

# 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](mailto: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  $\alpha$  и  $\beta$  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  $E_{rep}$ :

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

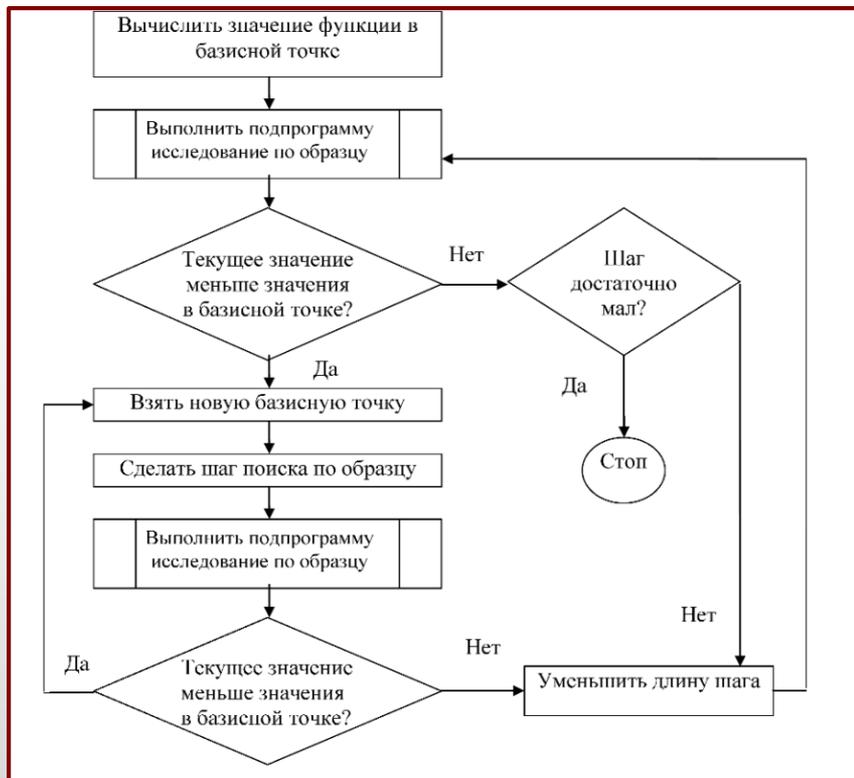
$$E_{bond} = \sum_{i=1}^{N_{level}} \left( n_i \cdot E_i + U \cdot \delta_{n_i,2} \right), \quad (4)$$

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  $n_i=2$ .

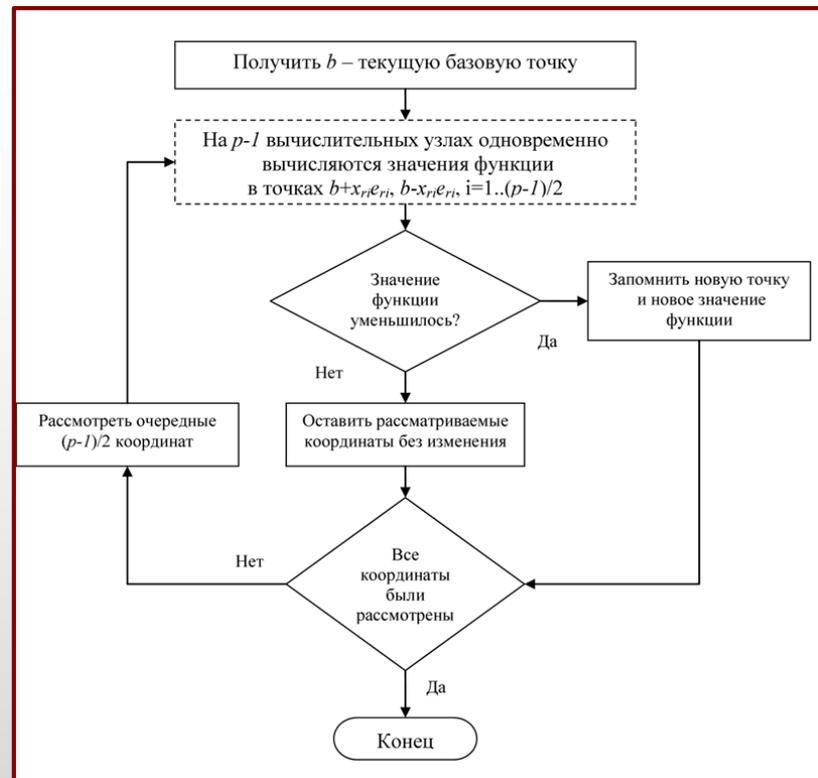
Энергия отталкивательного взаимодействия рассчитывается с помощью формулы (2), определяющей ион-ионное взаимодействие атомов  $i$  и  $j$ :

