки: деформация моделируется МКЭ

NODAL SOLUTION

STEP=1
SUB =6
TIME=1
USUM (AVG)
RSYS=0
DMX =8.14505
SMX =8.14505

ANSYS

JAN 21 2013
11:26:00



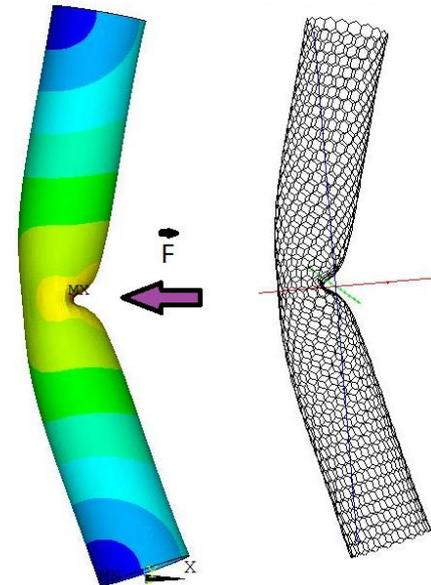
NODAL SOLUTION

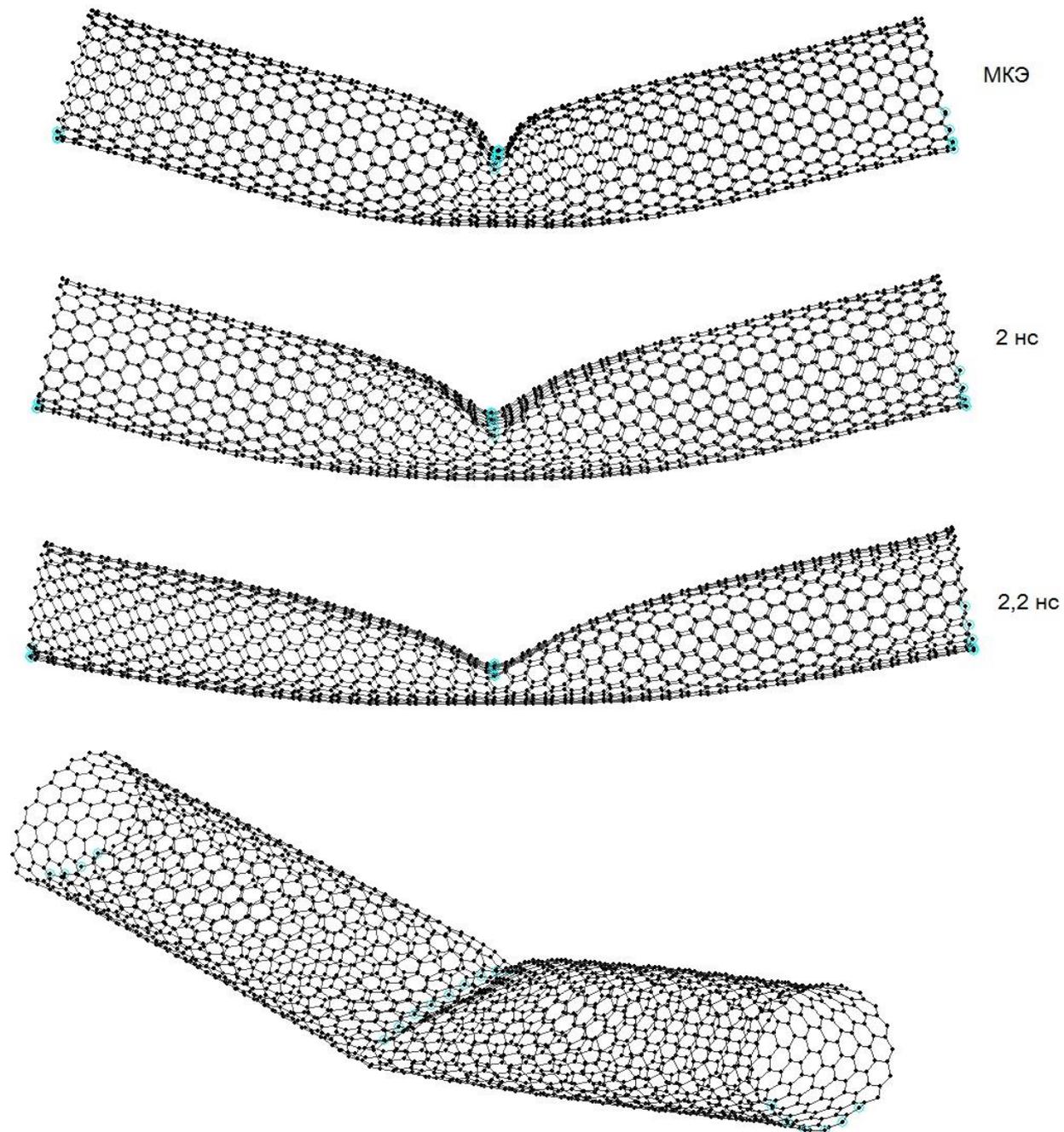
STEP=1
SUB =10
TIME=1
USUM (AVG)
RSYS=0
DMX =17.3318
SMX =17.3318

15 HH

ANSYS

JAN 21 2013
11:24:22



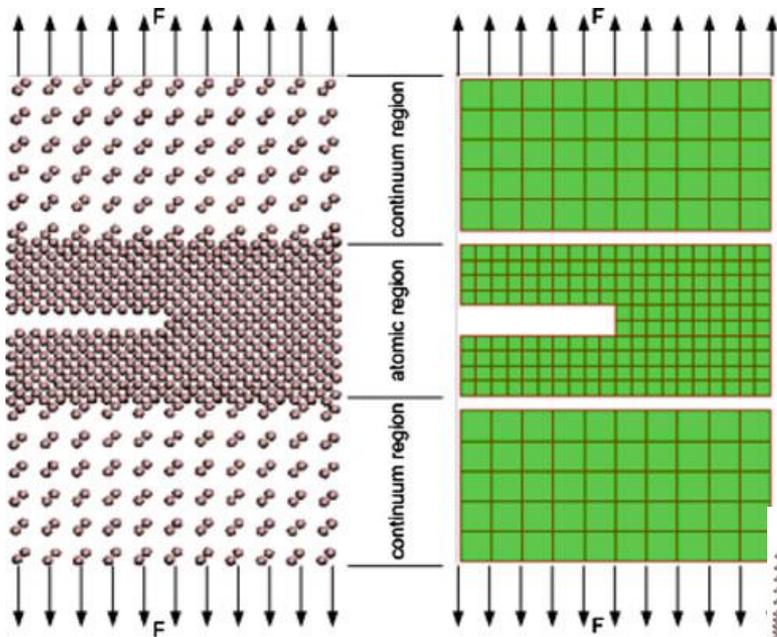


МКЭ

2 нс

2,2 нс

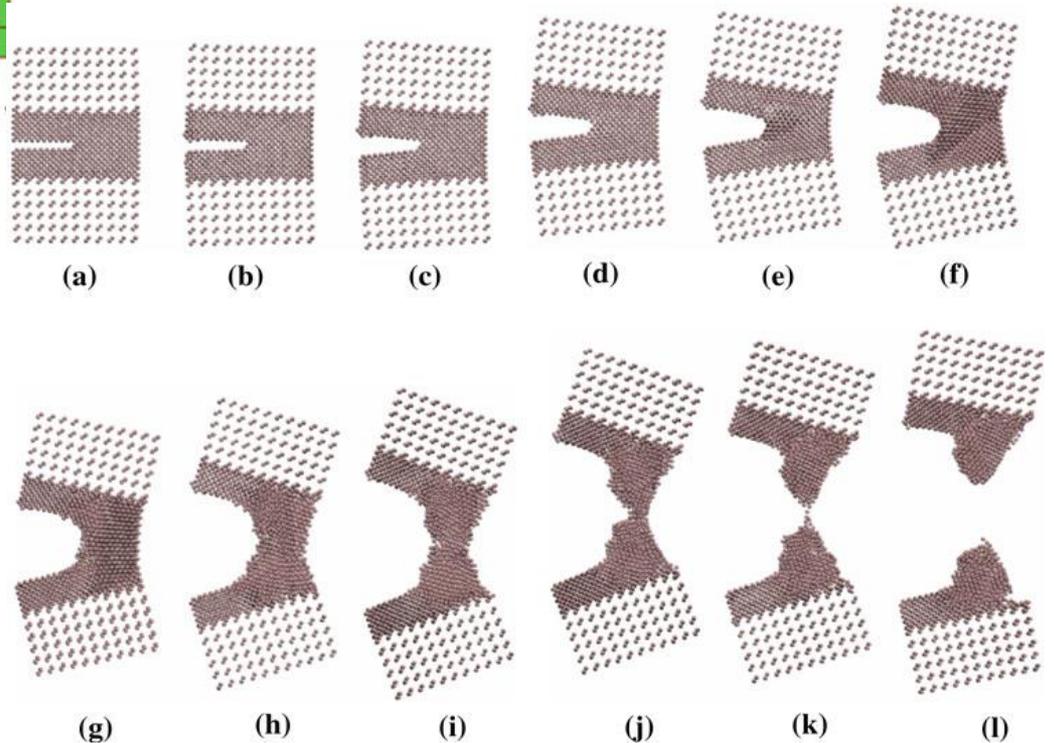
Корректирование
атомной сетки
трубки методом
REBO
(МД)



