

Министерство науки и высшего образования
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 10

ТВЕРЬ 2018

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 о 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**

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, 2018. – Вып. 10. – 708 с.

ISBN 978-5-7609-1395-1

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 978-5-7609-1395-1

ISSN 2226-4442

© Коллектив авторов, 2018
© Тверской государственной
университет, 2018

УДК 539.3, 05.13.00

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИЛИЦЕНА В РАМКАХ МОДЕЛИ ВАЛЕНТНО-СИЛОВОГО ПОЛЯ

Ю.Е. Нагорный, Д.Н. Политаев

Белорусский государственный университет

220030, Республика Беларусь, Минск, пр. Независимости, 4

nagorny.yury@gmail.com

DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.485

Аннотация: Осуществлено численное моделирование механических свойств образцов силицена в рамках модели валентно-силового поля. Найдены зависимости упругих модулей от линейных размеров. Проведено сравнение вычисленных результатов с полученными при моделировании в рамках поля центральных сил. Наблюдается совпадение поведения соответствующих графиков. При этом обнаружено отставание значений упругих модулей от вычисленных с применением модели поля центральных сил. Оно нарастает с увеличением размеров образца.

Ключевые слова: поле центральных сил, валентно-силовое поле, силицен, модуль Юнга, коэффициент Пуассона.

1. Введение

Долгое время современная электроника базировалась на применении кремния. Его механические свойства в разных режимах были хорошо изучены. Но получение однослойной структуры состоящей из атомов кремния заставляет вновь обратиться к этой проблеме. Толчком послужило открытие К.С. Новосёловым и А.К. Геймом монослоя углерода, названного графен [1]. Важность этого события была отмечена нобелевской премией по физике [2]. Оказалось, что эта форма углерода обладает рядом совершенно отличных от остальных конфигураций углерода свойств, что привлекло к ней огромное внимание. Аналогичным образом, возможности силицена определяются не только изученными свойствами привычной трёхмерной структуры кремния. Атомная структура силицена представляет собой трехмерную однослойную конструкцию из шестиугольников, в углах которых расположены атомы кремния. Здесь необходимо подчеркнуть, что расстояние между двумя параллельными плоскостями, на которых расположены атомы силицена, меньше на порядок, чем межатомное расстояние в силицене, однако им нельзя пренебрегать.

Знание механических свойств наноразмерных систем, необходимо при создании устройств или их деталей. Игнорирование этих свойств может привести к некорректной работе и даже разрушению наноразмерных объектов. Из-за малости которых (размер изучаемых образцов составляет несколько десятков нанометров) натурные испытания представляются затруднительными, именно поэтому на первый план выходят различные методы численного моделирования.

2. Методика моделирования

В работе [3] были вычислены упругие модули наноразмерных образцов силицена в рамках модели поля центральных сил. При этом учитывалась валентная связь между соседними атомами и силы Ван-дер-Ваальса действующие между атомами, лежащими через один. Для моделирования этих связей использовался один тип структурного элемента, представляющего собой упругий отрезок (см. рис. 1).

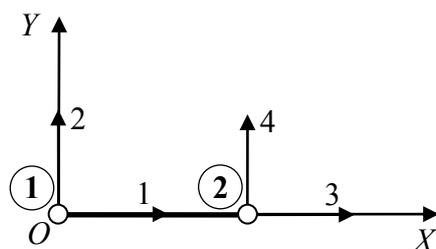


Рис. 1. Линейный структурный элемент.

Матрица жёсткости такого элемента расположенного вдоль оси OX имеет вид:

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

где k – жёсткость линейного элемента.

В данной работе проводится изучение механического поведения наноразмерных образцов силицена с использованием модели валентно-силового поля. Для неё моделирование взаимодействия атомов расположенных рядом осуществляется при помощи линейных структурных элементов, а для расположенных через один, проводится при помощи углового структурного элемента (см. рис. 2).

