

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ РАЗРУШЕНИЯ И СВОЙСТВ ДЕФОРМИРОВАННЫХ НАНОСТРУКТУР С ПОМОЩЬЮ АНАЛИЗА ПОЛЯ ЛОКАЛЬНЫХ НАПРЯЖЕНИЙ АТОМНОЙ СЕТКИ

О.Е. Глухова*,

И.В. Кириллова**, Р.Ю. Жничков***,

А.С. Колесникова**, М.М. Слепченков*

*Физический факультет,

**Образовательно-научный институт наноструктур и биосистем

***Поволжский региональный центр новых информационных технологий

Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского,

e-mail: glukhovaoe@info.sgu.ru

Общая схема изучения наноструктур **квантово-механическим методом сильной связи** заключается в следующем: вычисляется полная энергия объекта исходной геометрической конфигурации, для чего формируется гамильтониан и решается алгебраическая проблема собственных значений матрицы, и рассчитывается отталкивательный потенциал взаимодействия ядер и электронов; производится оптимизация атомной структуры.

Равновесные интегралы перекрытия (недиагональные элементы гамильтониана) определяются выражением

$$t_{\alpha,\beta}(r) = t_{\alpha,\beta}(r_0) \left(\frac{r_0}{r} \right)^{n_a} \exp \left[-n_b \left(\frac{r}{r_t} \right)^{n_c} + n_b \left(\frac{r_0}{r_t} \right)^{n_c} \right], \quad (1)$$

а отталкивательный потенциал выражением

$$E_{core}(r) = E_{core}(r_0) \left(\frac{r_0}{r} \right)^{m_a} \exp \left[-m_b \left(\frac{r}{r_c} \right)^{m_c} + m_b \left(\frac{r_0}{r_c} \right)^{m_c} \right]. \quad (2)$$

Здесь r_t и r_c – радиусы отсечки для интегралов перекрытия и отталкивательного взаимодействия, а параметры n_a , n_b, n_c и m_a, m_b, m_c задают форму и крутизну масштабирующих функций (1) и (2), индексы α и β задают тип взаимодействующих электронных облаков, r_0 – равновесное межъядерное расстояние (характерное для данного типа взаимодействующих атомов), r – межъядерное расстояние.

Полной энергией структуры является сумма энергии занятых энергетических уровней E_{bond} и энергией отталкивательного взаимодействия E_{rep} :

$$E_{tot} = E_{rep} + E_{bond}, \quad (3)$$

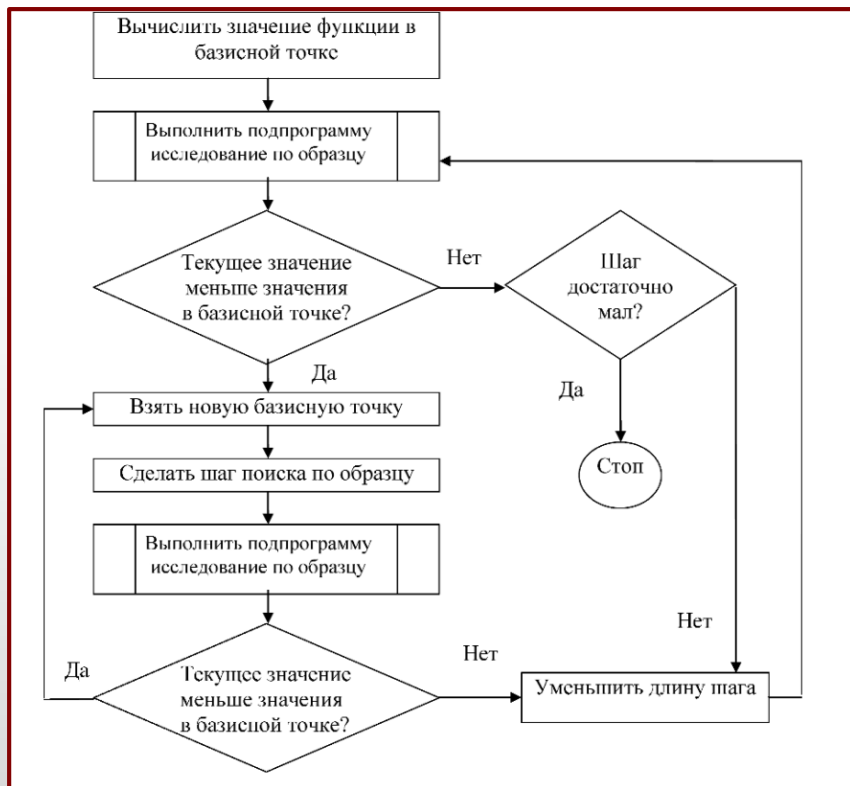
$$E_{bond} = \sum_{i=1}^{N_{level}} \left(n_i \cdot E_i + U \cdot \delta_{n_i,2} \right), \quad (4)$$

где E_i – энергия заполненного состояния с номером i , число n_i определяет занятость данного уровня (для незанятых оно равно нулю, при полной занятости – двум), N_{level} – число энергетических уровней, терм U определяет обменно-корреляционное взаимодействие между двумя электронами, находящимися на одной и той же орбитали ($U=3$ эВ [4]), $\delta_{n_i,2}$ принимает ненулевое значение, только если $n_i=2$.

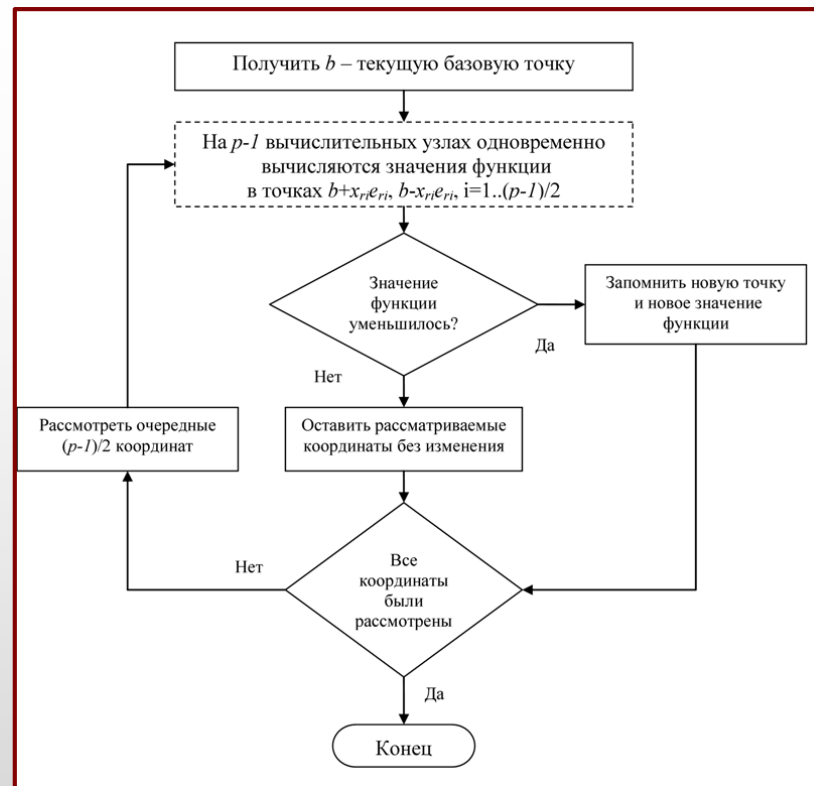
Энергия отталкивательного взаимодействия рассчитывается с помощью формулы (2), определяющей ион-ионное взаимодействие атомов i и j :

$$E_{rep} = \sum_{i<j} E_{core}(r_{ij}).$$

1. Оптимизация исходной атомной структуры (квантово-химический метод сильной связи)