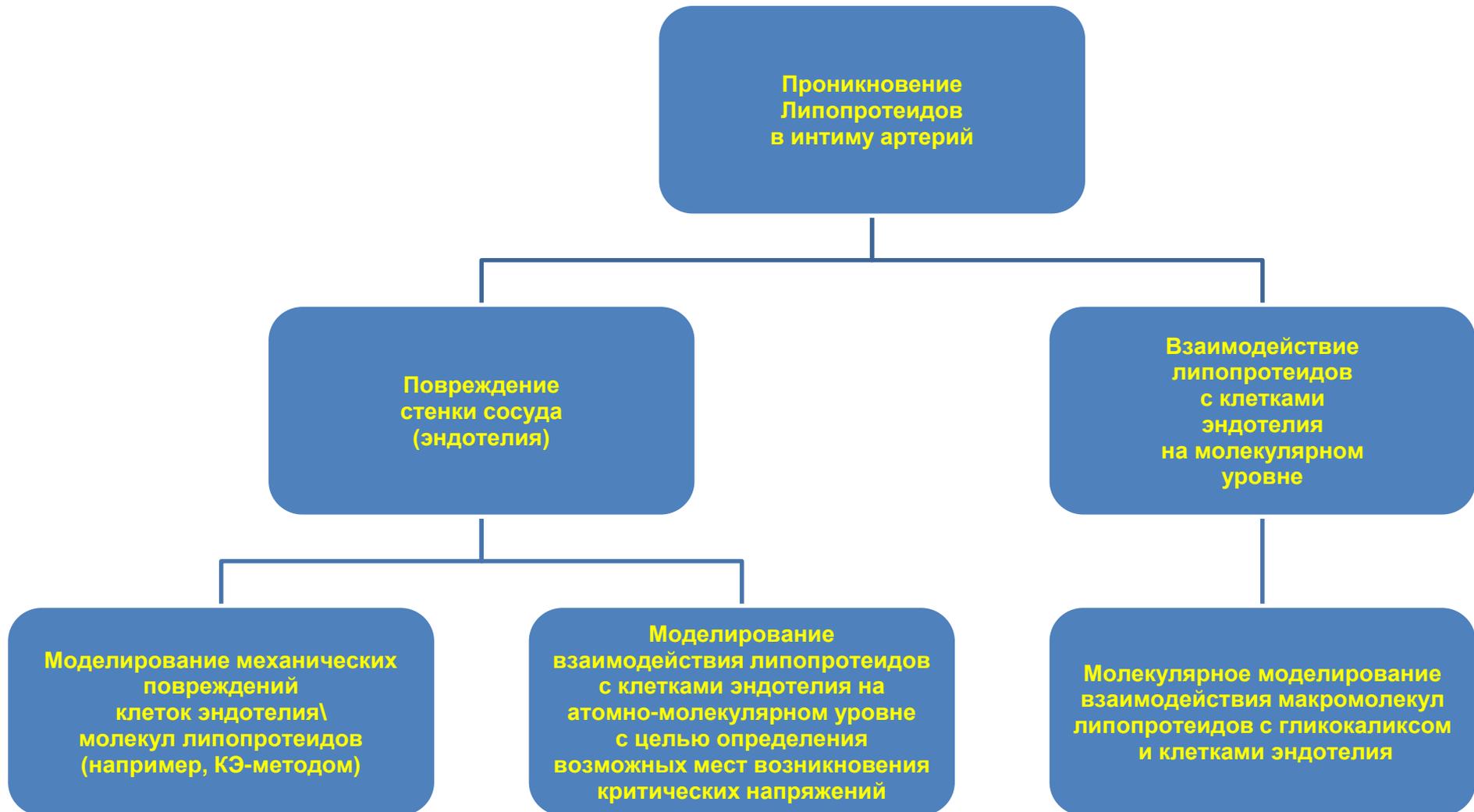
Мультимасштабное
моделирование
распространения трещин

Динамический процесс
распространения трещины в рамках
мультимасштабной модели:

a $t = 0$, **b** $t = 5.0 \times 10^5$, **c** $t = 1.0 \times 10^6$,
d $t = 1.25 \times 10^6$, **e** $t = 1.5 \times 10^6$,
f $t = 1.625 \times 10^6$, **g** $t = 1.75 \times 10^6$,
h $t = 1.875 \times 10^6$, **i** $t = 1.95 \times 10^6$,
j $t = 2.0 \times 10^6$, **k** $t = 2.05 \times 10^6$,
l $t = 2.125 \times 10^6$

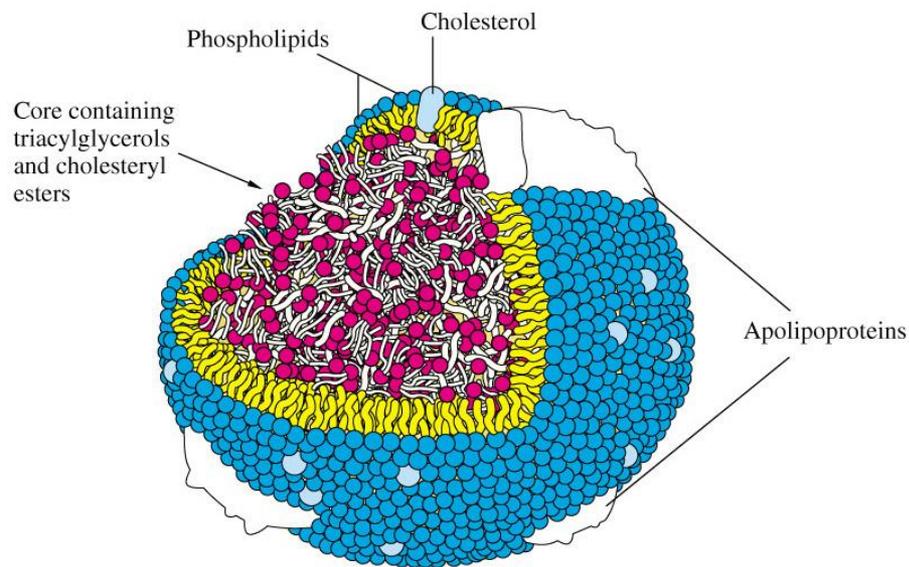
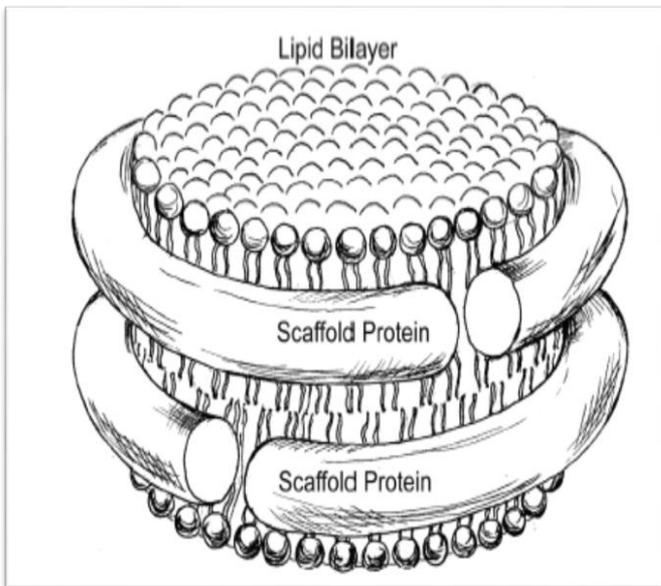


Процесс липопротеидной инфильтрации в интиму артерий: МКЭ/крупно-зернистая МД



Липопroteиды

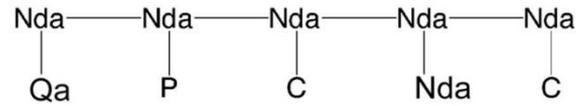
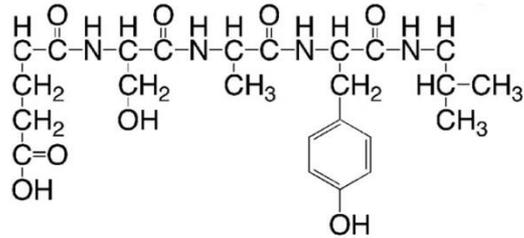
Схематическое изображение липопroteида высокой плотности



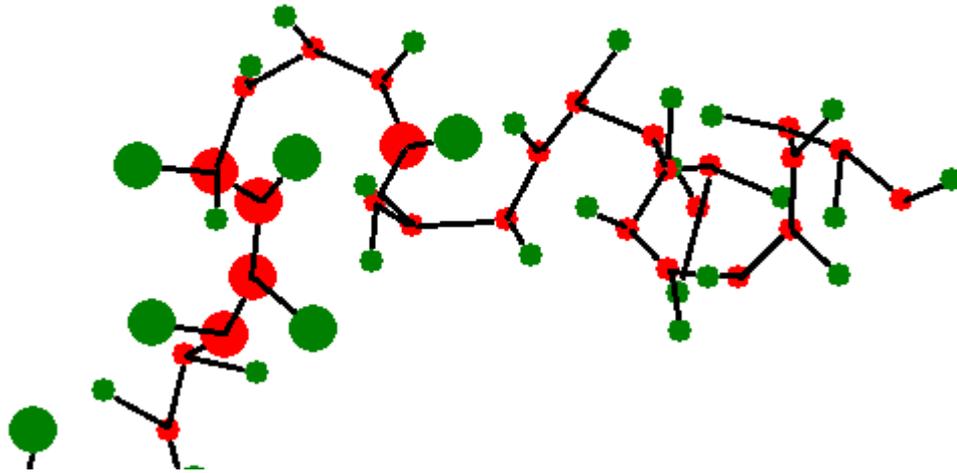
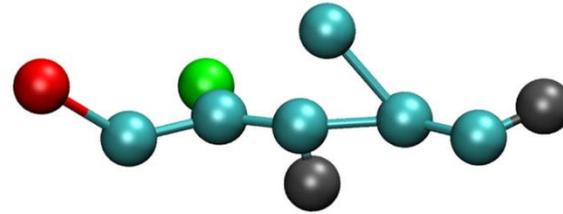
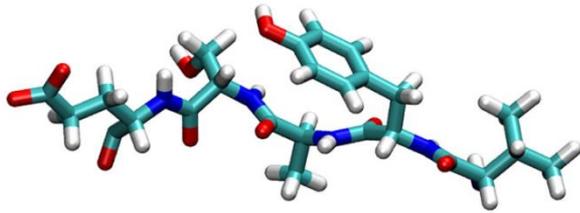
Липопroteид низкой плотности