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

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

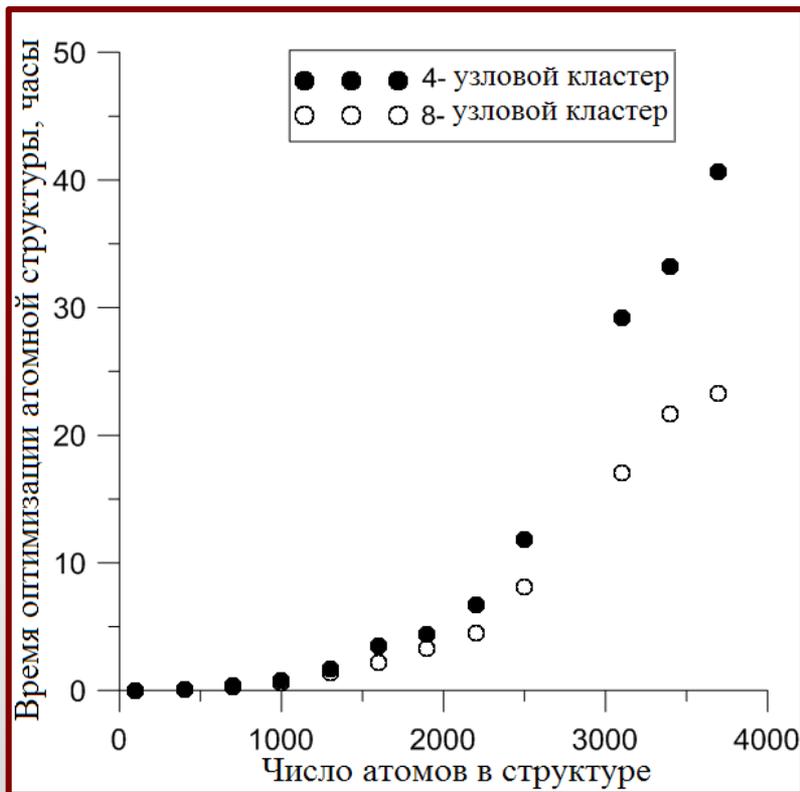


Блок-схема модифицированного метода Хука-Дживса

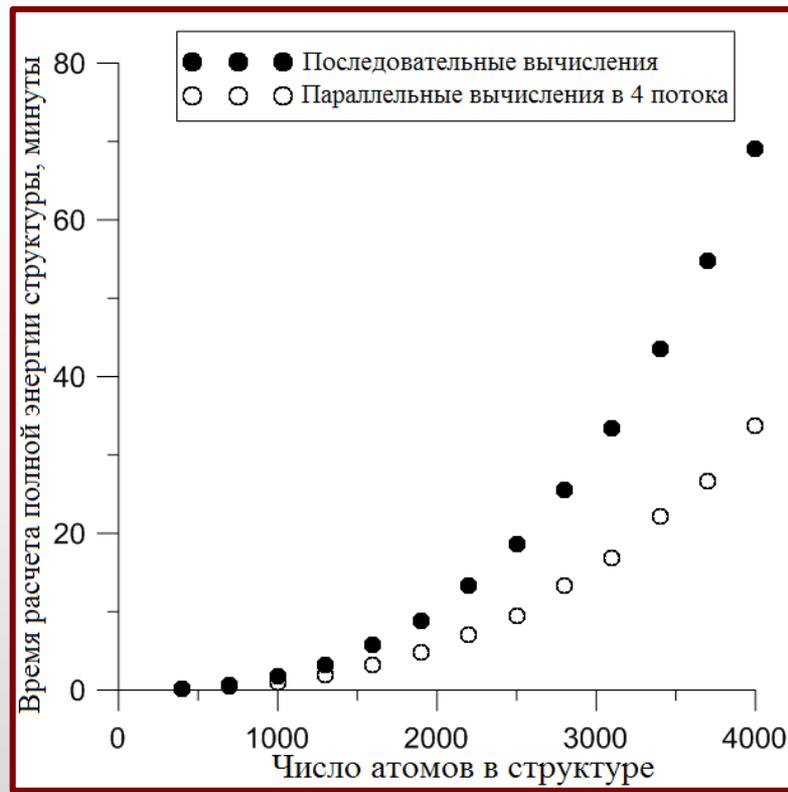


Блок-схема подпрограммы исследования по образцу

# 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  $\sigma$ - и  $\pi$ - электронных облаков;  $V_{tors}(\omega_{ijkl})$  – потенциал торсионного взаимодействия, являющийся функцией линейного двугранного угла  $\omega_{ijkl}$ , 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.

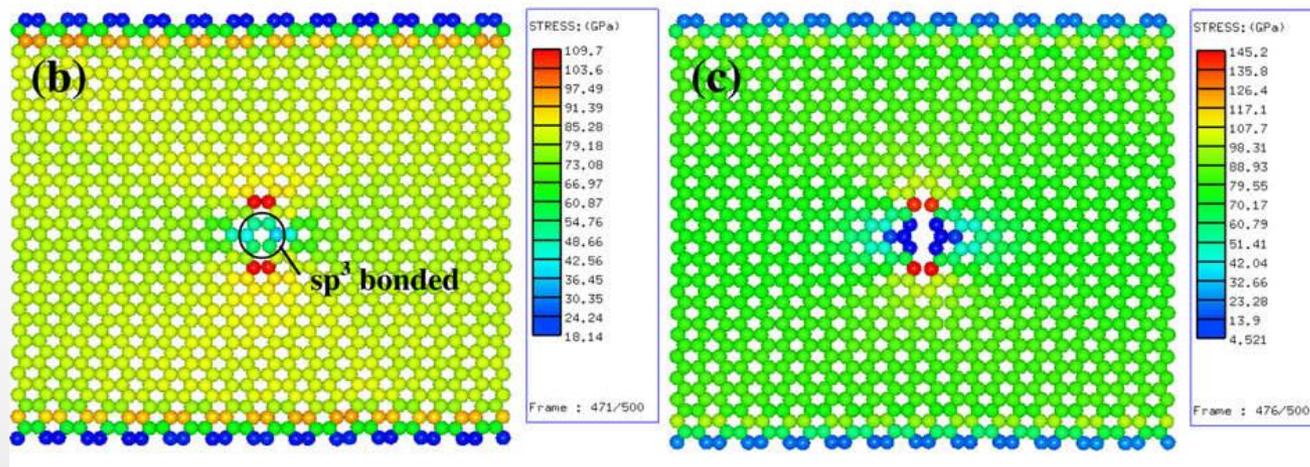
Напряжение атомного каркаса вблизи атома с номером  $i$  рассчитывалось по формуле:

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

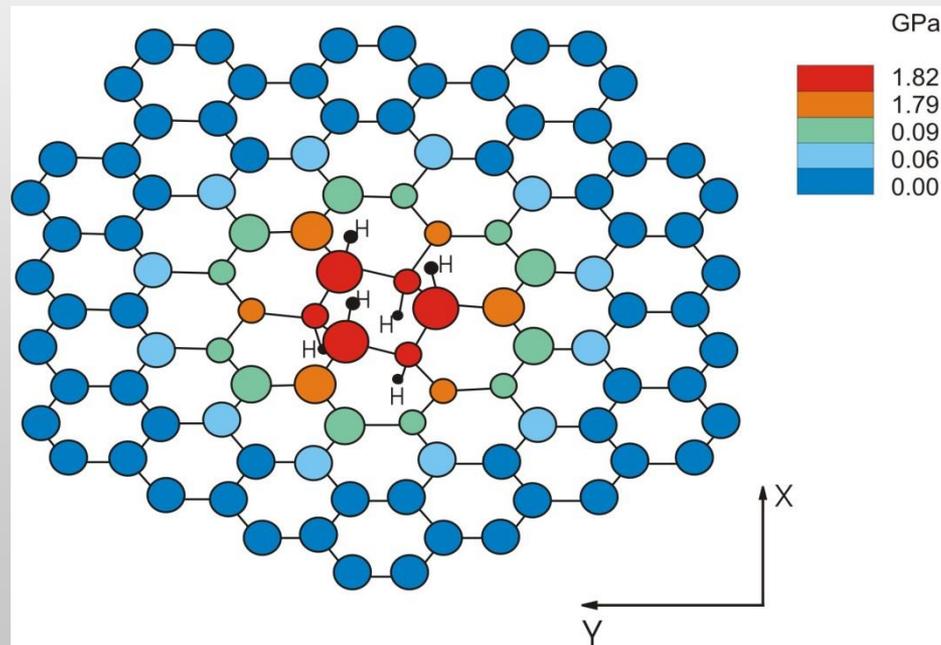
где  $w_i^0$  – объемная плотность энергии атома графена, находящегося в равновесном состоянии;  $w_i$  – объемная плотность энергии атома графена, подвергнутого внешнему воздействию (деформации, появление дефектов и т.п.).