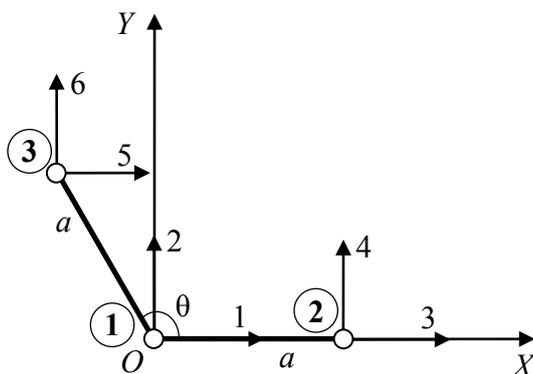


Рис. 2. Угловой структурный элемент.

Его три узла совпадают с ядрами атомов, а две стороны этого элемента геометрически совпадают с соответствующими валентными связями. При

этом сам элемент работает в случае изменения угла между этими направленными валентностями. Возникающие силы расположены на концах угла и действуют перпендикулярно его сторонам. Матрица жёсткости такого элемента:

$$[K]_0 = \frac{k_\theta}{a^2} \times \begin{bmatrix} \cos^2\theta & \cos\theta(1+\sin\theta) & 0 & -\cos\theta & -\cos^2\theta & -\cos\theta\sin\theta \\ \cos\theta(1+\sin\theta) & (1+\sin\theta)^2 & 0 & -(1+\sin\theta) & -\cos\theta(1+\sin\theta) & -\sin\theta(1+\sin\theta) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\cos\theta & -(1+\sin\theta) & 0 & 1 & \cos\theta & \sin\theta \\ -\cos^2\theta & -\cos\theta(1+\sin\theta) & 0 & \cos\theta & \cos^2\theta & \cos\theta\sin\theta \\ -\cos\theta\sin\theta & -\sin\theta(1+\sin\theta) & 0 & \sin\theta & \cos\theta\sin\theta & \sin^2\theta \end{bmatrix}, \quad (2)$$

где k_θ – угловая жёсткость, a – длина стороны углового элемента, θ – угол между сторонами.

Угловая жёсткость этого элемента вычисляется из равенства энергии деформации углового элемента и упругого отрезка, моделирующего действие сил Ван-дер-Ваальса [3]:

$$\frac{1}{2} k_\theta (\Delta\theta)^2 = \frac{1}{2} k_2 (\Delta r)^2. \quad (3)$$

Для силицена $k_1 = 161,7 \text{ Н}\cdot\text{м}^{-1}$ – жёсткость линейного элемента, моделирующего валентную связь, $k_2 = 9,3 \text{ Н}\cdot\text{м}^{-1}$ [4].

Смещения узлов модели определялись из решения системы уравнений

$$[K] \cdot \bar{U} = \bar{F}, \quad (4)$$

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

3. Граничные условия

Узлы с минимальными значениями координаты Y фиксировались по этому направлению. В противоположных им узлах на верхней грани прикладывалась растягивающая нагрузка вдоль оси Y . Кроме этого проводилась фиксация вдоль оси OX узлов, расположенных на вертикальной оси симметрии, с целью достичь симметричного смещения узлов, расположенных по разным сторонам этой оси. Также проводилось закрепление вдоль оси OZ узлов, расположенных в плоскости XOY , чтобы исключить перемещение вдоль этой оси образца как целого (они изображены на рис. 3 как белые неокрашенные).