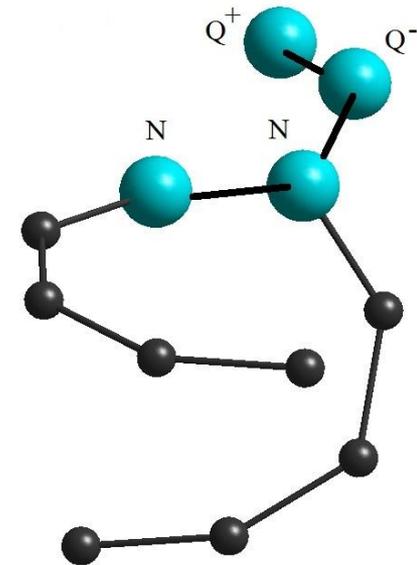
Крупнозернистая модель протеинов



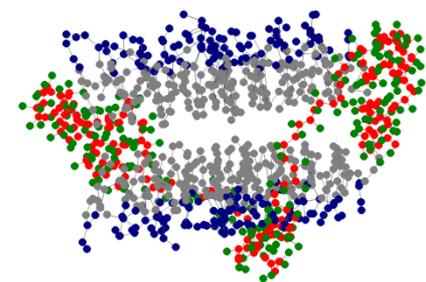
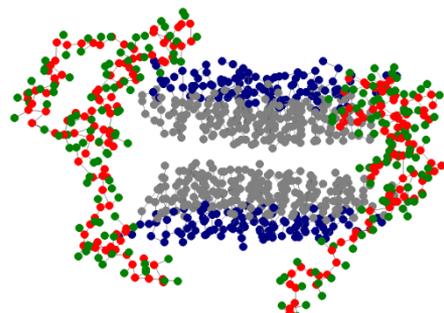
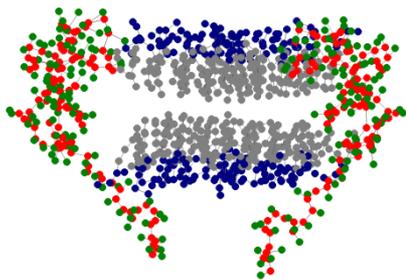
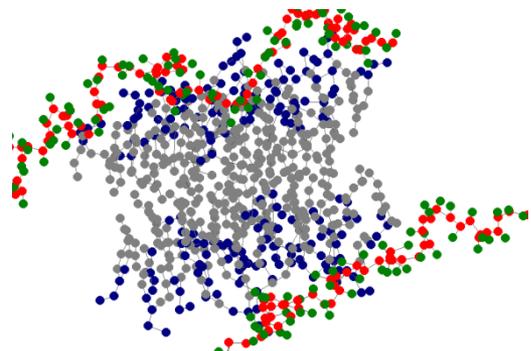
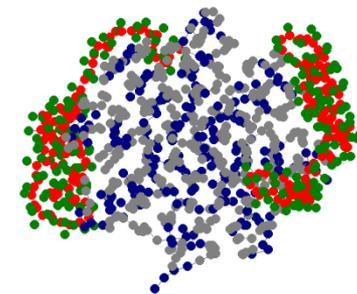
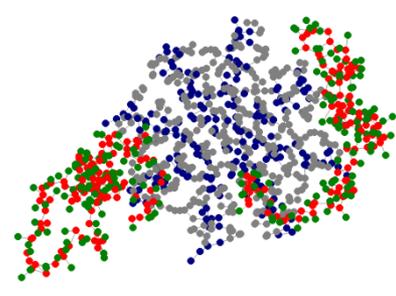
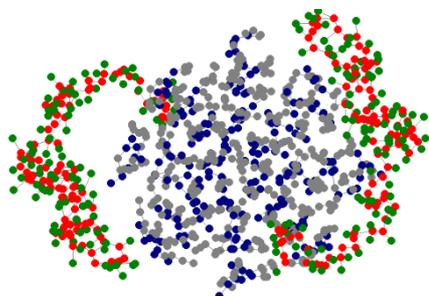
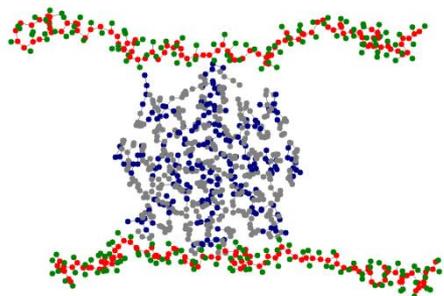
Белковые, как правило амфифильные, составляющие липопротеинов, специфически связывающиеся с соответствующими липидами при формировании липопротеиновой частицы



Спиралевидная структура протеина.
Модель фосфолипидной структуры



Самосборка липопротеида высокой плотности



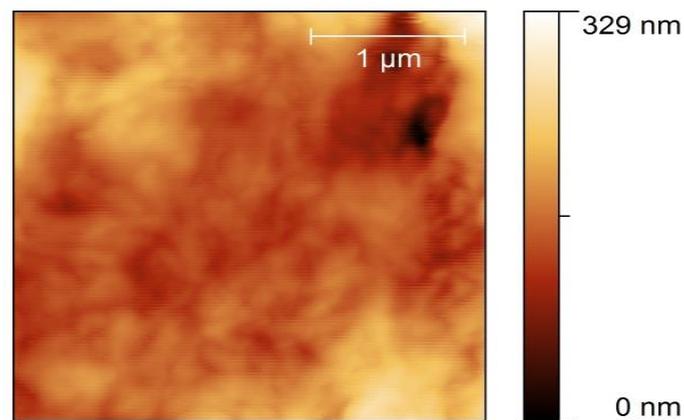
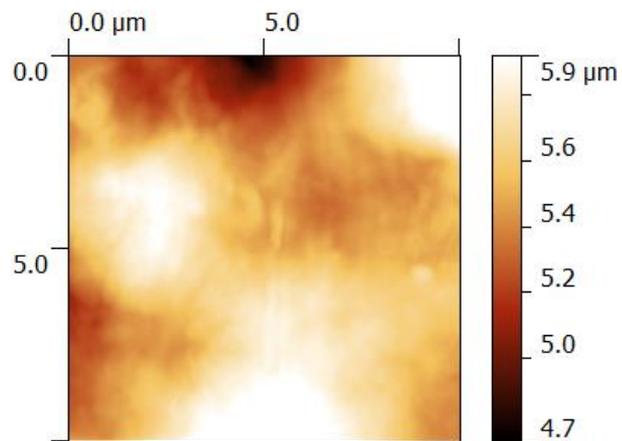
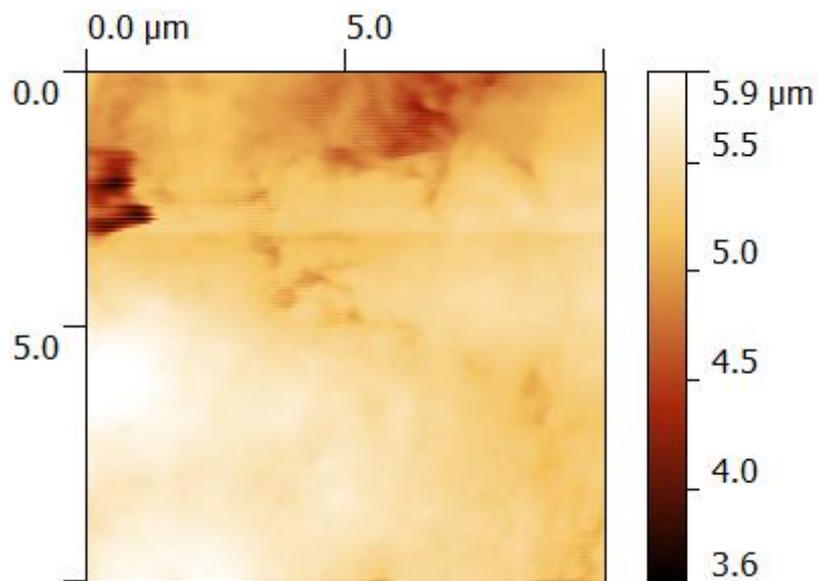
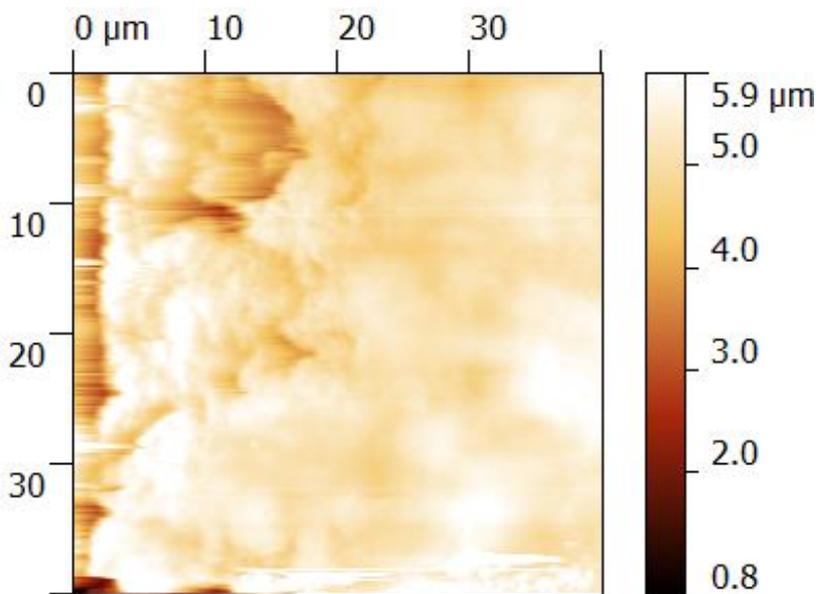
Начальный этап