## 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  $\Delta L$  – удлинение;  $F$  – сила, необходимая для растяжения (или сжатия), определяемая формулой

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

( $\Delta E$  – 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.

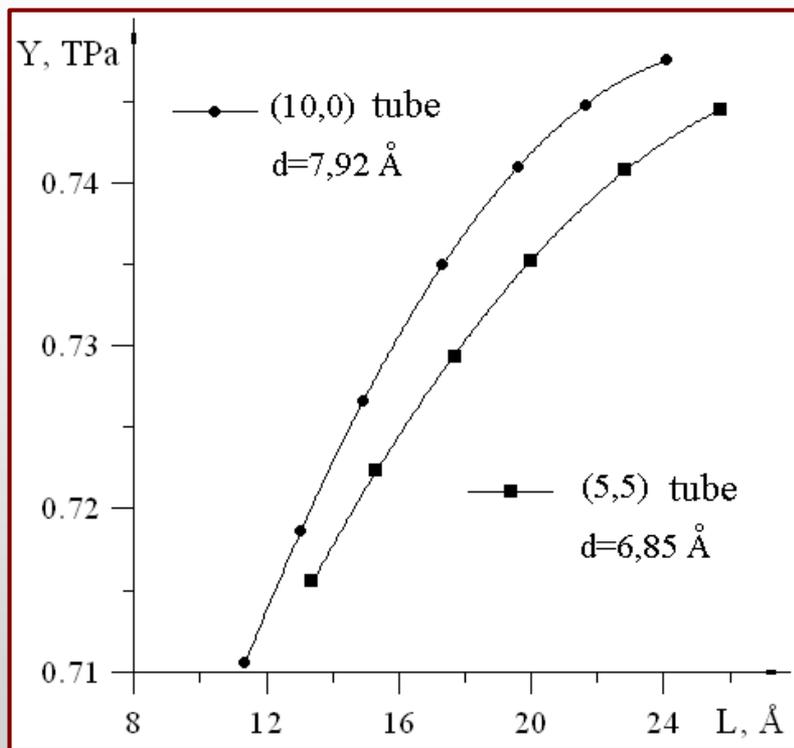
На основе имеющихся данных о растяжении (сжатии) вычисляется коэффициент Пуассона

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

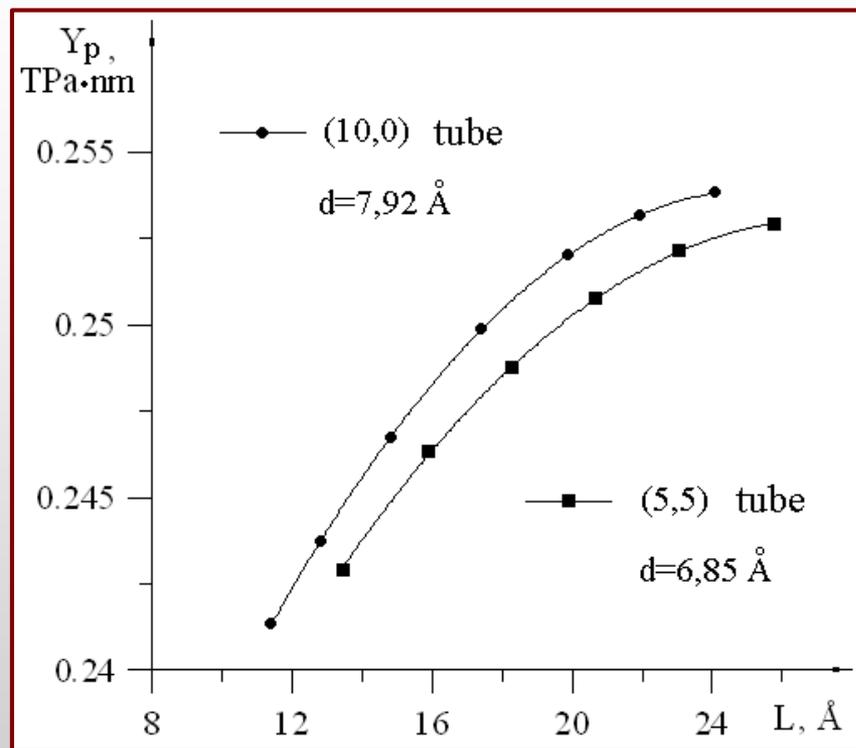
где  $R$  – радиус нанотрубки (ширина графеновой наноленты) в основном состоянии;  $\Delta R$  – изменение радиуса (ширины наноленты) при деформации.

