

Министерство образования и науки  
Российской Федерации  
Федеральное государственное  
бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ  
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,  
НАНОСТРУКТУР  
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

***МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ***

**выпуск 9**

**ТВЕРЬ 2017**

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения об рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

**Официальный сайт издания в сети Интернет:**

**[www.physchemaspects.ru](http://www.physchemaspects.ru)**

**Ф50** Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2017. – Вып. 9. – 592 с.

ISBN 978-5-7609-1275-6

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-1275-6

ISSN 2226-4442

© Коллектив авторов, 2017

© Тверской государственной  
университет, 2017

УДК 539.3, 05.13.00

## ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИЛИЦЕНА В РАМКАХ МОДЕЛИ ПОЛЯ ЦЕНТРАЛЬНЫХ СИЛ

Ю.Е. Нагорный, Д.Н. Политаев

Белорусский государственный университет  
220030, Республика Беларусь, Минск, пр. Независимости, 4  
nagorny.yury@gmail.com

DOI: 10.26456/pcascnn/2017.9.341

**Аннотация:** Проведено численное моделирование механического поведения образцов графена и силицена в рамках модели поля центральных сил. Получены зависимости модуля Юнга и коэффициента Пуассона от размеров образцов. Осуществлено сравнение результатов.

**Ключевые слова:** поле центральных сил, графен, силицен, модуль Юнга, коэффициент Пуассона.

### 1. Введение

С момента получения плоской углеродной наноструктуры, графена, в 2004 году в лабораторных условиях [1], подобные двумерные атомные конструкции привлекли к себе значительный интерес. Было обнаружено, что одиночный слой атомов углерода обладает уникальными механическими и электрическими свойствами [2, 3]. Его применение считается наиболее перспективным в сфере микро- и нанoeлектроники [4]. Однако вся современная микрочиповая индустрия базируется на основе кремния, а переход на технологии, использующие углерод, связан со значительными затратами. К подобным двумерным структурам относится и монослой кремния, силицен, который по своим электрическим свойствам практически идентичен графену [5]. Атомная структура силицена, как и у графена, состоит из шестиугольников, но с атомами кремния в вершинах [6]. Они располагаются в виде сотовой решетки, как показано на рис. 1. В отличие от графена, атомы которого лежат в одной плоскости, у силицена атомы образуют волнообразную поверхность (см. рис. 2).

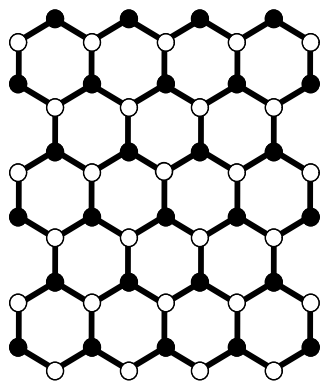


Рис. 1. Структура графена и силицена.

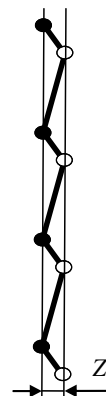


Рис. 2. Структура силицена, вид сбоку.

Практическое применение таких наноразмерных систем, как силицен, определяется, в том числе, и его механическими свойствами. Однако натурные эксперименты по их определению чрезвычайно затруднены в связи с малостью объектов исследования и проблемами получения геометрически правильных, регулярных и бездефектных структур. Поэтому широкое распространение получает разработка компьютерных моделей для виртуальных испытаний, основывающихся на различных механических моделях взаимодействия между атомами, составляющими наноразмерные структуры. В частности, применяется метод *ab initio*. В качестве его недостатка можно указать то, что расчёты требуют достаточно больших вычислительных ресурсов. Представляет интерес выявление зависимости механических свойств силицена от размеров, так как в малых образцах могут проявляться эффекты, которые на крупных объектах нивелируются.

## 2. Методика моделирования

В данной работе используется приближение поля центральных сил [7]. В нём принимается, что взаимодействия между атомами проходят вдоль прямой линии соединяющей их ядра. В связи с тем, что с увеличением расстояния сила взаимодействия быстро убывает, то в расчёт были приняты только связи ближайших атомов и расположенных через один. Для моделирования межатомного взаимодействия применяются упругие отрезки.

Матрица жёсткости используемого элемента, расположенного вдоль оси *OX* :

$$[K] = \begin{bmatrix} k & 0 & 0 & -k & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -k & 0 & 0 & k & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (1)$$

где  $k$  – силовая постоянная.