20 нс

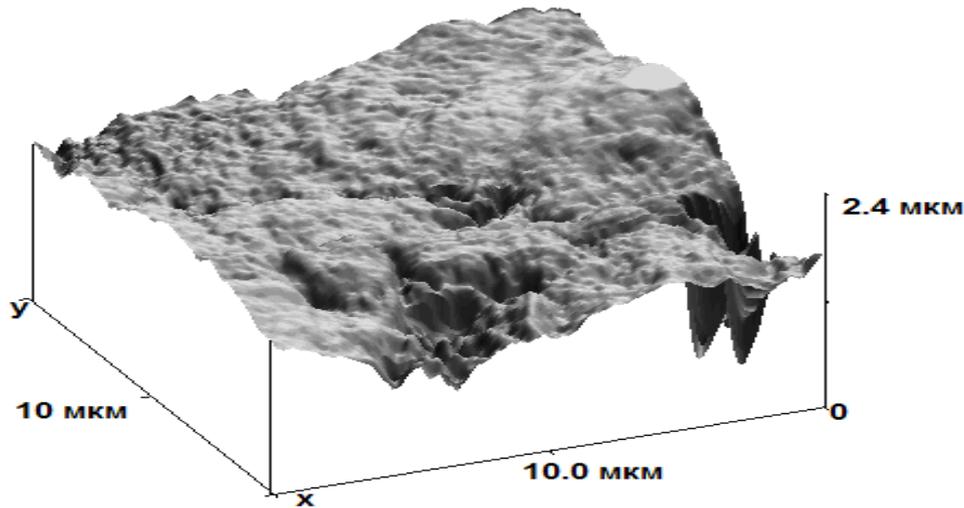
60 нс

270 нс

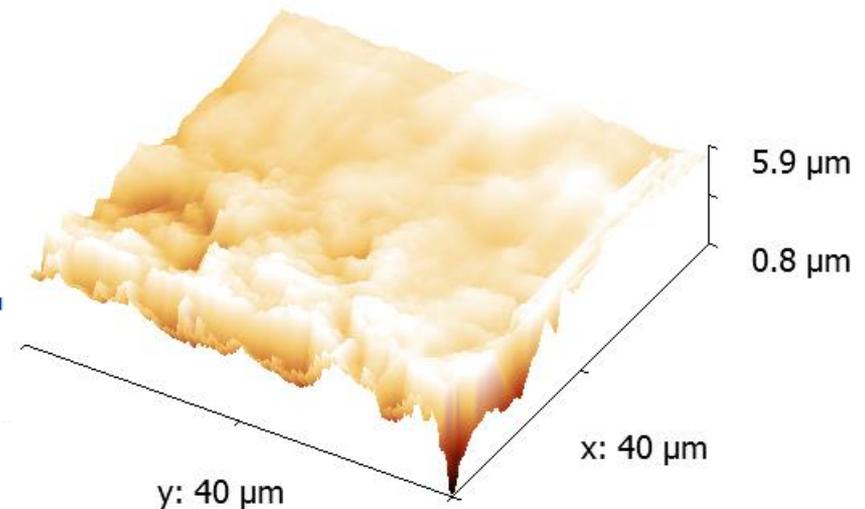
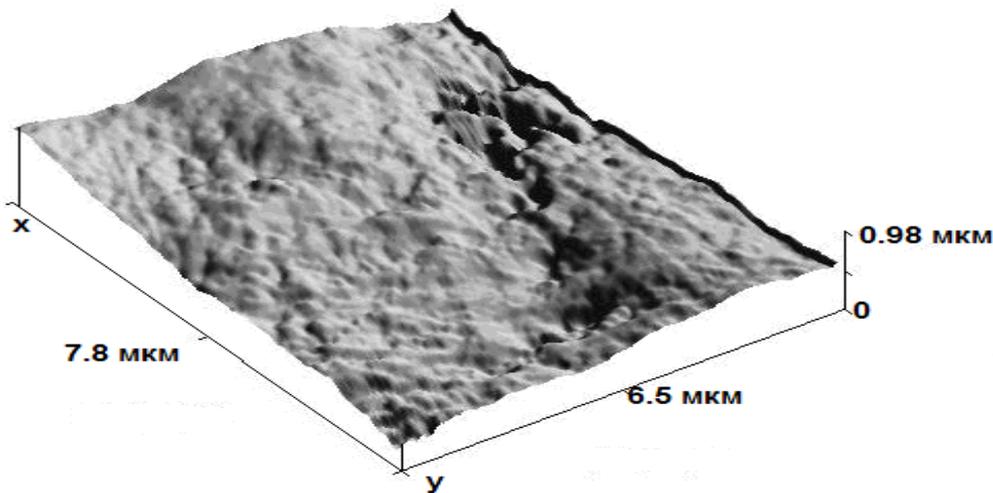
Применение атомной силовой микроскопии для исследования топологии поверхности эндотелия и построения конечно-элементной модели поверхности эндотелия



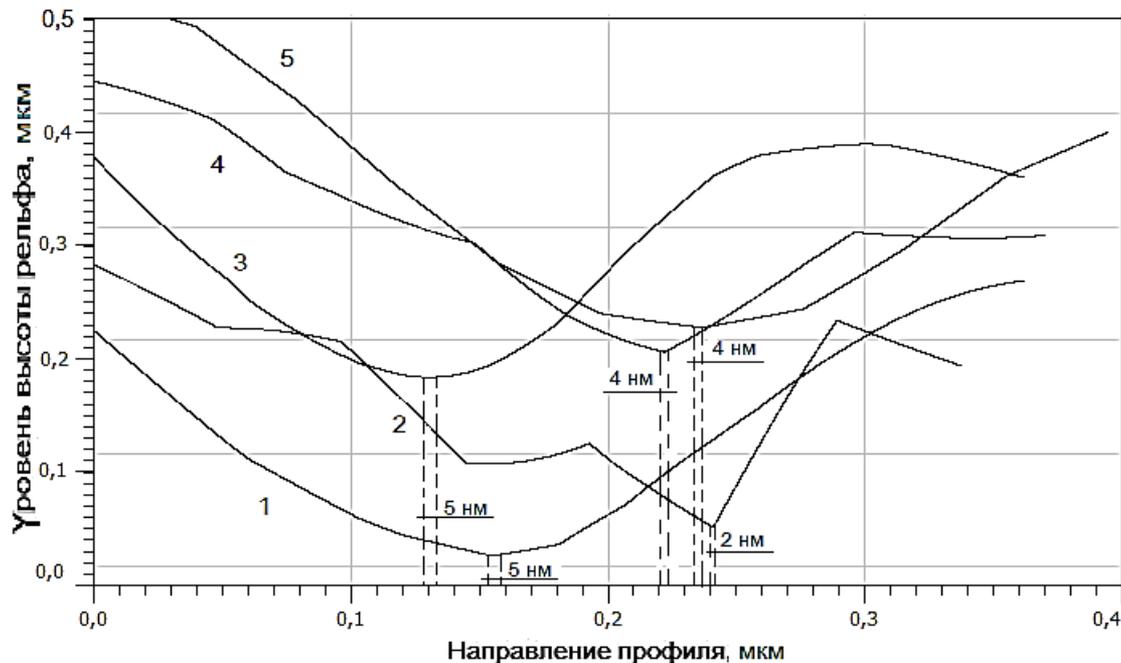
Применение атомной силовой микроскопии для исследования топологии поверхности эндотелия