## Расчет модуля Юнга и коэффициента Пуассона

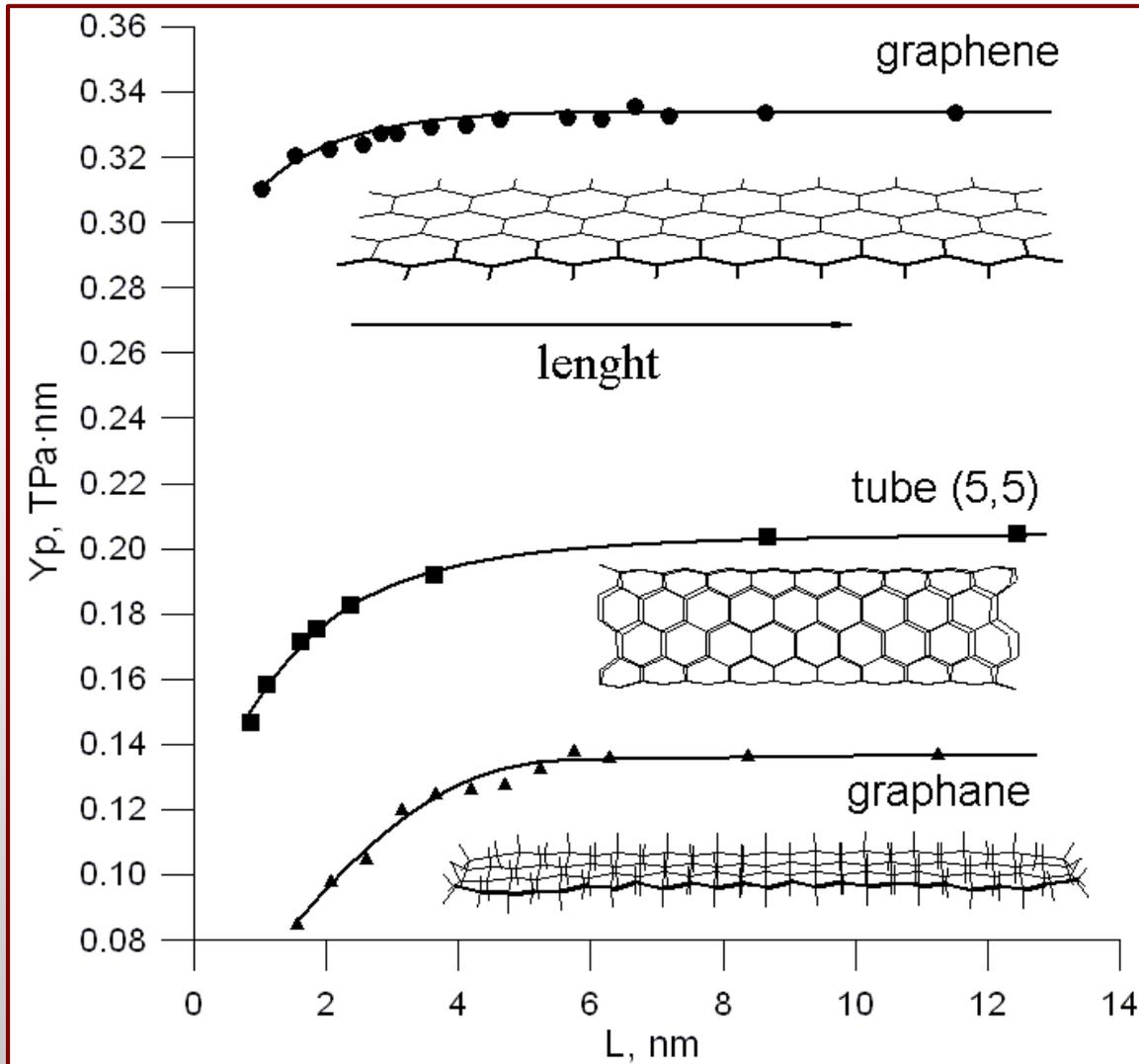
## Модуль Юнга УНТ



## Псевдомодуль Юнга УНТ



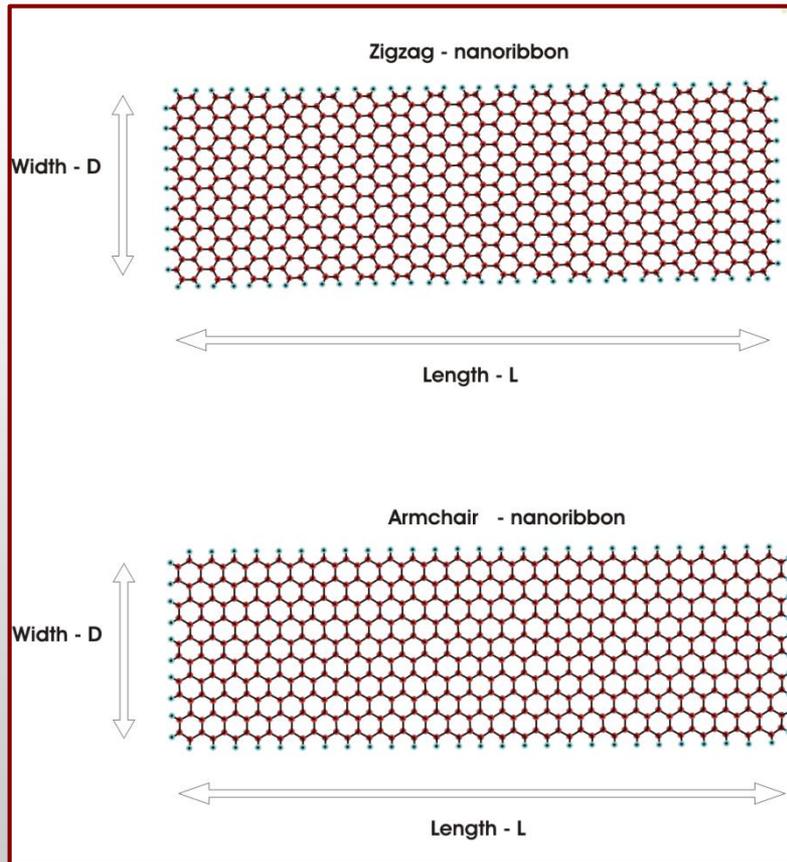
## Исследование механических свойств



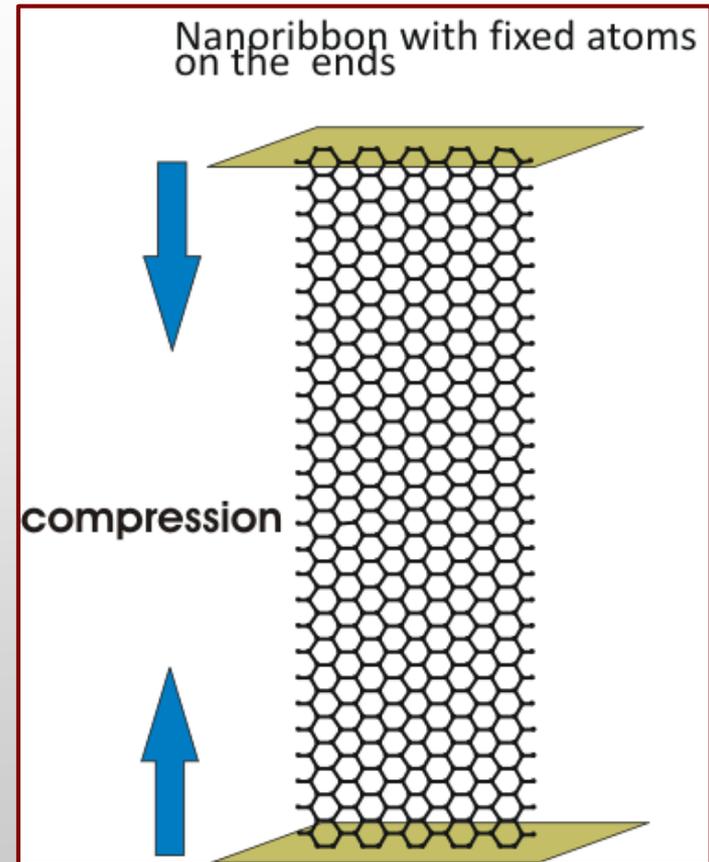
- Сравнение модулей Юнга углеродных нанотрубок и графеновых структур