С его помощью проводится моделирование валентных связей, соединяющих соседние атомы, для них жёсткость обозначается  $k_1$ . Для моделирования связей атомов через один, применяются элементы с жёсткостью  $k_2$ . Для графена силовые постоянные  $k_1 = 652,13 \text{ Н} \cdot \text{м}^{-1}$ ,  $k_2 = 173,774 \text{ Н} \cdot \text{м}^{-1}$  были получены из соответственно жёсткости валентной связи  $938 \text{ ккал} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{Å}^{-2}$  и угловой жёсткости связи между направленными валентностями  $k_\theta = 126 \text{ ккал} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{рад}^{-2}$  [8]. Причём  $k_2$

получена из равенства энергий деформации углового элемента и упругого отрезка:

$$\frac{1}{2}k_{\theta}(\Delta\theta)^2 = \frac{1}{2}k_2(\Delta r)^2. \quad (2)$$

Для силицена  $k_1 = 161,7 \text{ Н}\cdot\text{м}^{-1}$ ,  $k_2 = 9,3 \text{ Н}\cdot\text{м}^{-1}$  [9].

Смещения узлов модели определялись из решения системы уравнений

$$[K] \cdot \bar{U} = \bar{F}, \quad (3)$$

где  $[K]$  – это матрица жесткости системы,  $\bar{U}$  – вектор перемещений,  $\bar{F}$  – вектор нагрузки.

Одна сторона модели подвергалась равномерному растягивающему усилию вдоль направления  $OY$ , а противоположная сторона фиксировалась вдоль этого направления, как показано на рис. 3. Узлы на вертикальной линии симметрии фиксировались по оси  $OX$ . Также для силицена проводилась фиксация вдоль оси  $OZ$  атомов лежащих в одной из плоскостей параллельной  $XOY$ .

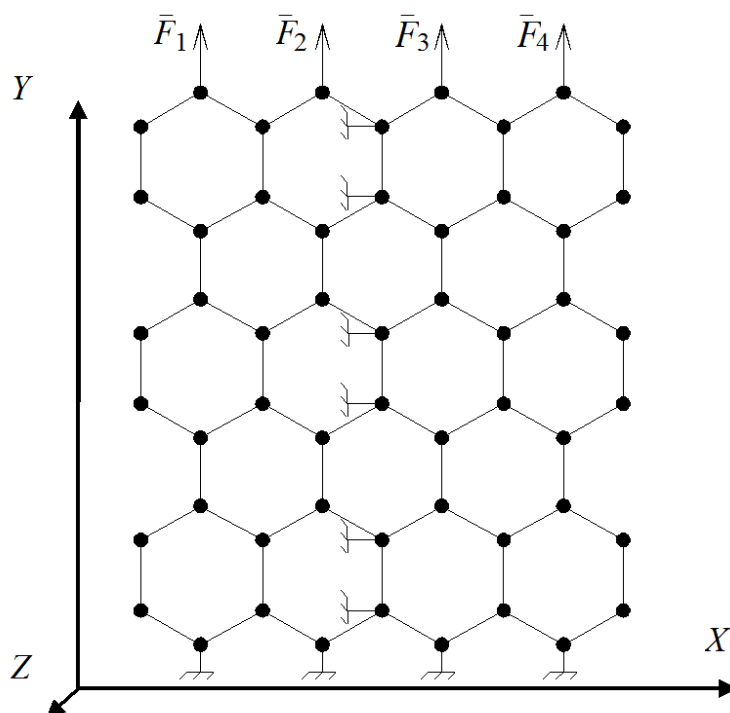


Рис. 3. Равномерное осевое растяжение.

При расчёте модуля Юнга  $E$  и коэффициентов Пуассона  $\nu_x, \nu_z$  использовали формулы

$$E = \frac{F}{X \cdot Z} / \frac{\Delta Y}{Y}, \quad \nu_x = -\frac{\Delta X}{X} / \frac{\Delta Y}{Y}, \quad \nu_z = -\frac{\Delta Z}{Z} / \frac{\Delta Y}{Y}, \quad (4)$$

где  $F$  – это прикладываемая нагрузка,  $X$  – размер образца по ширине,  $Z$  –

его толщина,  $\Delta Y$  – продольное удлинение,  $Y$  – длина образца,  $\Delta X$  – удлинение вдоль оси  $OX$ ,  $\Delta Z$  – удлинение вдоль оси  $OZ$ . При этом для графена выбирается толщина 0,34 нм, равная межслоевому расстоянию в графите, а для силицена  $Z=0,041$  нм – расстояние между плоскостями в которых лежат его атомы. Расстояние между соседними атомами в графене принималось 0,142 нм, в силиcene 0,2276 нм [10].