- Развитая топология поверхности
- Перепады высот варьируются в пределах 5 мкм

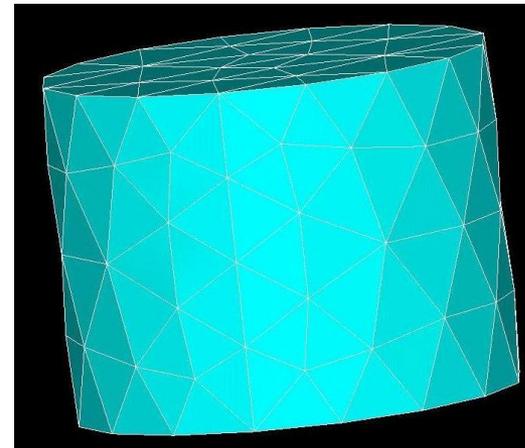
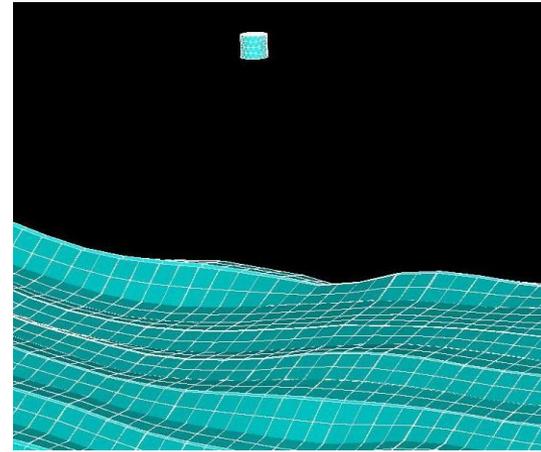
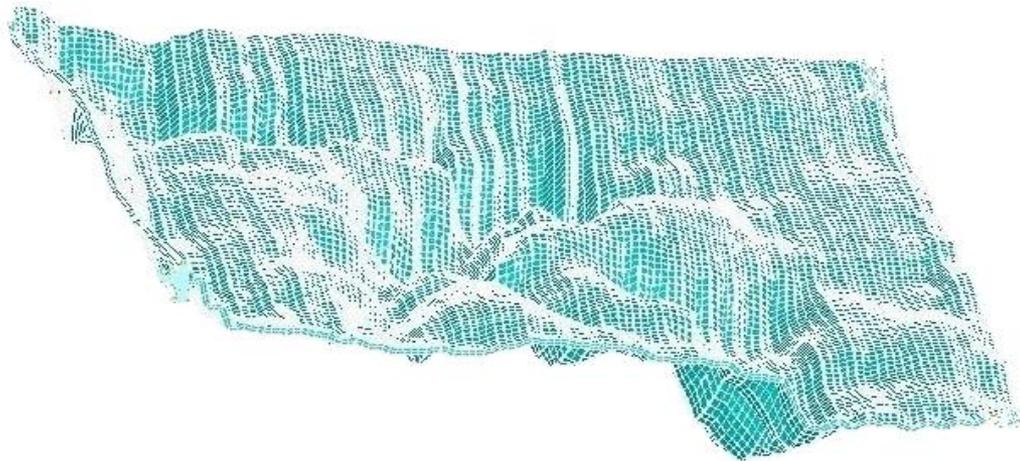
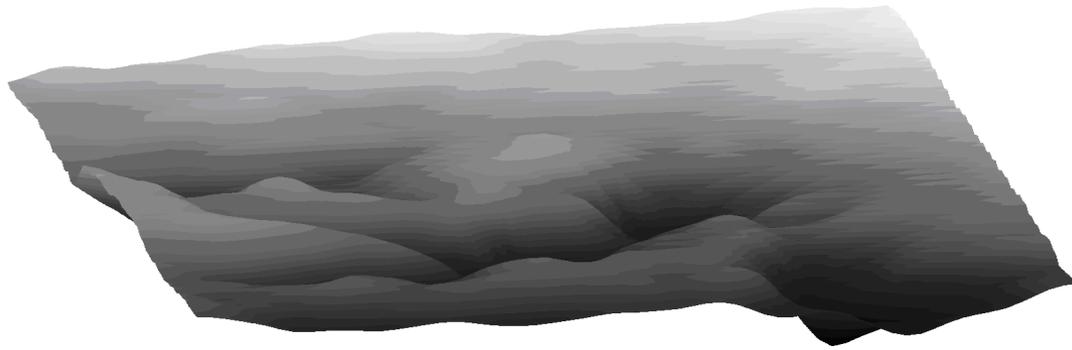


Применение атомной силовой микроскопии для исследования топологии поверхности эндотелия

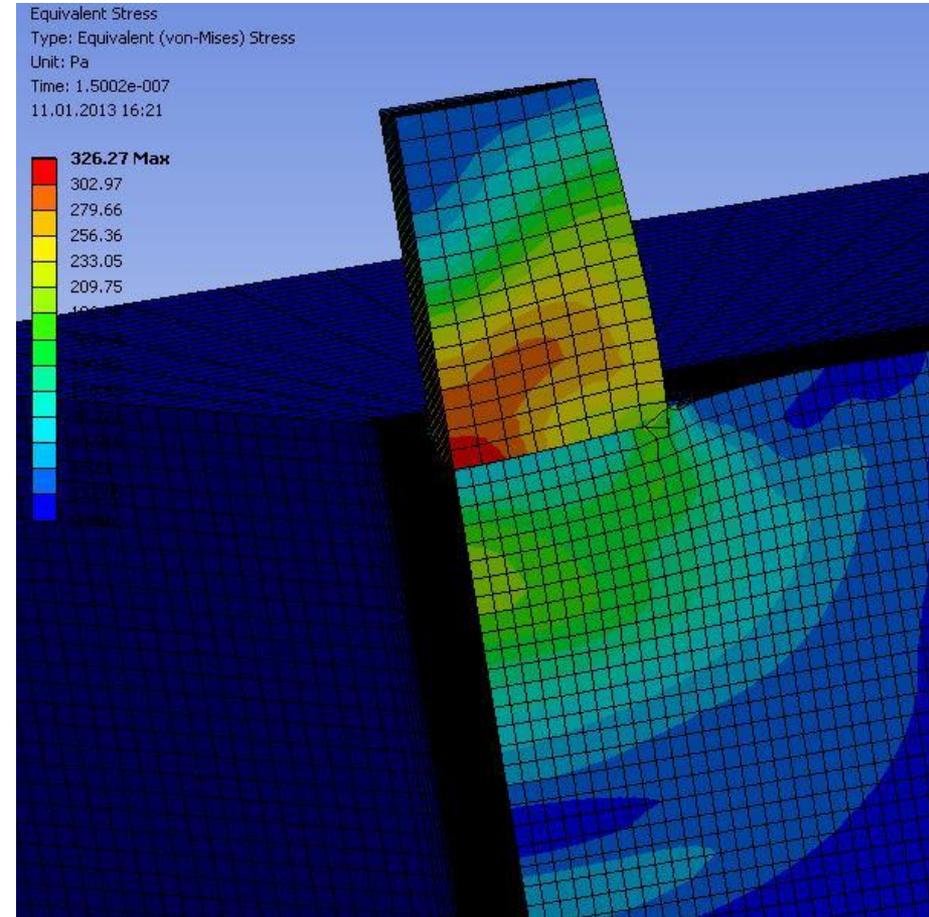
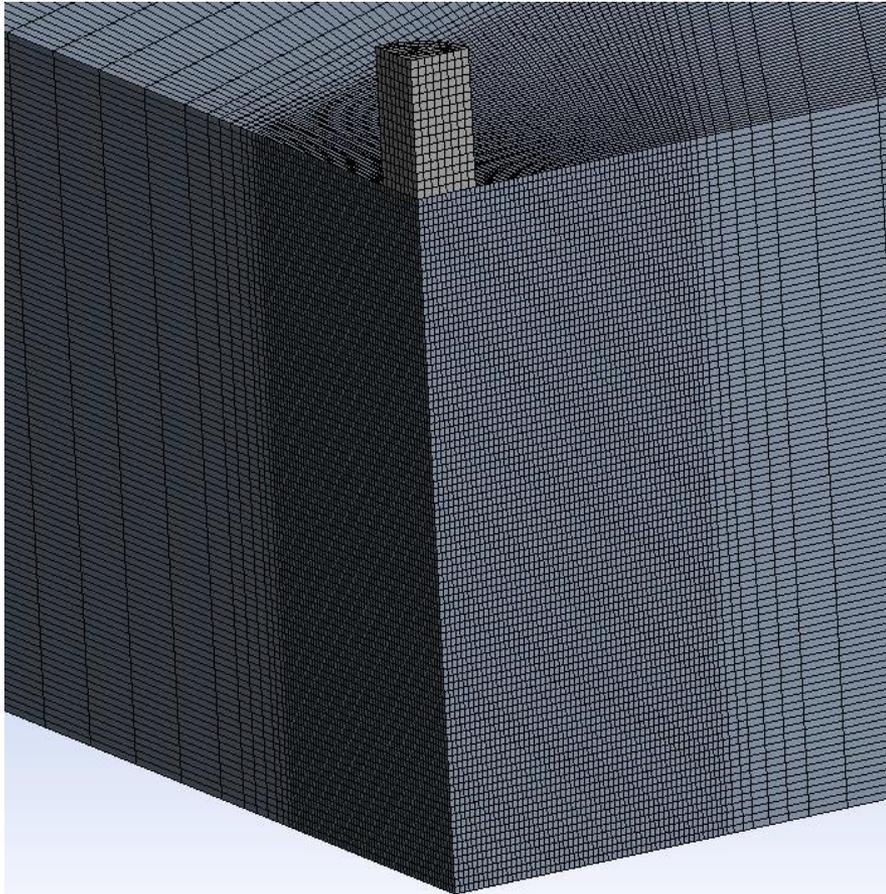


Исследование щелевой области стыка между клетками показало, что максимальная ширина (измеряемая по наиболее высоким точкам границ клеток) составляет $\sim 0,5$ мкм, а наибольшая глубина – $\sim 0,4$ мкм. Характер изменения уровня высоты каждого профиля индивидуален, поскольку определяется формой граничных областей клеток.