**Сжатие графеновых нанолент**

## Графеновые наноленты

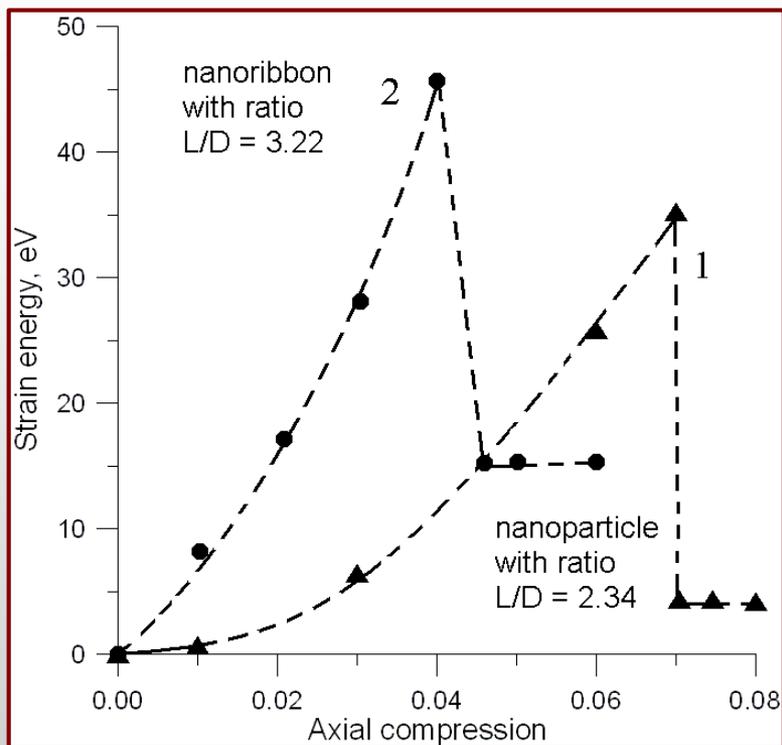


## Моделирование процесса сжатия

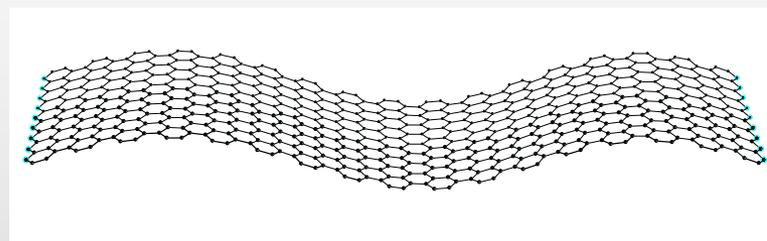


# Сжатие графеновых нанолент

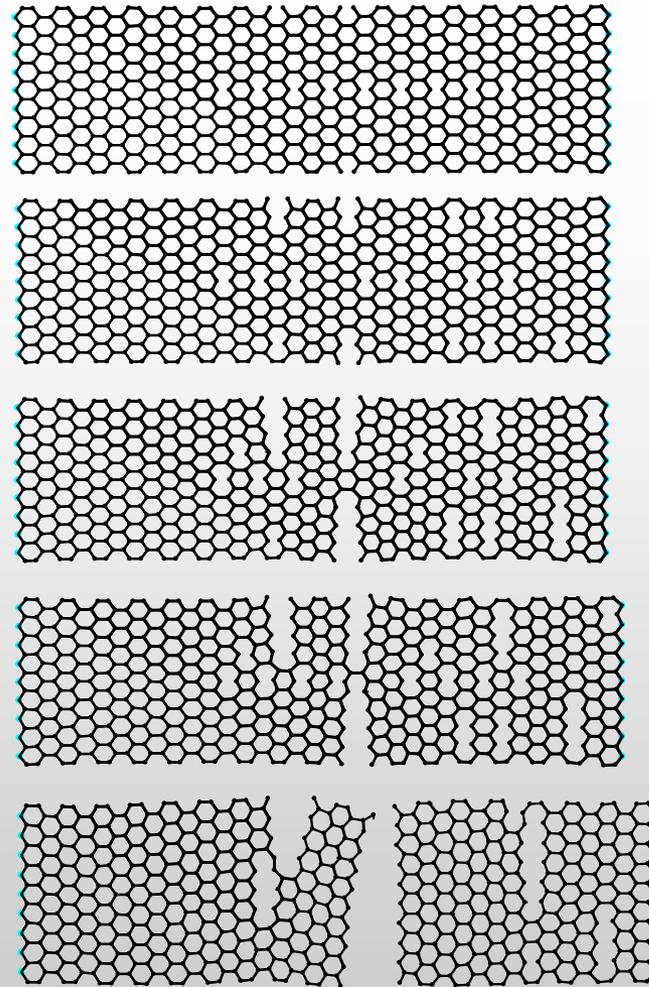
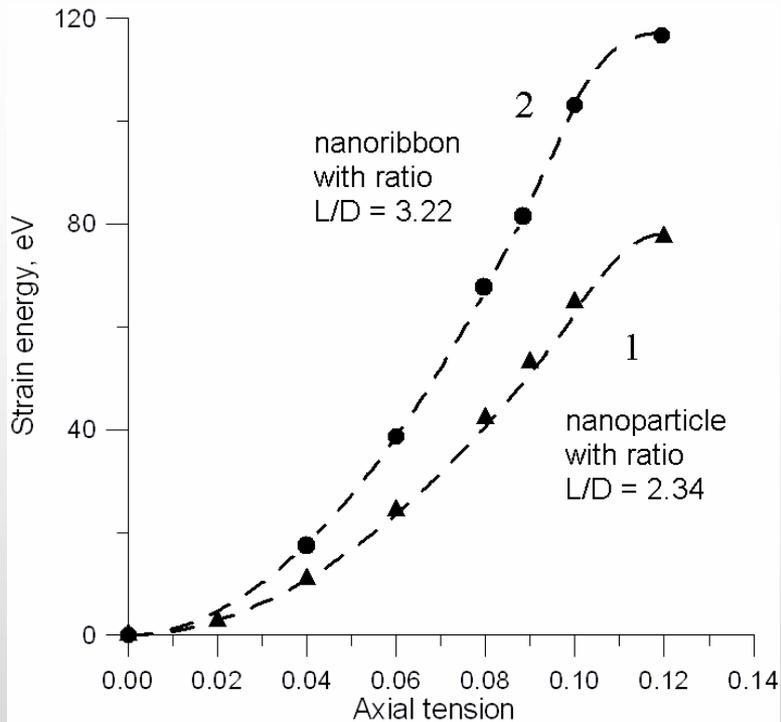
## Наноленты и наночастицы