### 3. Результаты и обсуждение

На рис. 4-5 показаны результаты численных экспериментов для графена (левый рисунок) и силицена (правый рисунок). Горизонтальные оси соответствуют линейным размерам образца, вертикальная ось – значению упругого модуля. Поведение модулей продольной упругости  $E_G$  и  $E_{Si}$  (рис. 4) носит сходный характер, быстро выходя на асимптоту с увеличением длины образца, но диапазоны изменения различны:  $0,56 < E_G < 1,27$  ТПа,  $0,19 < E_{Si} < 0,47$  ТПа. Для всех размеров образцов отношение модулей для графена и силицена равно  $\sim 2,5$ . Для коэффициента поперечного сжатия вдоль  $OX$  отличия носят также только количественный характер (см. рис. 5). Пределы изменения коэффициентов для графена составляют  $0,35 < \nu_{xG} < 0,65$ , а для силицена  $0,20 < \nu_{xSi} < 0,46$ .

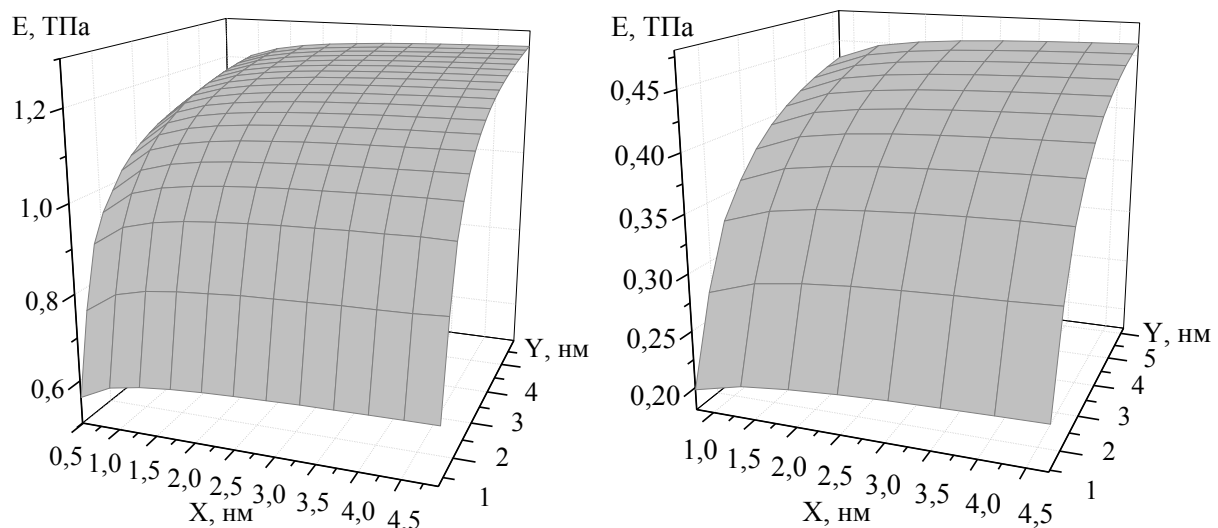


Рис. 4. Модуль продольной упругости.

Расчёт модуля поперечного сжатия для силицена вдоль оси  $OZ$  дал следующие результаты (см. рис. 6). Большие значение  $5,12 < \nu_{zSi} < 9,15$  могут быть вызваны тем, что перемещению узлов модели вдоль оси  $OZ$  препятствуют лишь элементы, соединяющие не ближайшие узлы, а через один. Они обладают малой жёсткостью, расположены под углом к

направлению действия сил и лежат в плоскости перпендикулярной перемещениям.

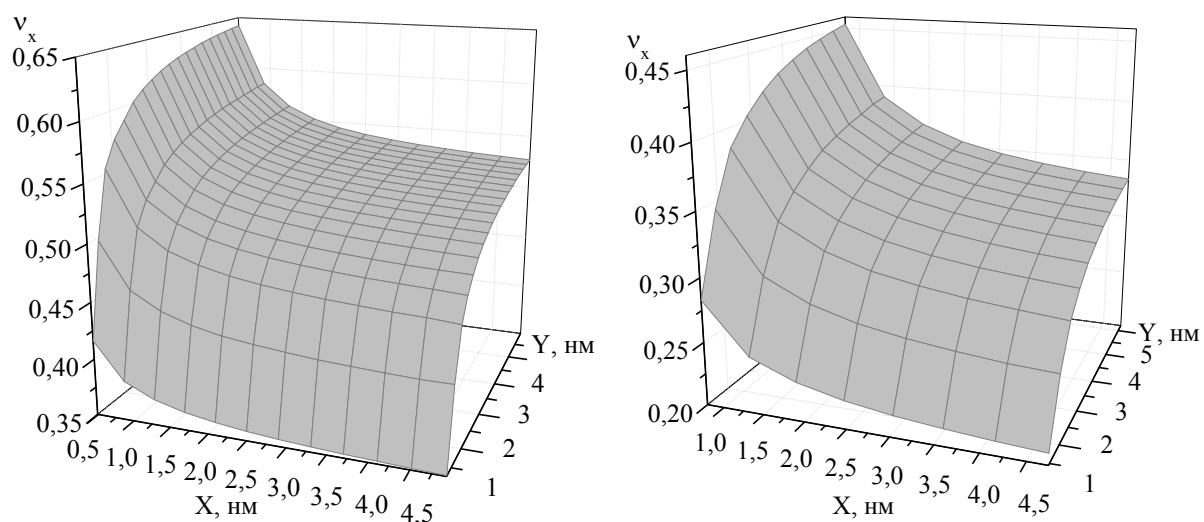


Рис. 5. Коэффициент поперечного сжатия вдоль оси  $OX$ .