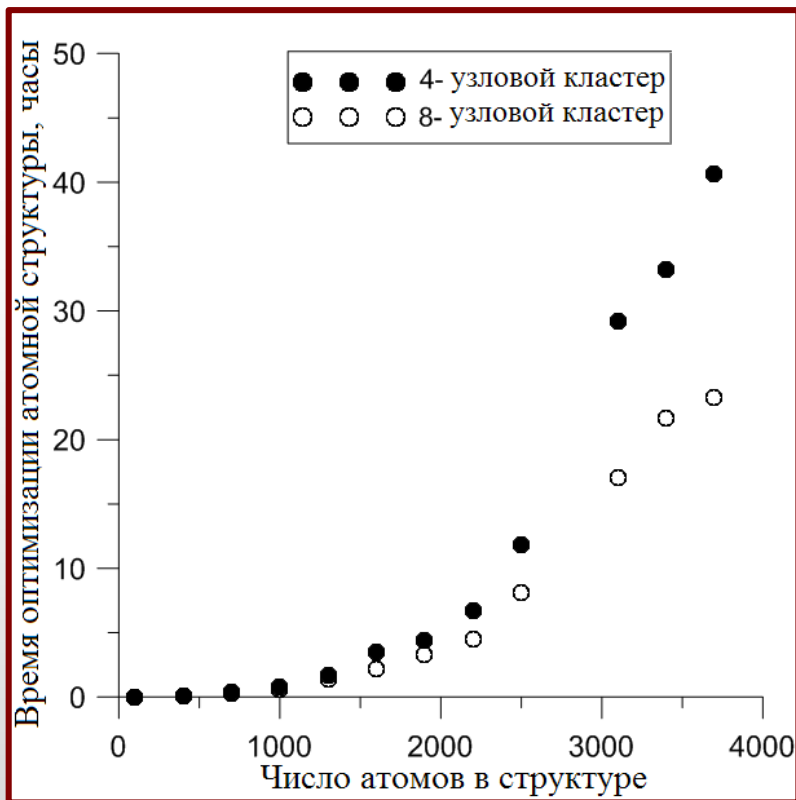


Блок-схема модифицированного метода Хука-Дживса

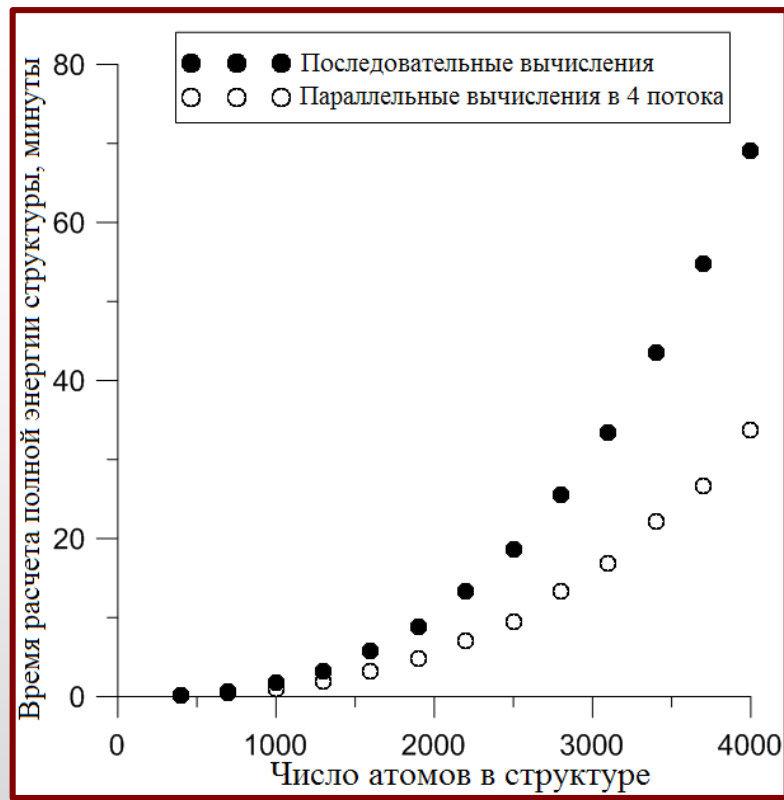


Блок-схема подпрограммы исследования по образцу

1. Оптимизация исходной атомной структуры (оптимизированный метод Хука-Дживса)



Производительность при оптимизации структуры с переходом с четырехузлового кластера на восьмиузловой возрастает в 1.4 раза



Производительность вычислений возрастает в среднем в 1.8 раза при выполнении расчетов параллельным способом в 4 потока по сравнению с последовательным методом

Производительность параллельных вычислений

- 1. Оптимизация исходной атомной структуры.
- 2. Вычисление распределения объемной плотности энергии по атомам.
- 3. Поиск атомной конфигурации, подвергнутой внешнему воздействию, в результате минимизации энергии по координатам.
- 4. Вычисление распределения объемной плотности энергии по атомам структуры, подвергнутой внешнему воздействию.
- 5. Расчет поля локальных напряжений атомного каркаса по разности значений объемных плотностей энергии атомов структуры, подвергнутой внешнему воздействию, и исходной структуры.

**Методика расчета поля локальных напряжений
заключается в последовательном выполнении
нескольких вычислительных этапов**

$$w_i = \left(\sum_{j(\neq i)} (V_R(r_{ij}) - B_{ij} V_A(r_{ij})) + \sum_{j \neq i} \left(\sum_{k \neq i, j} \left(\sum_{l \neq i, j, k} V_{tors}(\omega_{ijkl}) \right) \right) + \sum_{j(\neq i)} V_{vdw}(r_{ij}) \right) / V_i, \quad (5)$$

где $V_R(r_{ij})$ и $V_A(r_{ij})$ – парные потенциалы отталкивания и притяжения химически связанных атомов, определяемые типом атомов и расстоянием между ними; r_{ij} – расстояние между атомами i и j ; i и j – номера взаимодействующих атомов; B_{ij} – многочастичный терм, корректирующий энергию взаимодействия пары атомов $i - j$, учитывая специфику взаимодействия σ - и π - электронных облаков; $V_{tors}(\omega_{ijkl})$ – потенциал торсионного взаимодействия, являющийся функцией линейного двугранного угла ω_{ijkl} , построенного на базе атомов i, j, k, l с ребром на связи $i - j$ (k, l – атомы, образующие химические связи с атомами i, j); $V_{vdw}(r_{ij})$ – потенциал взаимодействия Ван-дер-Ваальса между химически несвязанными атомами; $V_i = \frac{4}{3} \pi r_0^3$ – объем, занимаемый атомом i ; r_0 – Ван-дер-ваальсовый радиус атома углерода, равный 1.7 Å.