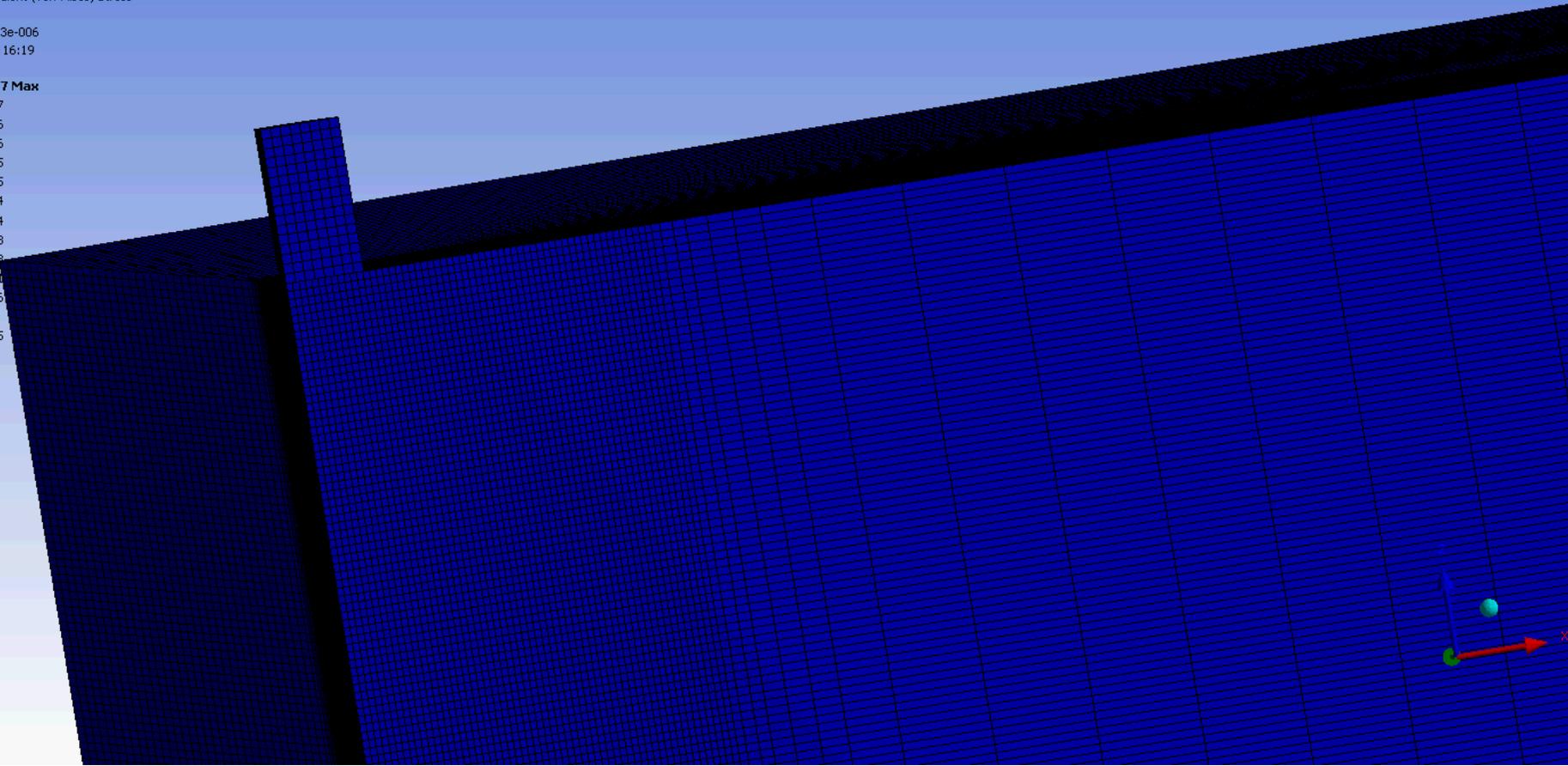
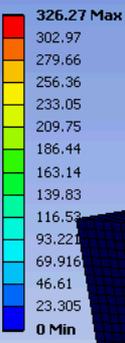
Конечно-элементное моделирование взаимодействия липопротеинов и клеток эндотелия



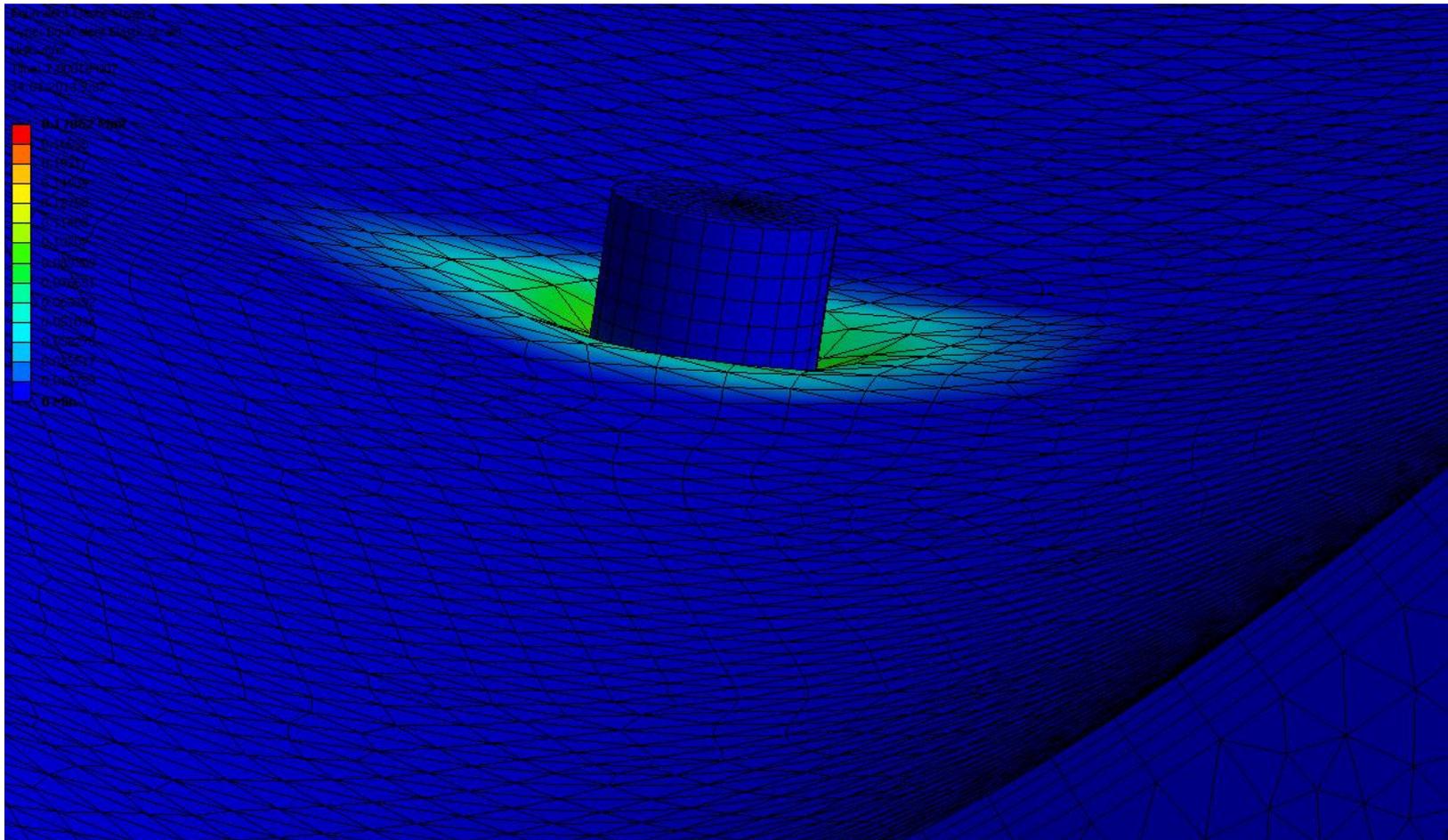
4. Конечно-элементное моделирование взаимодействия липопротеинов и клеток эндотелия