Сжатая нанолента:  
96% исходной длины

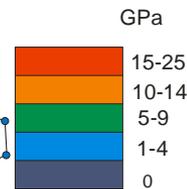
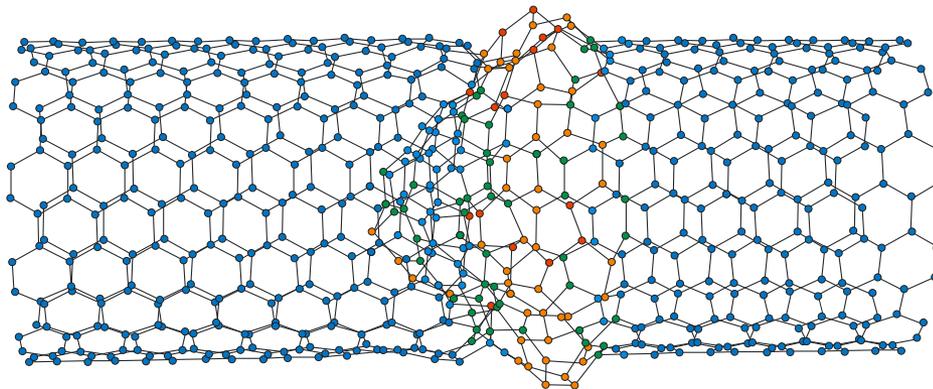


## Сжатие графеновых нанолент

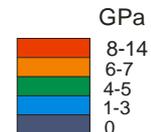
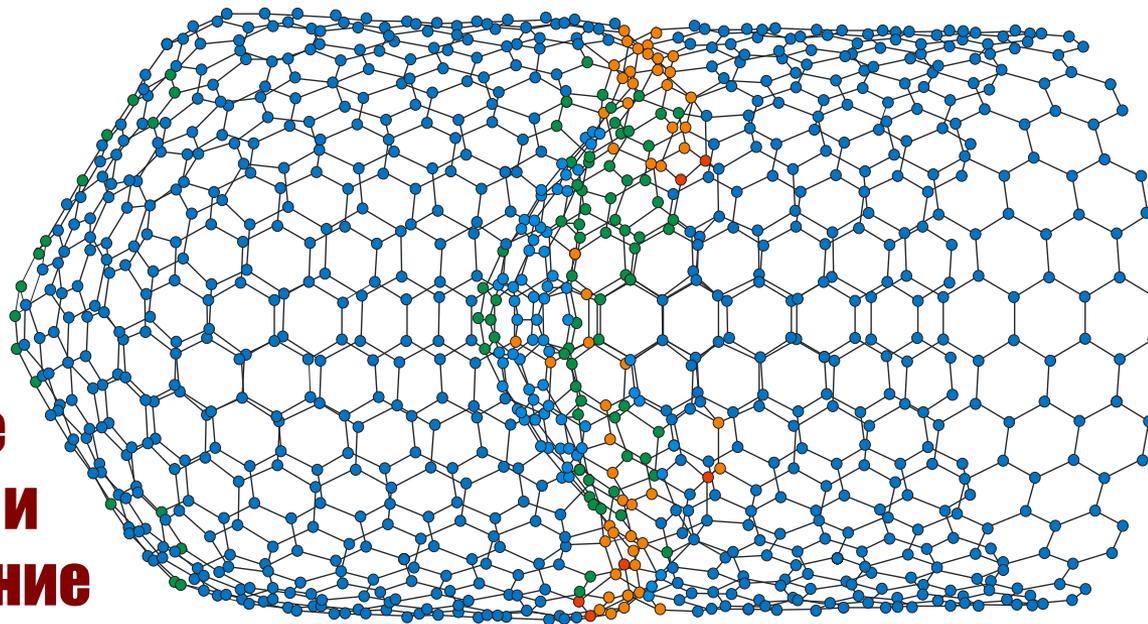


Растяжение графеновой ленты

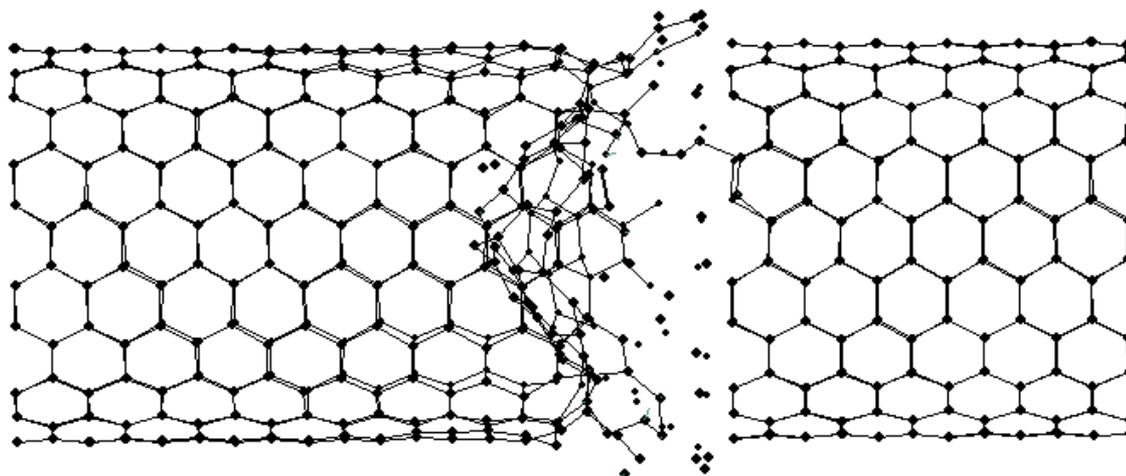
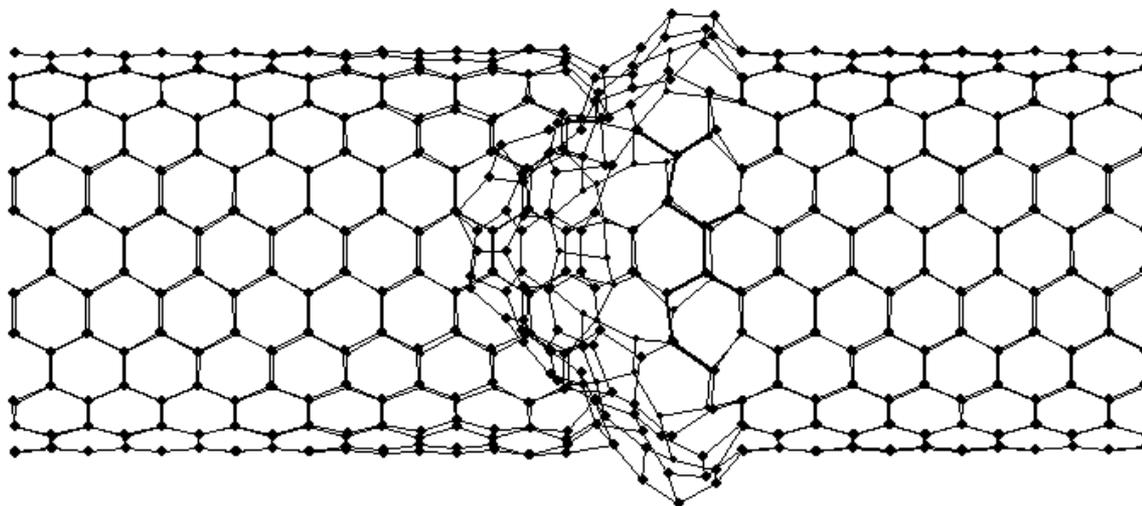
**Исследование деформации и прогнозирование образования дефектов и разрушения графеновых нанолент**