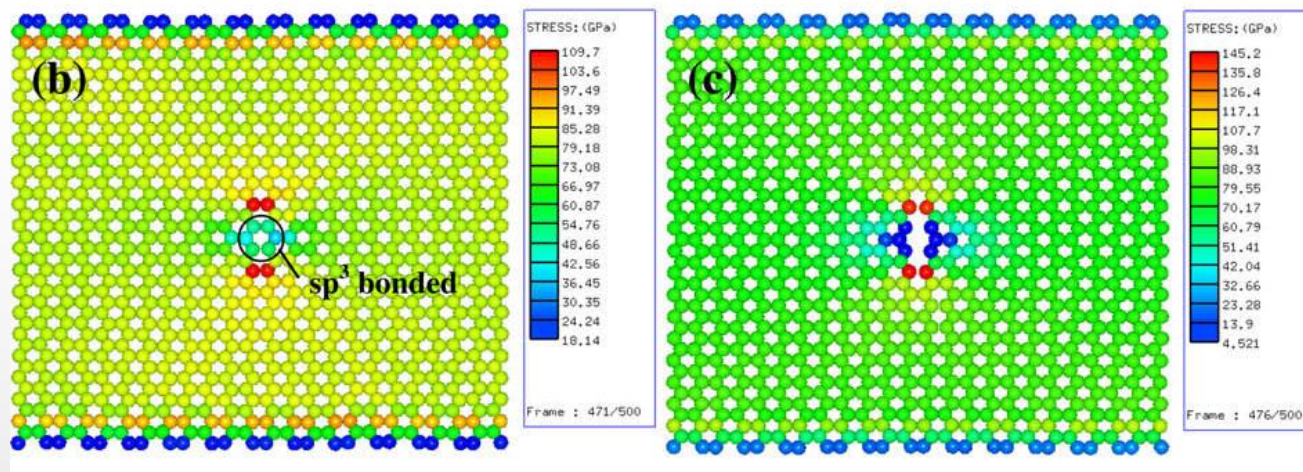
Напряжение атомного каркаса вблизи атома с номером i рассчитывалось по формуле:

$$\sigma_i = |w_i - w_i^0|, \quad (6)$$

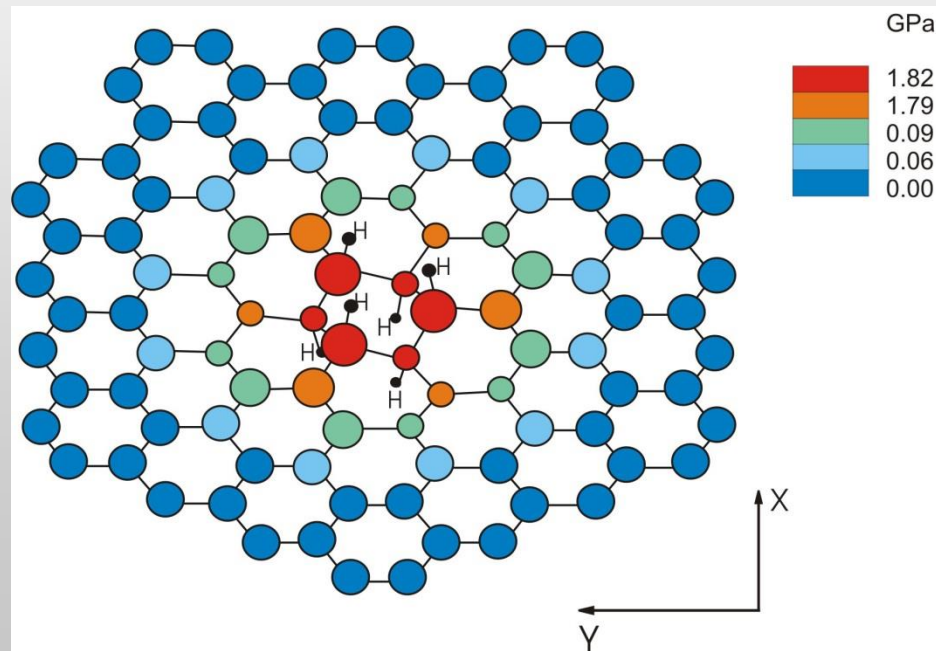
где w_i^0 – объемная плотность энергии атома графена, находящегося в равновесном состоянии; w_i – объемная плотность энергии атома графена, подвергнутого внешнему воздействию (деформации, появление дефектов и т.п.).

2. Вычисление распределения объемной плотности энергии по атомам и напряжения атомного каркаса вблизи атома

Q.X. Pei Y.W. Zhang,
V.B. Shenoy,
CARBON 48
(2010) 898–904



**Апробация метода
(прогнозирование
разрушение графена
с дефектом гидрирования)**



Длина увеличивается (или уменьшается) и фиксируется. По необходимым линейным параметрам оптимизируется геометрическая структура остова и вычисляется энергия вытянутой (или сжатой) структуры. Рассчитывается модуль Юнга:

$$Y = \frac{F}{S} \cdot \frac{L}{\Delta L}, \quad (7)$$

где ΔL – удлинение; F – сила, необходимая для растяжения (или сжатия), определяемая формулой

$$F = \frac{2 \cdot \Delta E}{\Delta L} \quad (8)$$

(ΔE – энергия упругого растяжения (сжатия)); S – площадь поперечного сечения.

Псевдомодуль Юнга:

$$Y_p = \frac{F}{P} \cdot \frac{L}{\Delta L}, \quad (9)$$

где P – периметр края.

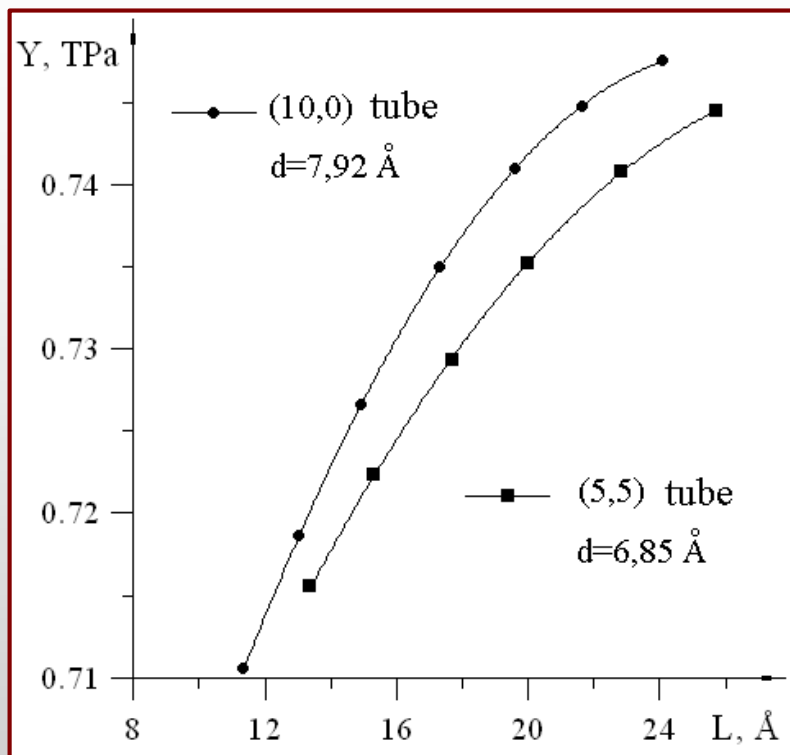
На основе имеющихся данных о растяжении (сжатии) вычисляется коэффициент Пуассона