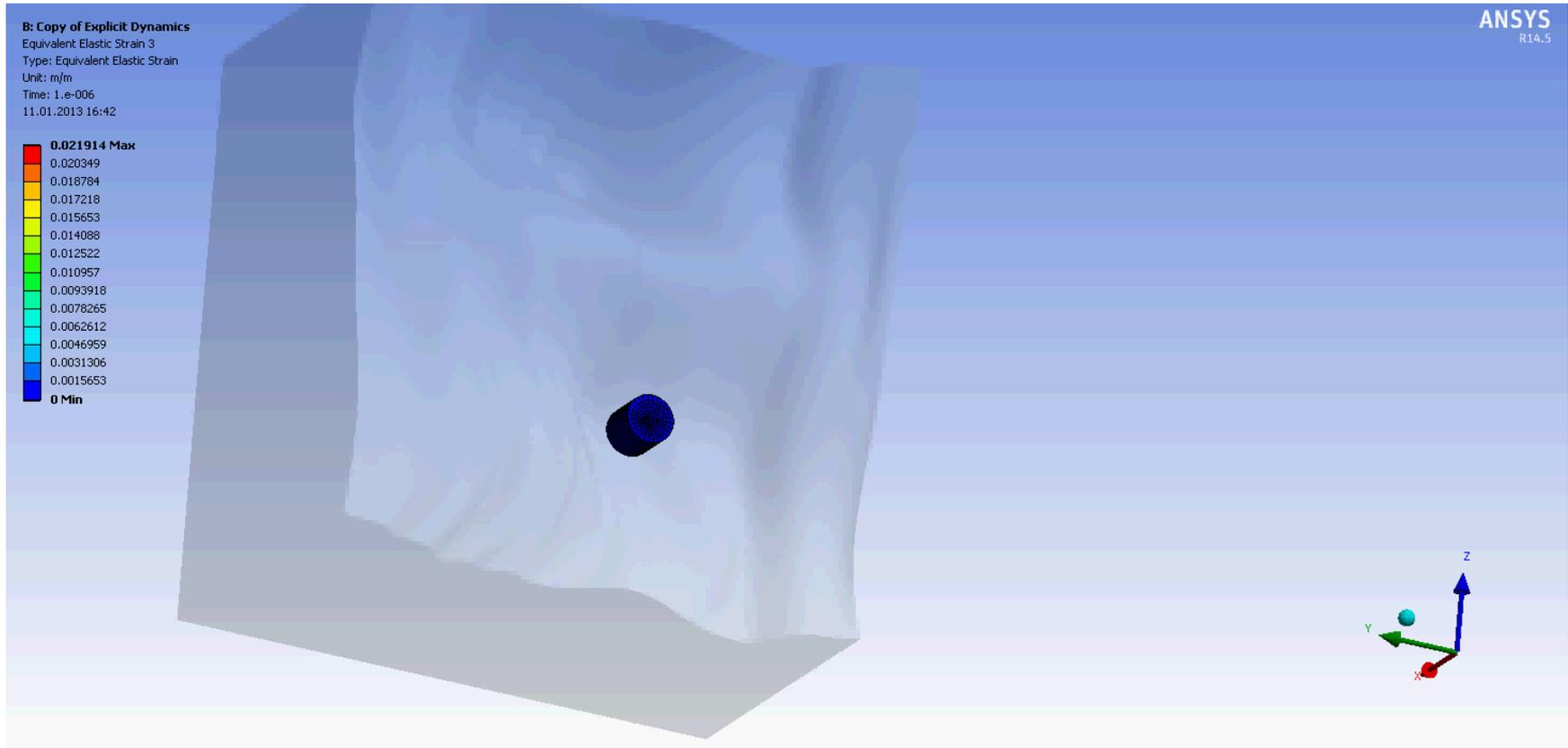
D: 1.25e-8
Equivalent Stress
Type: Equivalent (von-Mises) Stress
Unit: Pa
Time: 1.0003e-006
11.01.2013 16:19



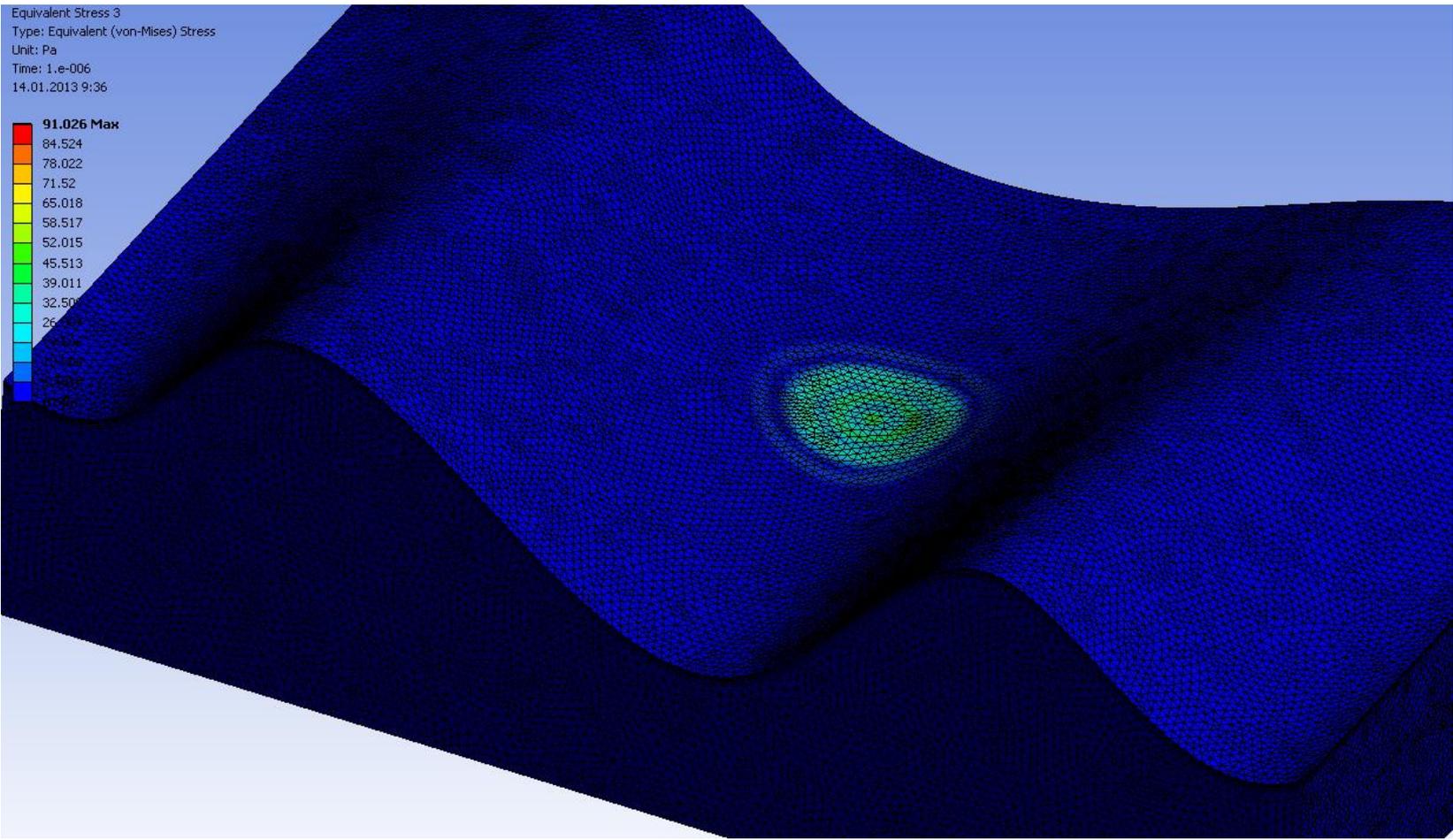
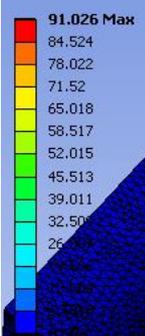
Взаимодействие единичного липопротеина с клетками эндотелия