УНТ armchair (10,10)  
и (30,30)

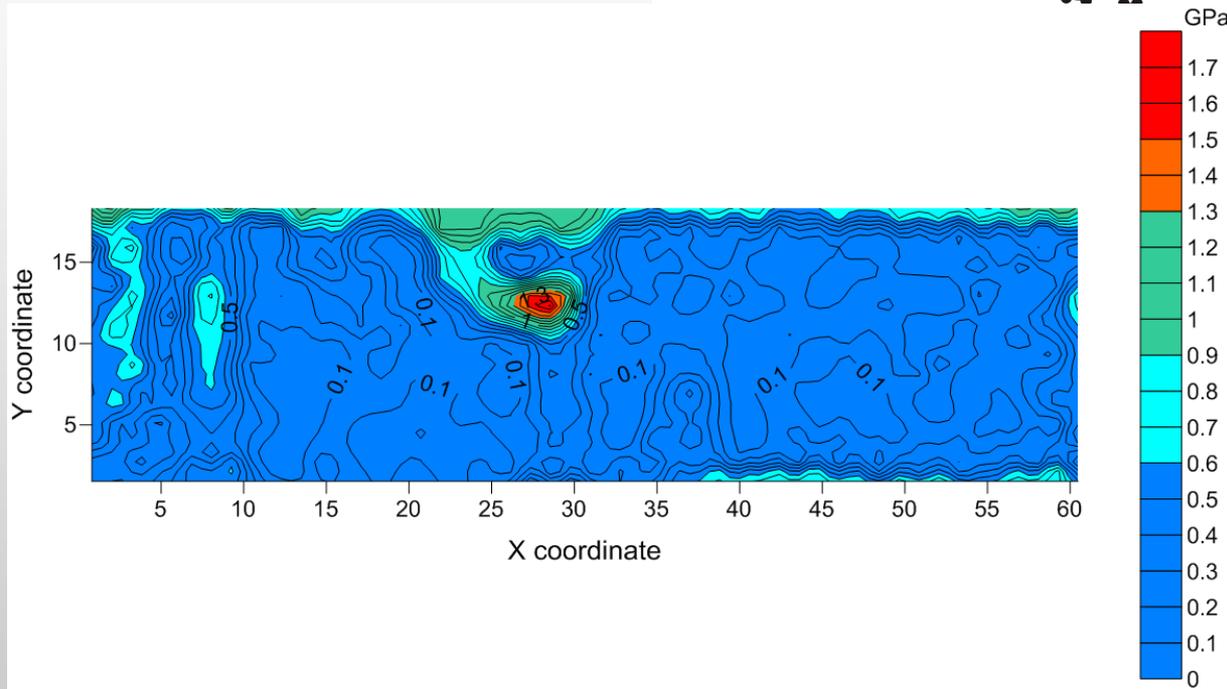
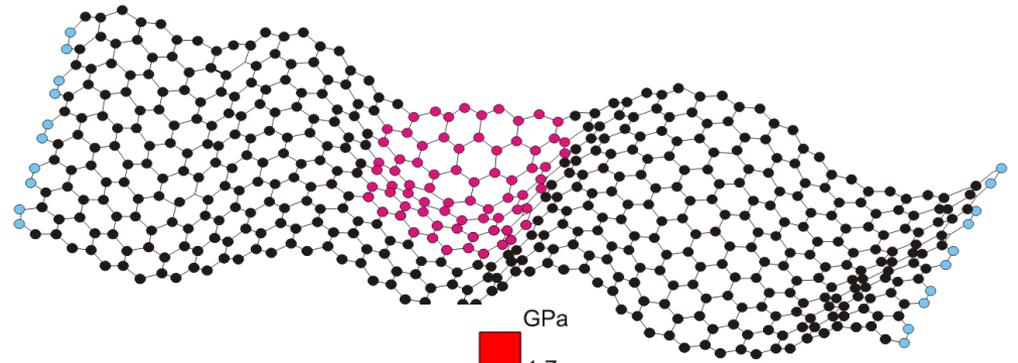


**Исследование  
стабильности и  
прогнозирование  
разрушения УНТ сложных  
структур**

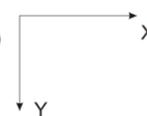
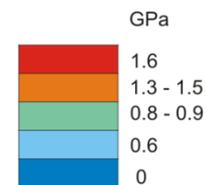
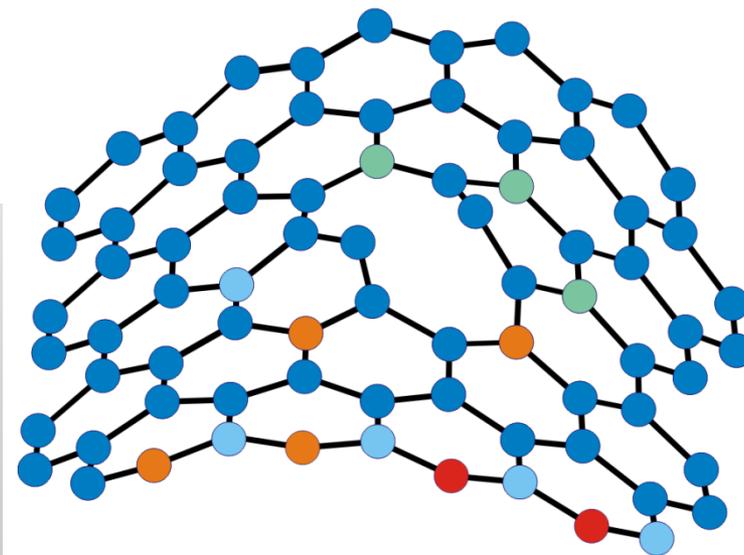
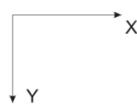
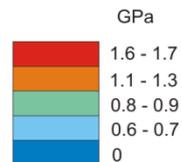
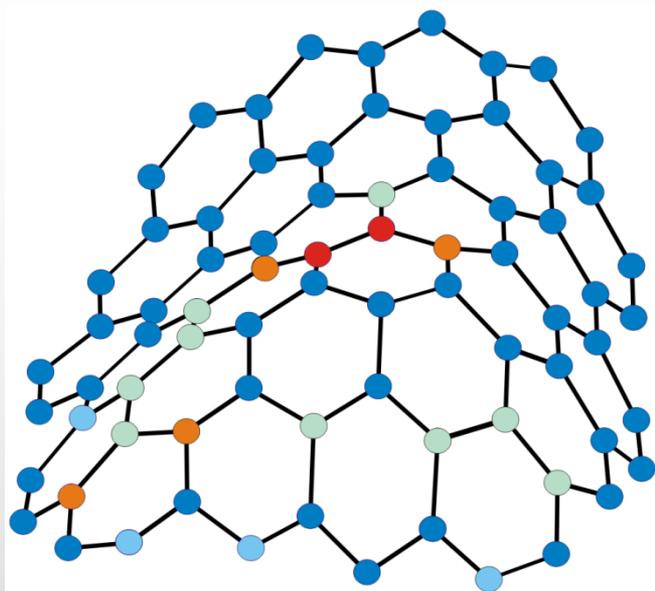