$$\mu = -\frac{\Delta R}{R} \cdot \frac{L}{\Delta L}, \quad (10)$$

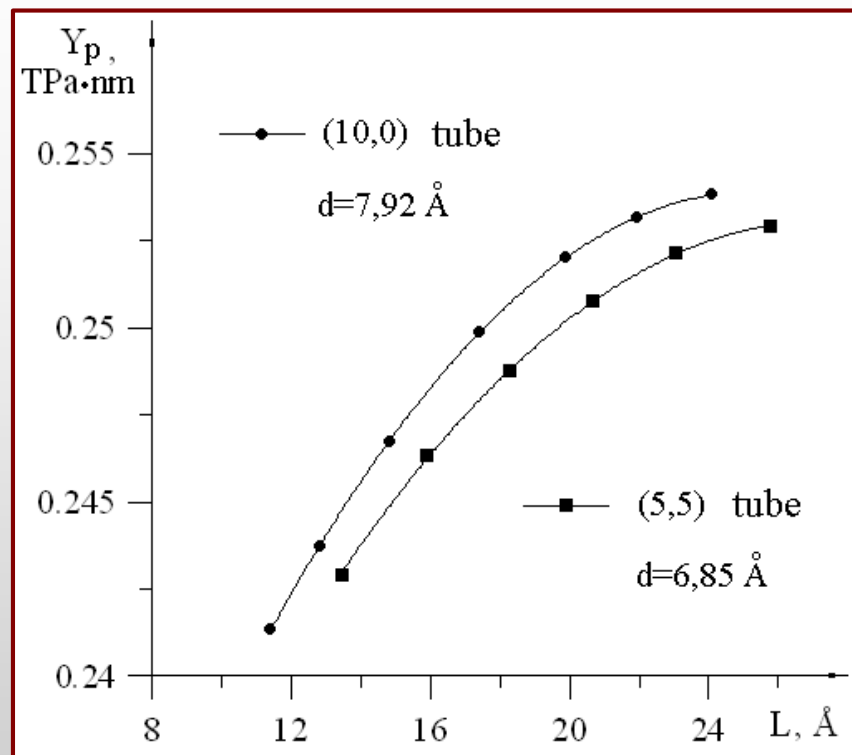
где R – радиус нанотрубки (ширина графеновой наноленты) в основном состоянии; ΔR – изменение радиуса (ширины наноленты) при деформации.