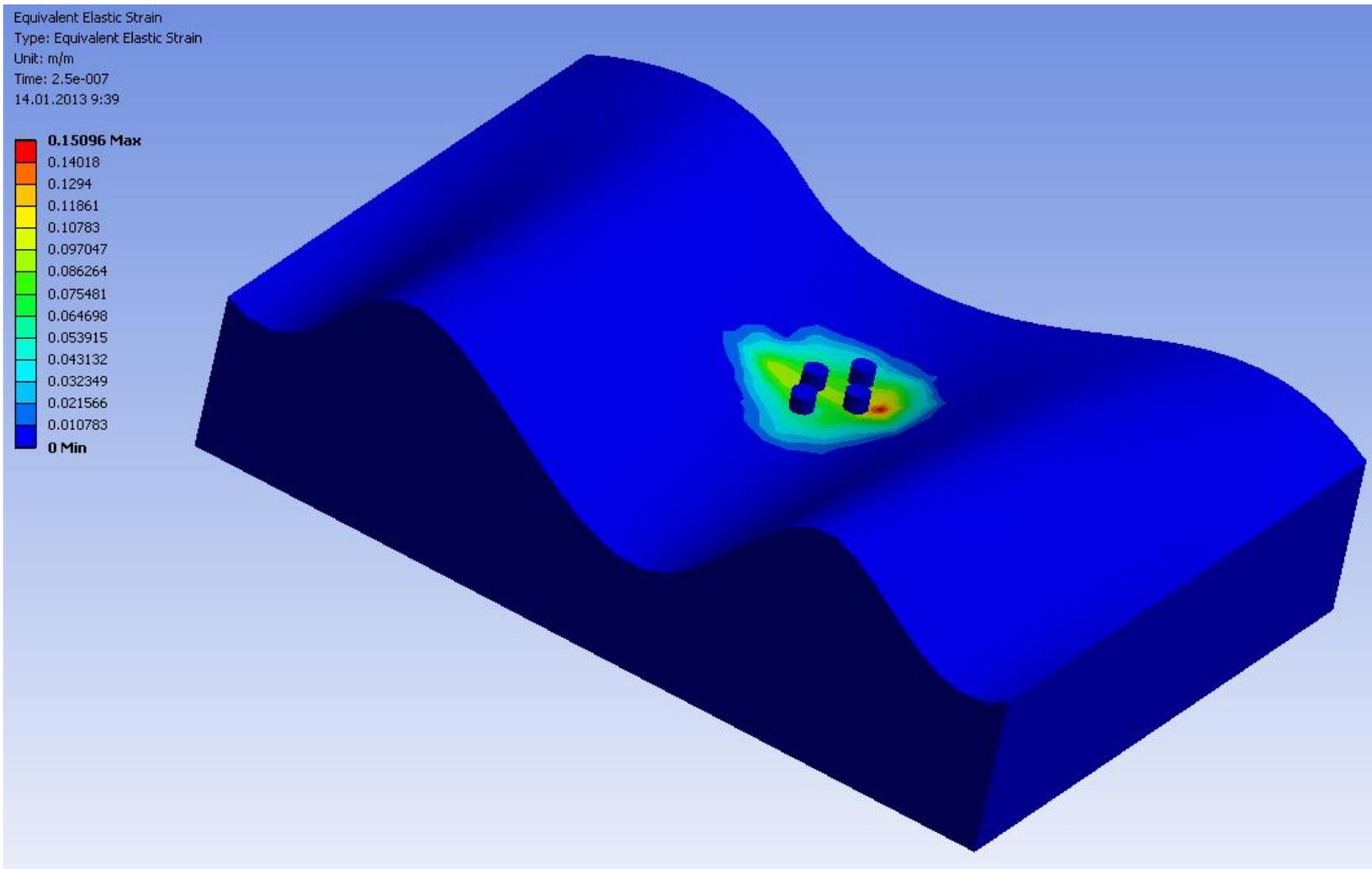
Симулирование процесса соударения



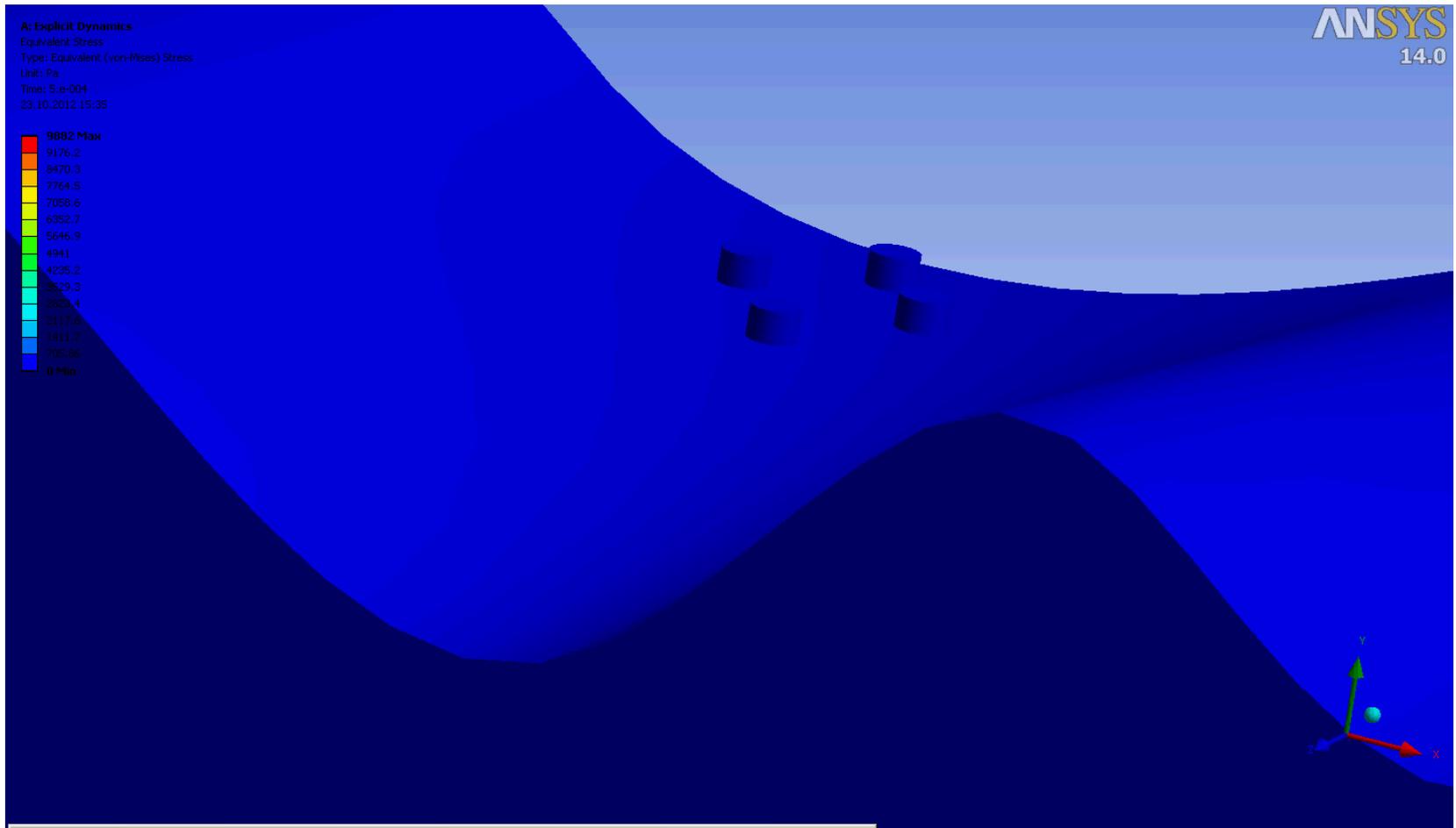
Equivalent Stress 3
Type: Equivalent (von-Mises) Stress
Unit: Pa
Time: 1.e-006
14.01.2013 9:36



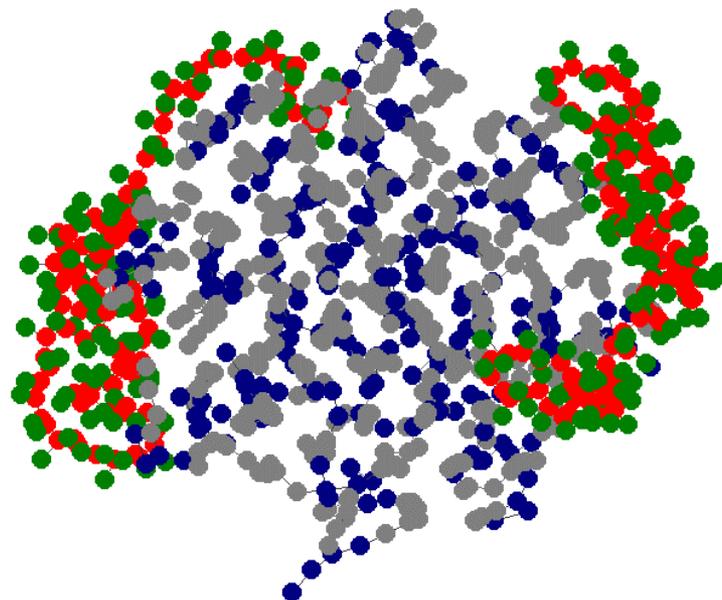
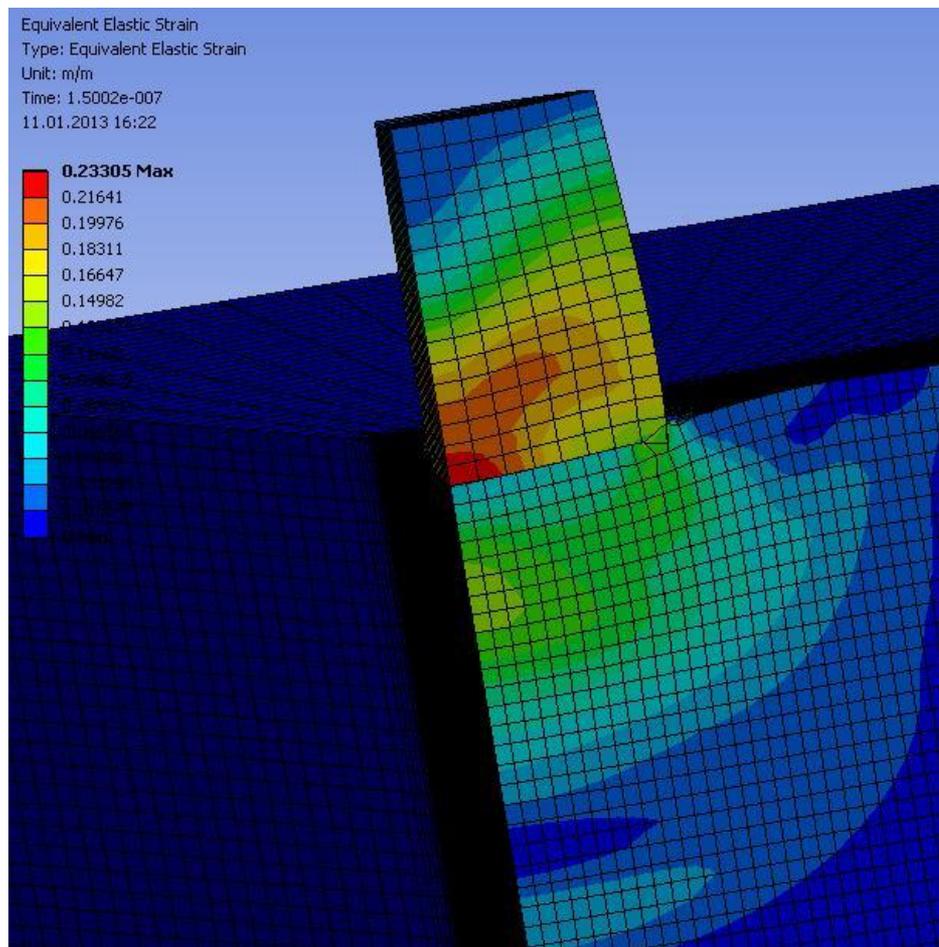
Взаимодействие группы липопротеинов с клетками эндотелия



Симулирование удара



Взаимодействие ЛВП с поверхностью эндотелия: МКЭ+МД



Параметры для синей части (головы фосфолипидов):
коэфф. Пуассона 0.5

Модуль Юнга $105\,730.183\text{ Н/м}^2$,

Для хвостов (серый слой - хвосты фосфолипидов) -
коэфф. Пуассона 0.5

Модуль Юнга $73\,651.844\text{ Н/м}^2$

Для боковых слоев (красно-зеленые - протеины) -
коэфф. Пуассона 0.5

Модуль Юнга $98\,281.752\text{ Н/м}^2$