Формулы, применяемые для расчётов модулей продольной и поперечной упругости:

$$E = \frac{F}{l_X \cdot l_Z} / \frac{\Delta l_Y}{l_Y}, \quad \nu_X = -\frac{\Delta l_X}{l_X} / \frac{\Delta l_Y}{l_Y}, \quad \nu_Z = -\frac{\Delta l_Z}{l_Z} / \frac{\Delta l_Y}{l_Y}, \quad (5)$$

где F – это прикладываемая нагрузка, l_X – размер образца по ширине,

l_z – его толщина, Δl_y – продольное удлинение, l_y – длина образца, Δl_x – удлинение вдоль оси OX , Δl_z – удлинение вдоль оси OZ . При этом для силицена толщина $l_z = 0,041$ нм – расстояние между плоскостями в которых лежат его атомы. Расстояние между соседними атомами в силиcene принималось $a = 0,2276$ нм [5].

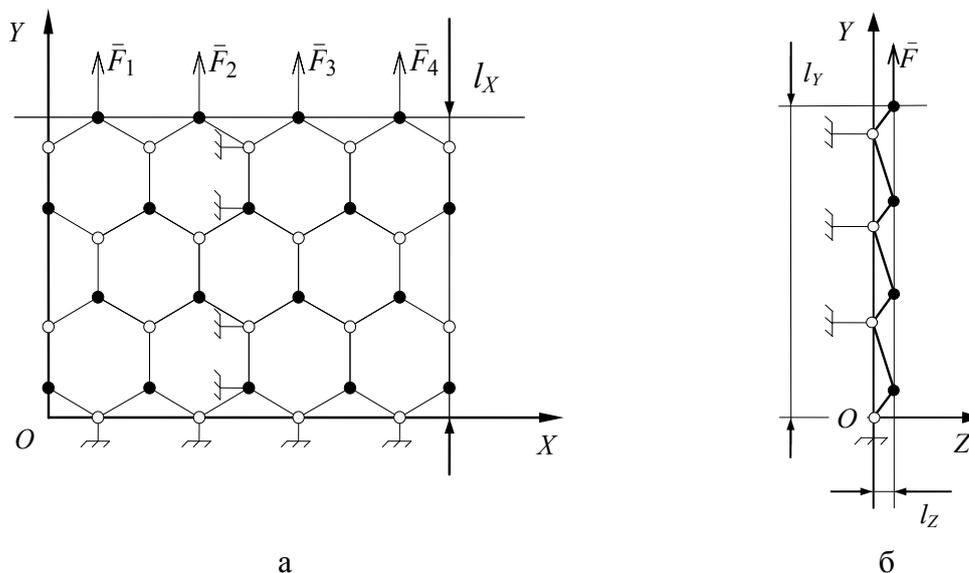


Рис. 3. Схема нагружения: а – профиль, б – вид сбоку.

4. Результаты и обсуждение

Полученные данные расчётов для силицена в рамках поля центральных сил (central force field, CFF) и валентно-силового поля (valence force field, VFF) приведены на рис. 4-6 слева и справа соответственно. Модуль продольной упругости (см. рис. 4) для обеих моделей растёт с увеличением размеров. Наибольший рост, с выходом на асимптоту, наблюдается с увеличением длины образца, причём с ростом ширины значение меняется мало. Абсолютные значения находятся в пределах: $0,19 < E_{CFF} < 0,47$ ТПа и $0,17 < E_{VFF} < 0,37$ ТПа. Для коэффициента поперечного сжатия вдоль OX отличия носят также только количественный характер (см. рис. 5). Пределы изменения коэффициентов для составляют $0,20 < \nu_{x,CFF} < 0,46$ и $0,18 < \nu_{x,VFF} < 0,38$. Расчёт модуля поперечного сжатия для силицена вдоль оси OZ дал следующие результаты (см. рис. 6). Значение $5,12 < \nu_{z,CFF} < 9,15$ и $5,04 < \nu_{z,VFF} < 8,27$. В обоих случаях наблюдается постепенный рост с выходом на асимптоту с увеличением ширины образца. Присутствует резкий скачок значений на начальном этапе при увеличении длины, а затем постепенный спад.