Расчет модуля Юнга и коэффициента Пуассона

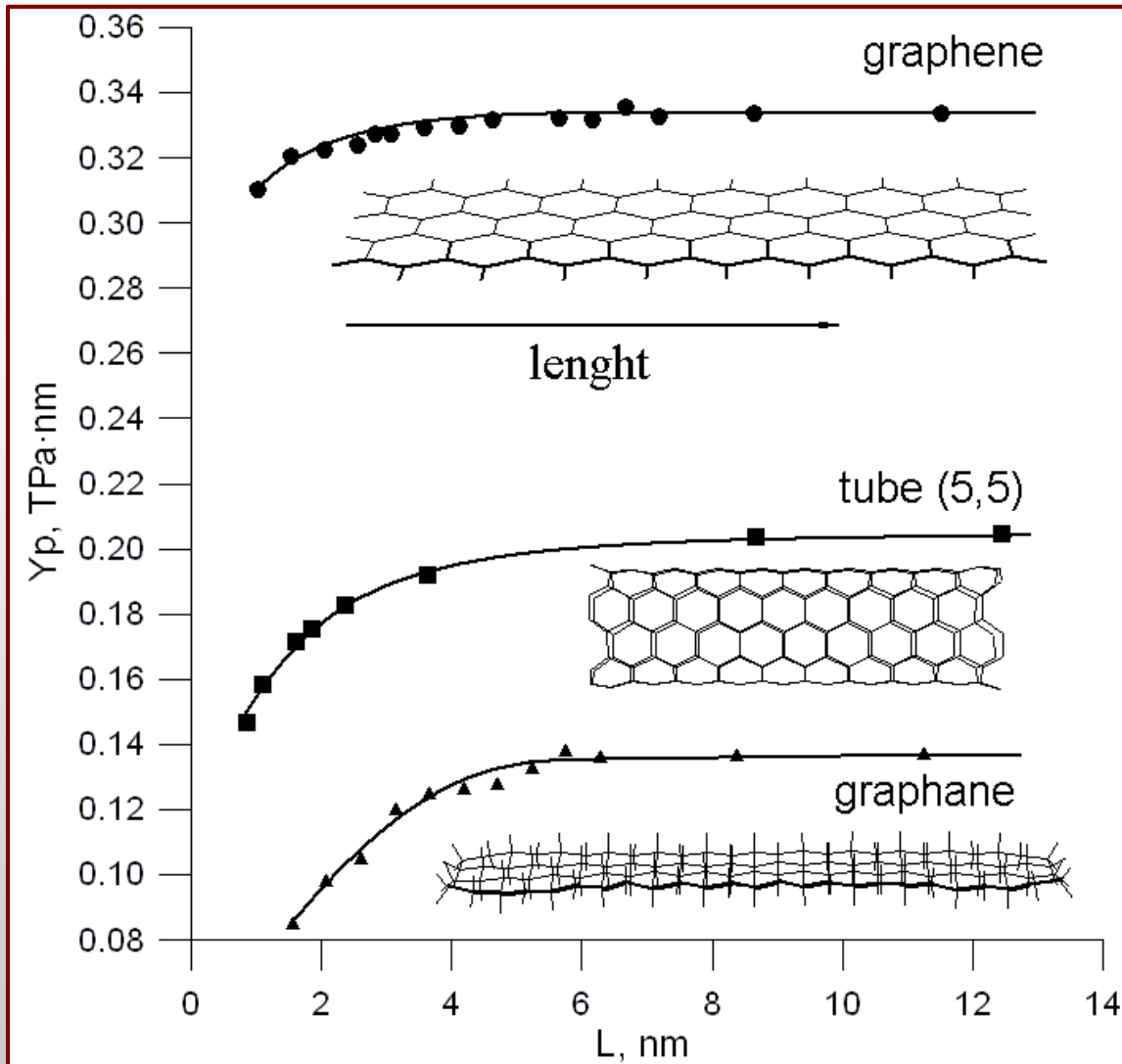
Модуль Юнга УНТ



Псевдомодуль Юнга УНТ



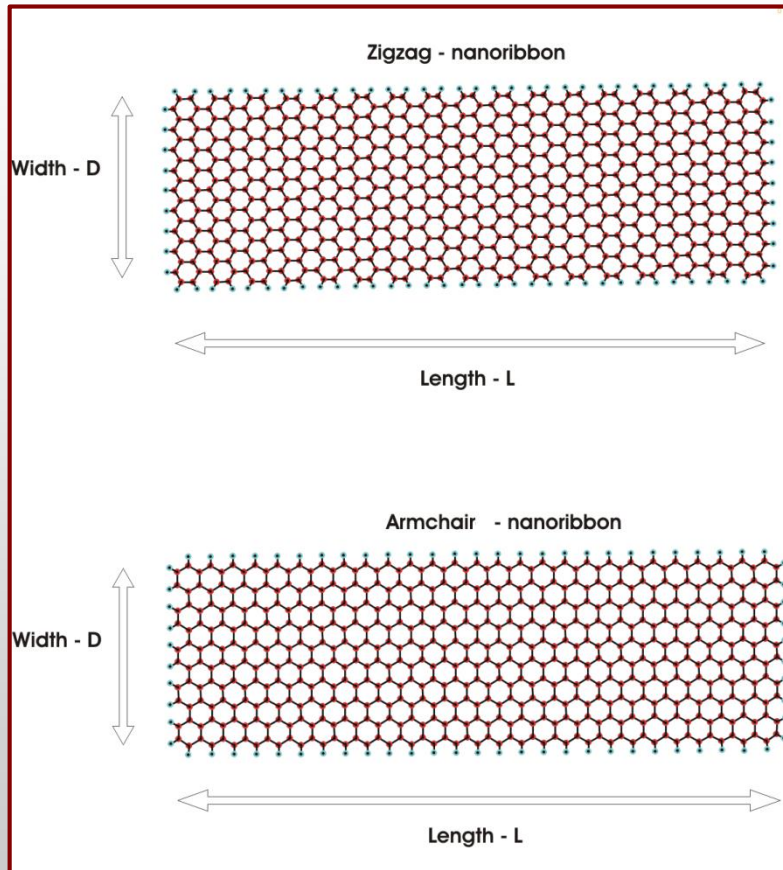
Исследование механических свойств



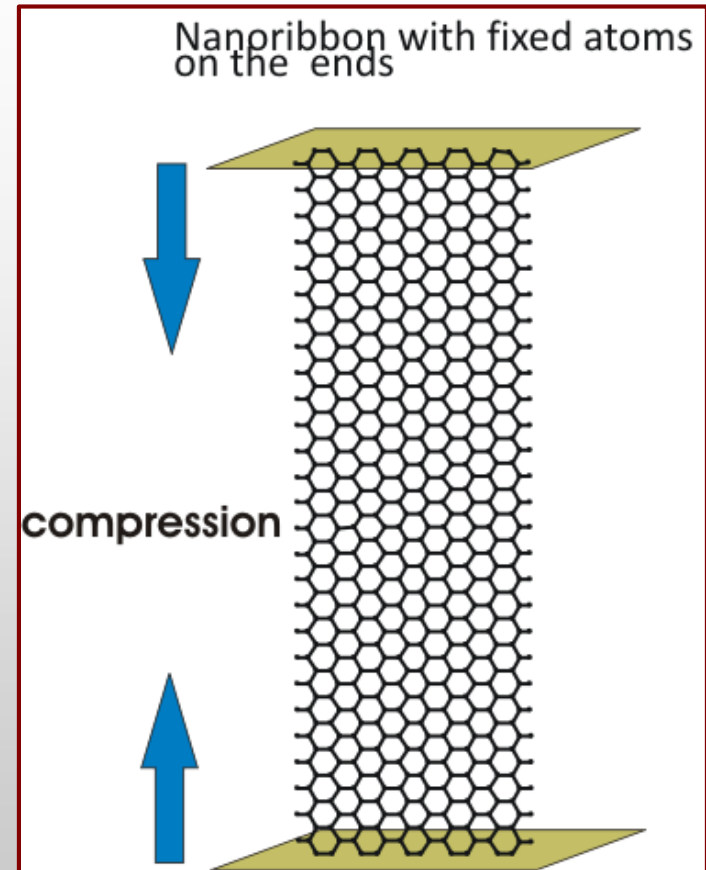
- Сравнение модулей Юнга углеродных нанотрубок и графеновых структур

Сжатие графеновых нанолент

Графеновые наноленты

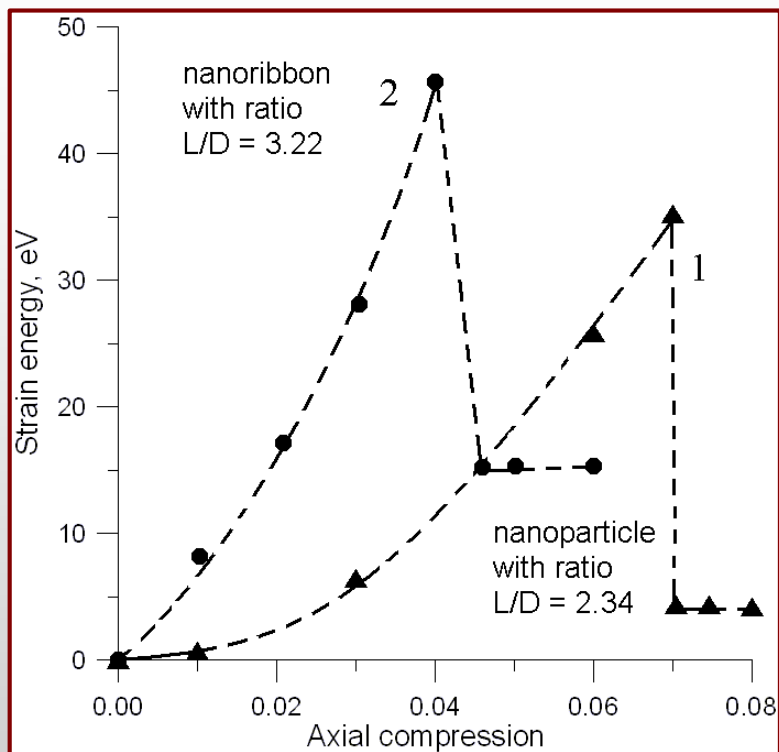


Моделирование процесса сжатия

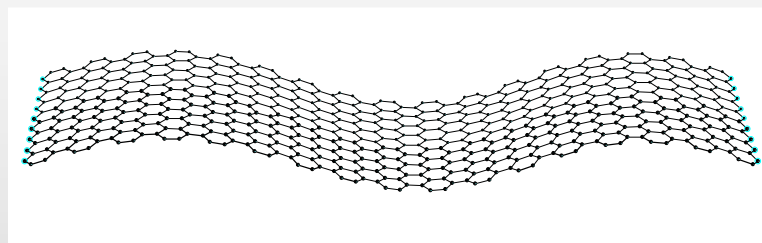


Сжатие графеновых нанолент

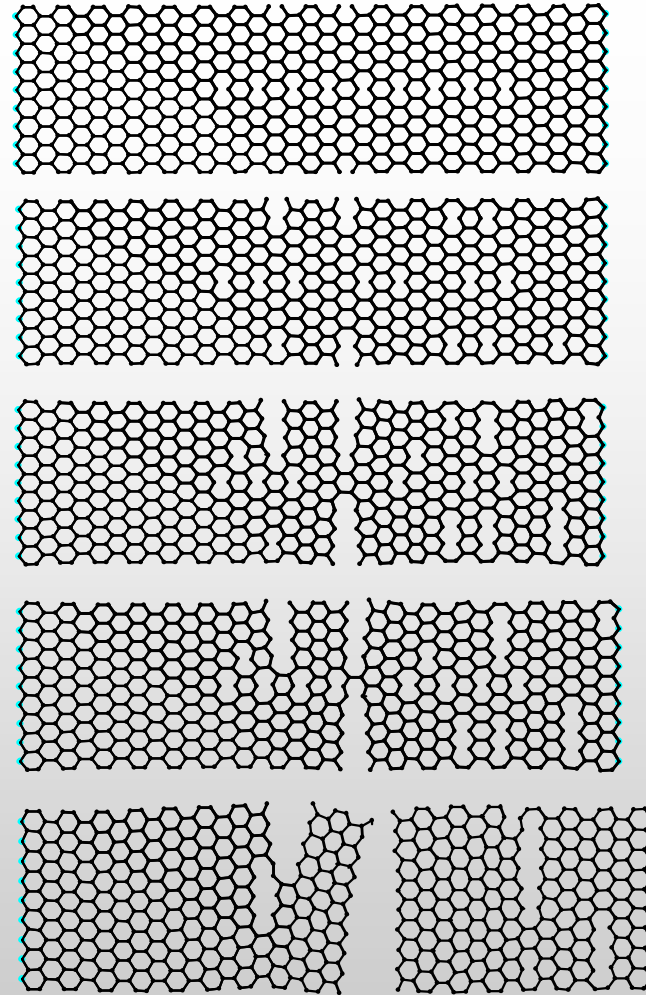
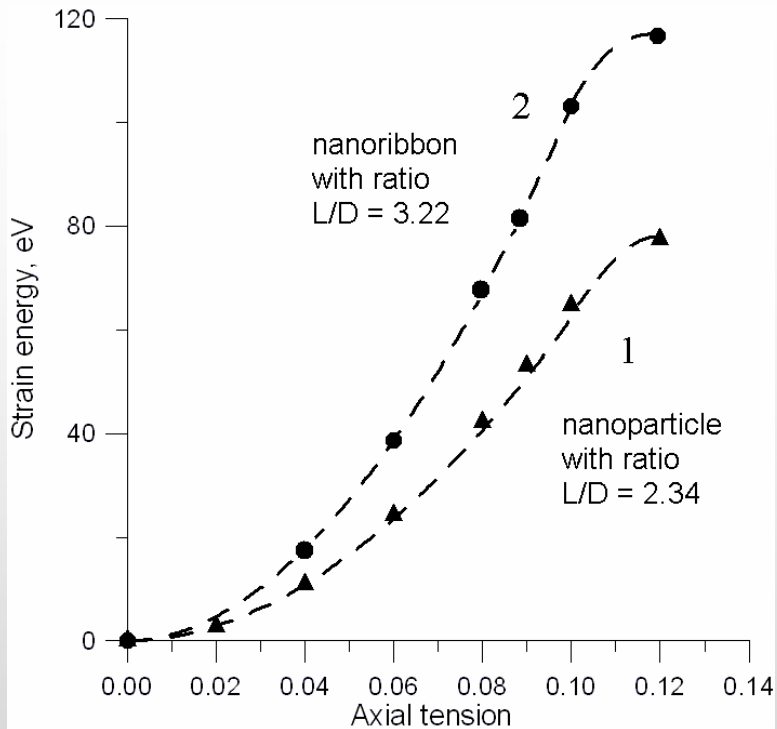
Наноленты и наночастицы