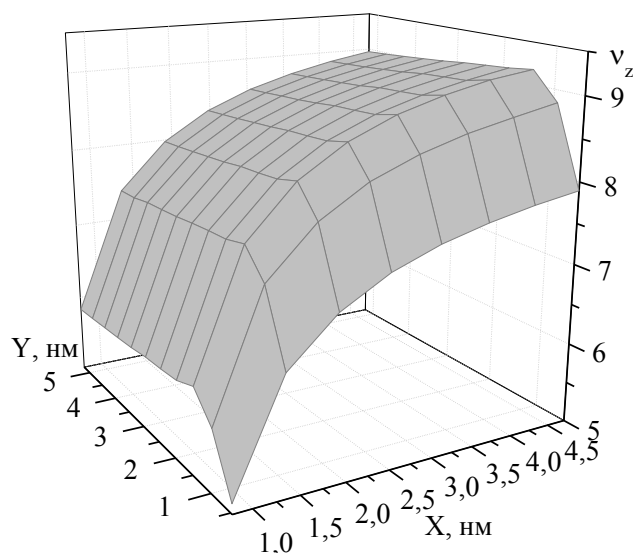


Рис. 6. Коэффициент поперечного сжатия кремния вдоль оси  $OZ$ .

#### 4. Заключение

Построены и реализованы в системе «Mathematica 8.0» механико-математические модели графена и кремния для расчета напряженно-деформированного состояния. Получены зависимости величин модулей продольной и поперечной упругости от линейных размеров. Возникает вопрос о возможности использования толщины образца при расчете продольного модуля для атомных монослоев. В целях избежания разногласий по этому вопросу, имеет смысл, исключить толщину из расчёта продольного модуля упругости, и получать величины размерности Н/м.

*Работа выполнена при финансовой поддержке государственной программы научных исследований ГПНИ «Ковергенция 2020» (подпрограмма «Методы математического моделирования сложных систем»).*

### **Библиографический список:**

1. **Novoselov, K.S.** Electric field effect in atomically thin carbon films / K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov et al. // *Science*. – 2004. – V. 306. – I. 5696. – P. 666-669.
2. **Zhuravkov, M.A.** Finite element modeling of nanoscale structures / M.A. Zhuravkov, Yu.E. Nagornyi, V.I. Repchenkov // *Nanotechnologies in Russia*. – 2011. – V. 6. – № 9-10. – P. 597-606.
3. **Сорокин, П.Б.** Полупроводниковые наноструктуры на основе графена / П.Б. Сорокин, Л.А. Чернозатонский // *Успехи физических наук*. – 2013. – Т. 183. – № 2. – P. 113-132.
4. **Zhu, Y.** Graphene and graphene oxide: synthesis, properties and applications / Y. Zhu, H. Murali, W. Cai, X. Li et al. // *Advanced materials*. – 2010. – Т. 22. – I. 35. – P. 3906-3904.
5. **Guzman-Verri, G.G.** Electronic structure of silicon-based nanostructures / G.G. Guzman-Verri, L.C.L.Y. Voon // *Physical Review B*. – 2007. – V. 76. – I. 7. – P. 075131-1-075131-10.
6. **Ding, N.** Defect-sensitive performance of silicene sheets under uniaxial tension: mechanical properties, electronic structures and failure behavior / N. Ding, H. Wang, X. Chen, C.-M. L. Wu // *RSC Advances*. – 2017. – V. 7. – I. 17. – P. 10306-10315.
7. **Коптев, Г.С.** Расчет колебаний молекул / Г.С. Коптев, Ю.А. Пентин. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1977. – 208 с.
8. **Li, C.** A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes / C. Li, T.-W. Chou // *International Journal of Solids and Structures*. – 2003. – V. 40. – I. 10. – P. 2487-2499.
9. **Кривцов, А.М.** Сравнение микромоделей описания упругих свойств алмаза / А.М. Кривцов, О.С. Лобода, С.С. Хакало // *Механика твёрдого тела*. – 2012. – № 5. – С. 44-52.
10. **John, R.** Theoretical investigation of structural, electronic, and mechanical properties of two dimensional *C, Si, Ge, Sn* / R. John, B. Merlin // *Crystal Structure Theory and Applications*. – 2016. – V. 5. – № 3. – P. 43-55.