**Разрушение тонких УНТ с внутренними  
перемычками**

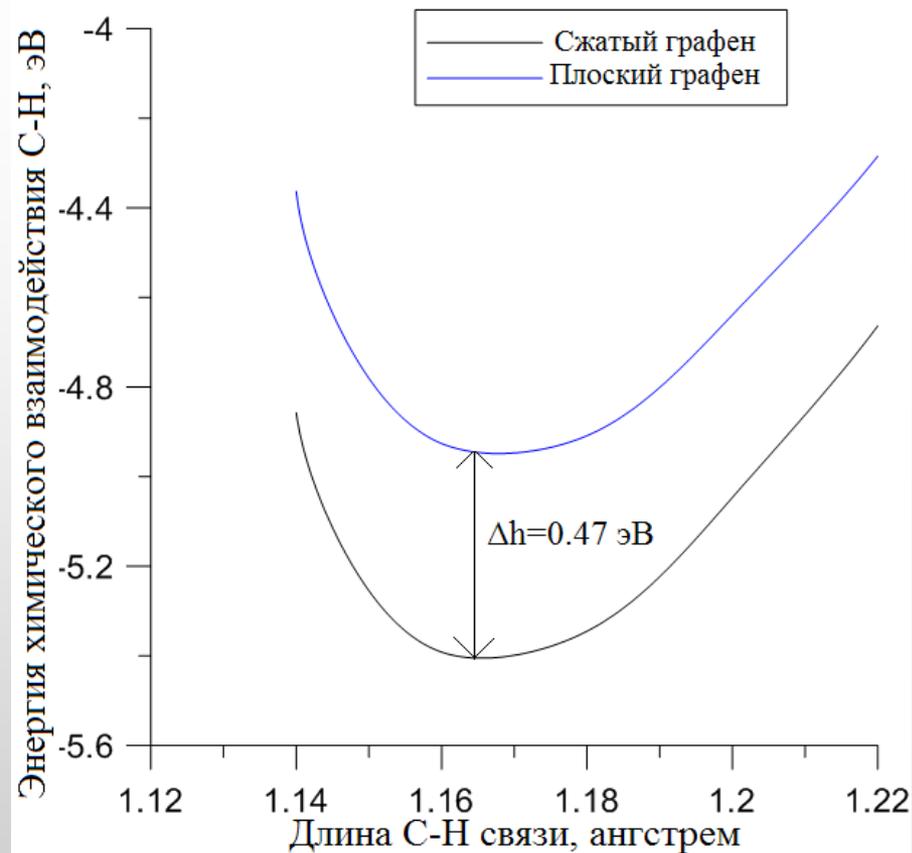
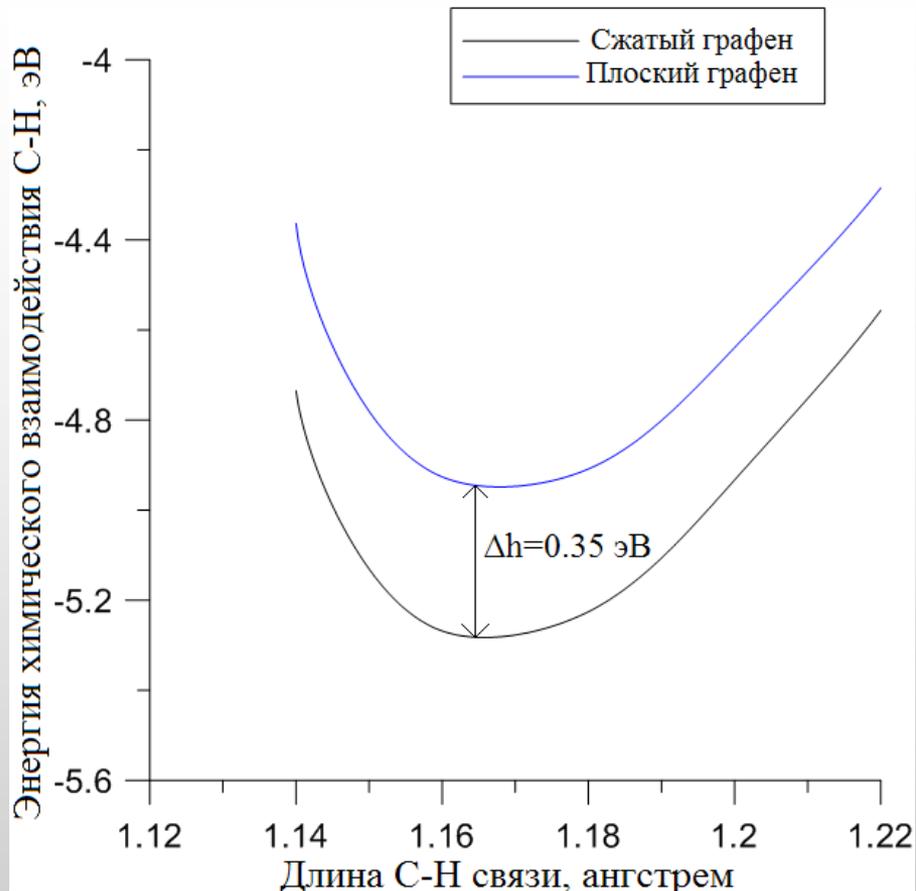
---



**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!**

---