Сжатая нанолента:
96% исходной длины

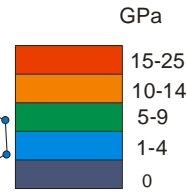
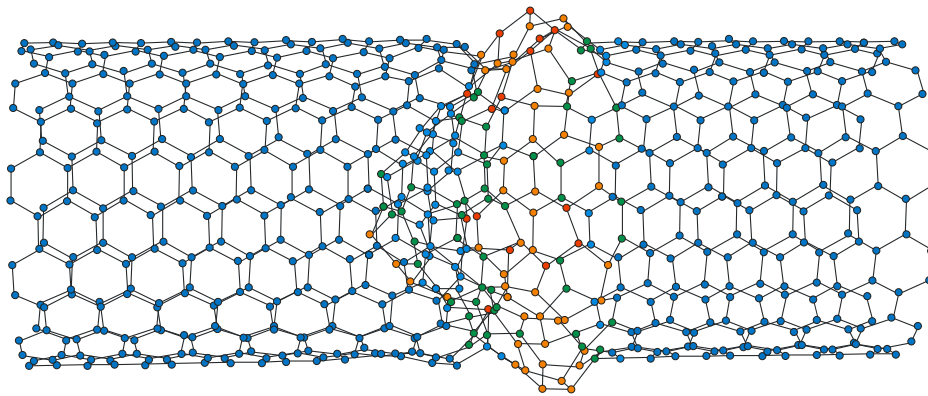


Сжатие графеновых нанолент

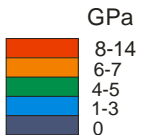
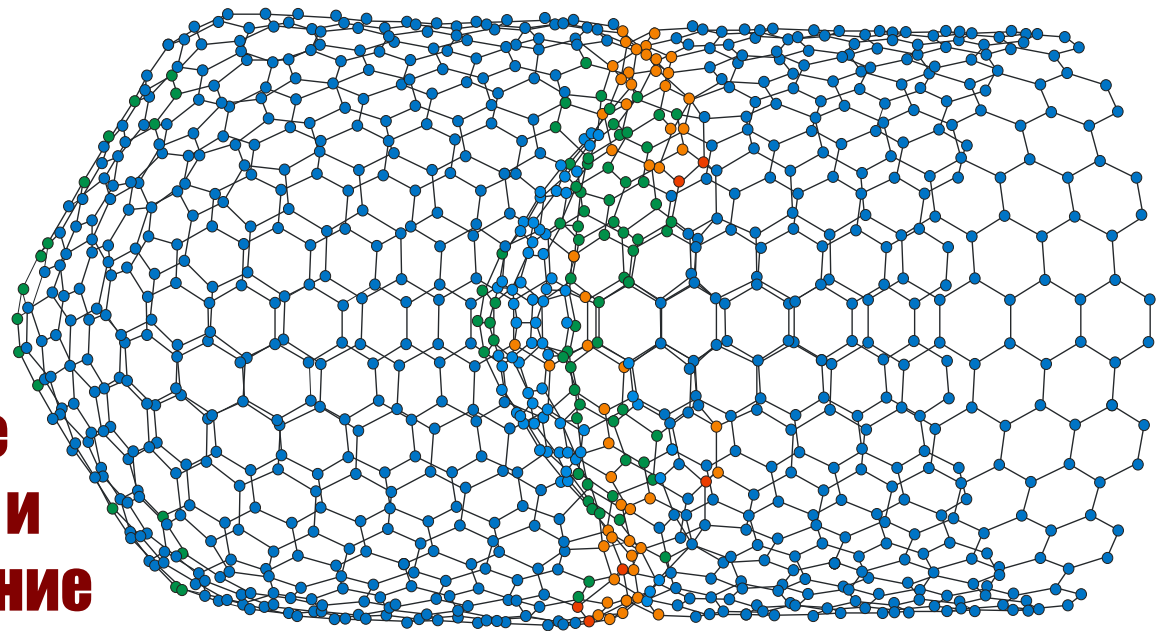


Растяжение графеновой ленты

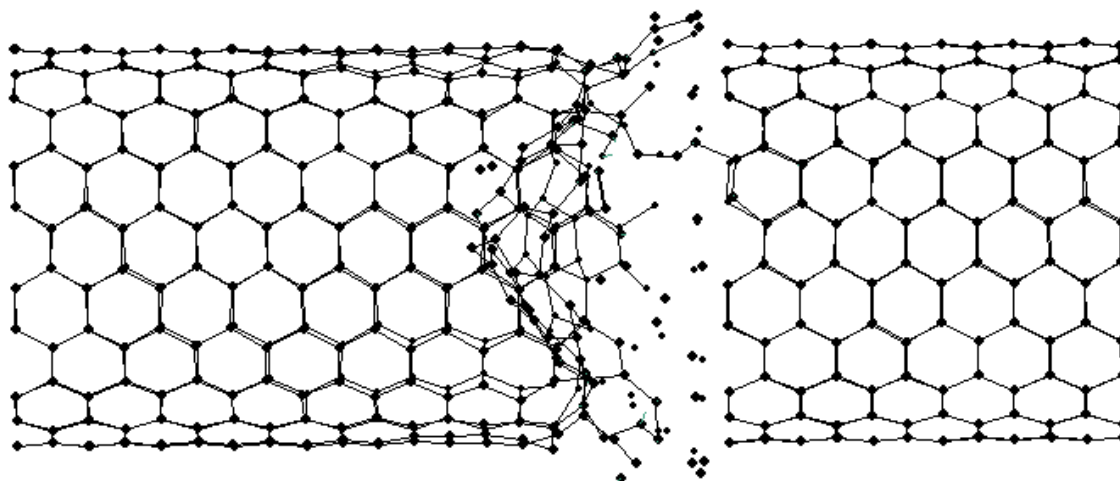
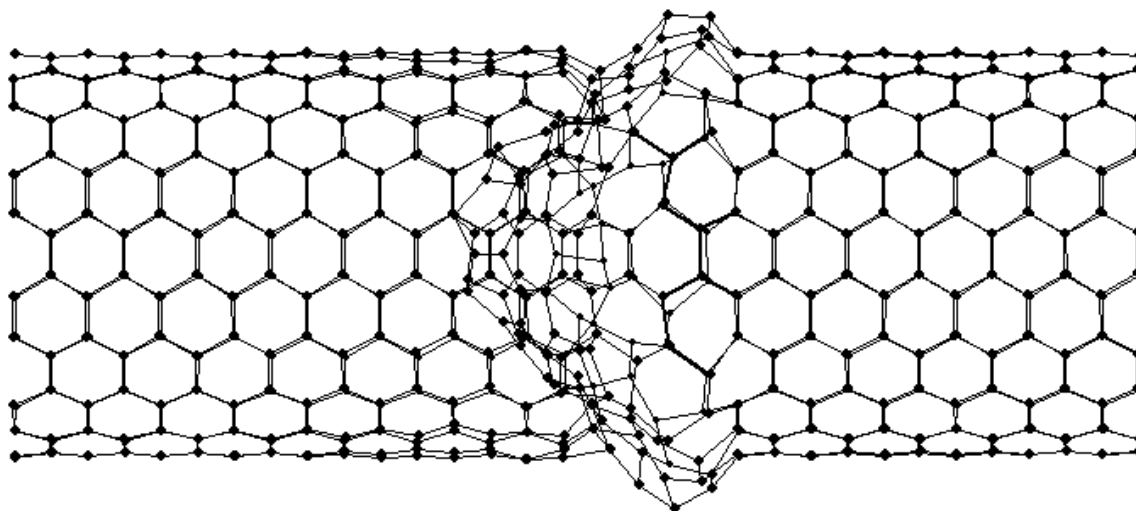
Исследование деформации и прогнозирование образования дефектов и разрушения графеновых нанолент



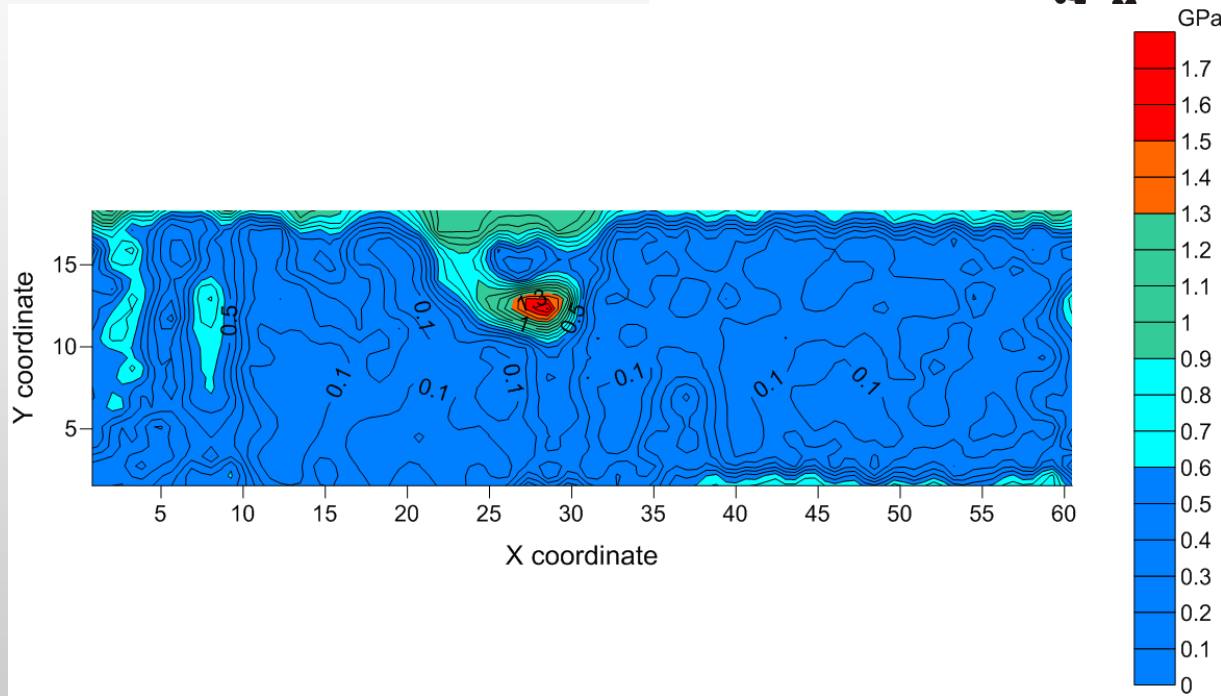
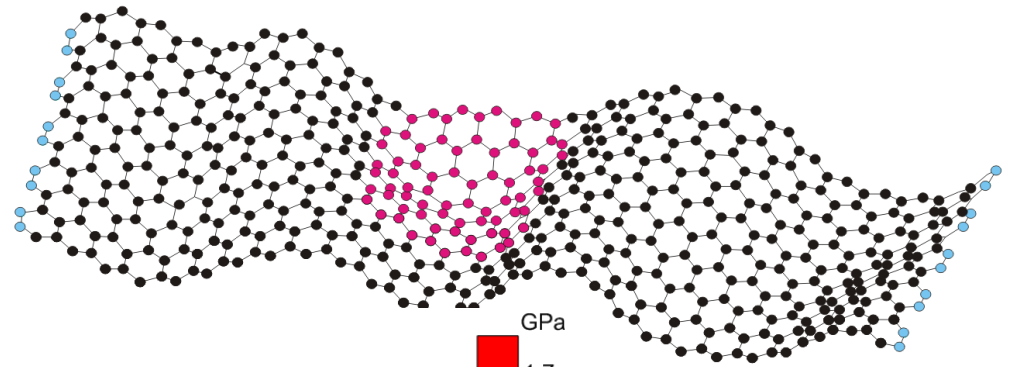
УНТ armchair (10,10)
и (30,30)



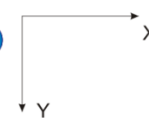
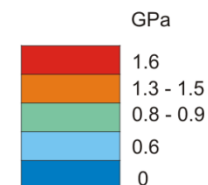
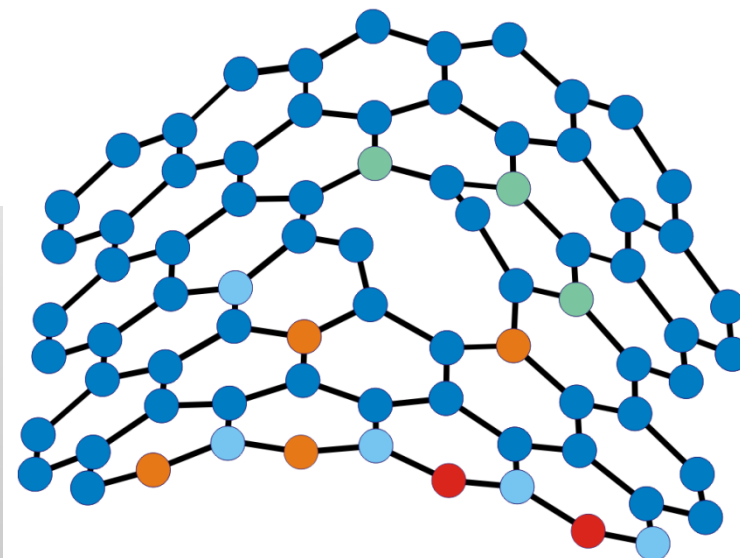
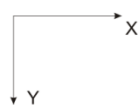
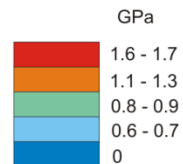
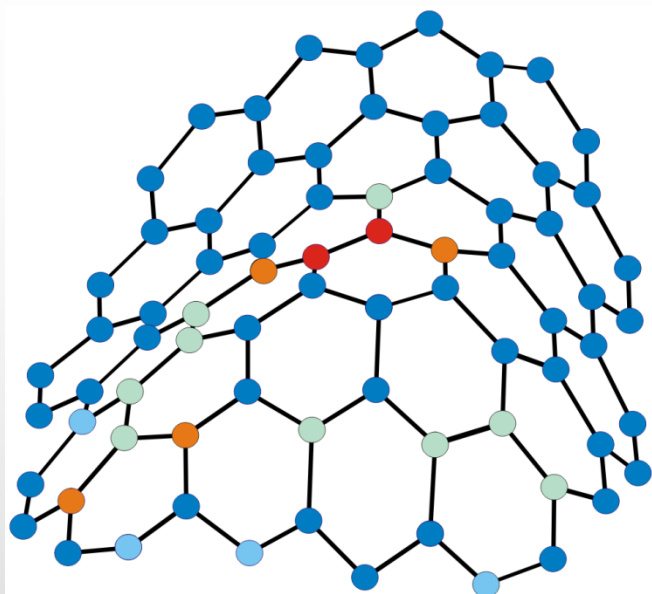
**Исследование
стабильности и
прогнозирование
разрушения УНТ сложных
структур**



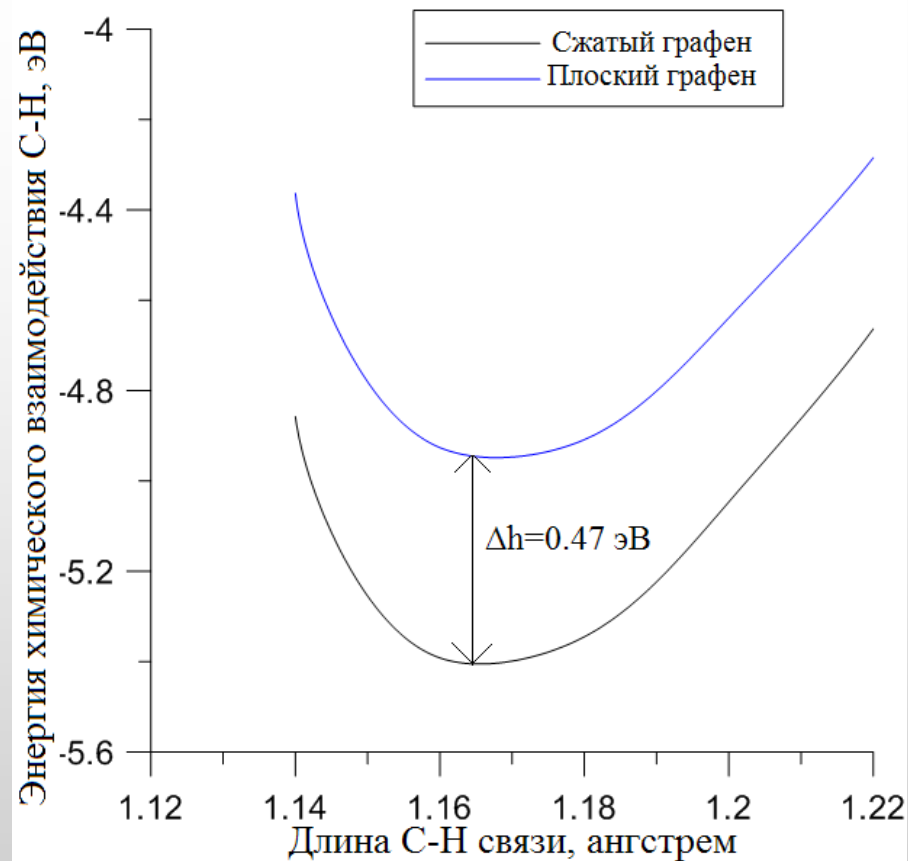
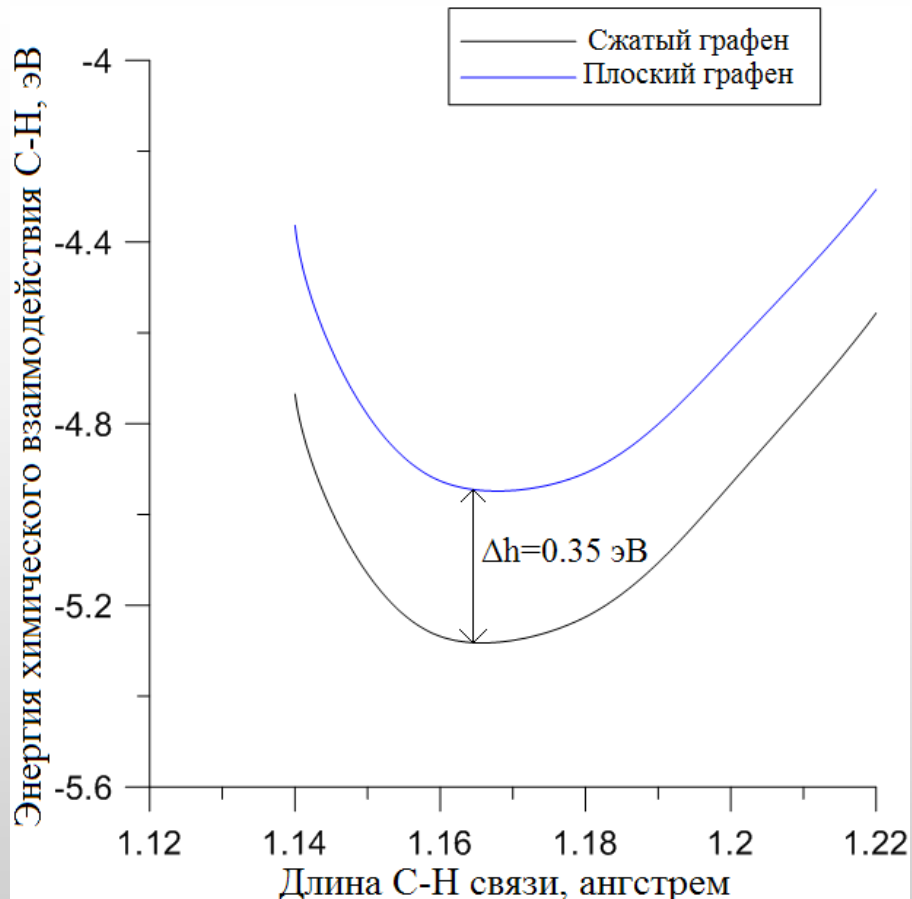
**Разрушение тонких УНТ с внутренними
перемычками**



**Прогнозирование возникновения дефектов
при деформации атомной сетки**



Возникновение дефекта



Исследование влияния кривизны атомной сетки на адсорбционные свойства



*Саратовский государственный
университет имени Н.Г. Чернышевского*

Спасибо за внимание!