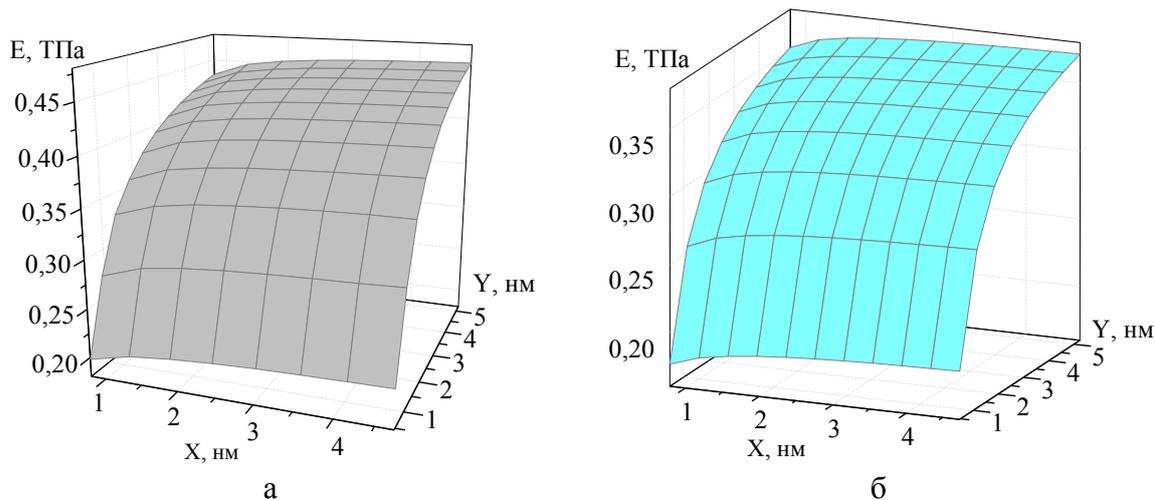


Рис. 4. Модуль продольной упругости: а – для поля центральных сил, б – для валентно-силового поля.

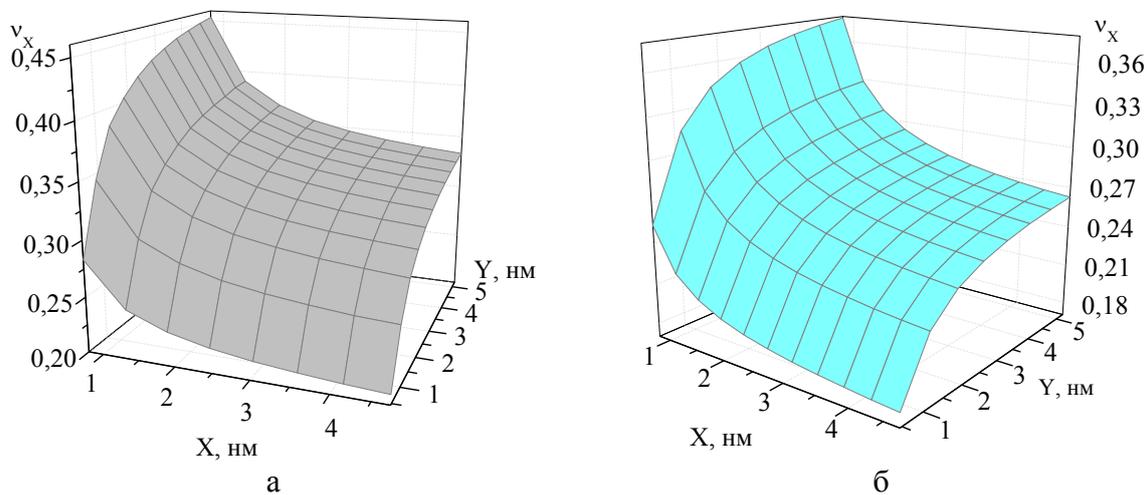


Рис. 5. Коэффициент поперечного сжатия вдоль оси OX : а – для поля центральных сил, б – для валентно-силового поля.

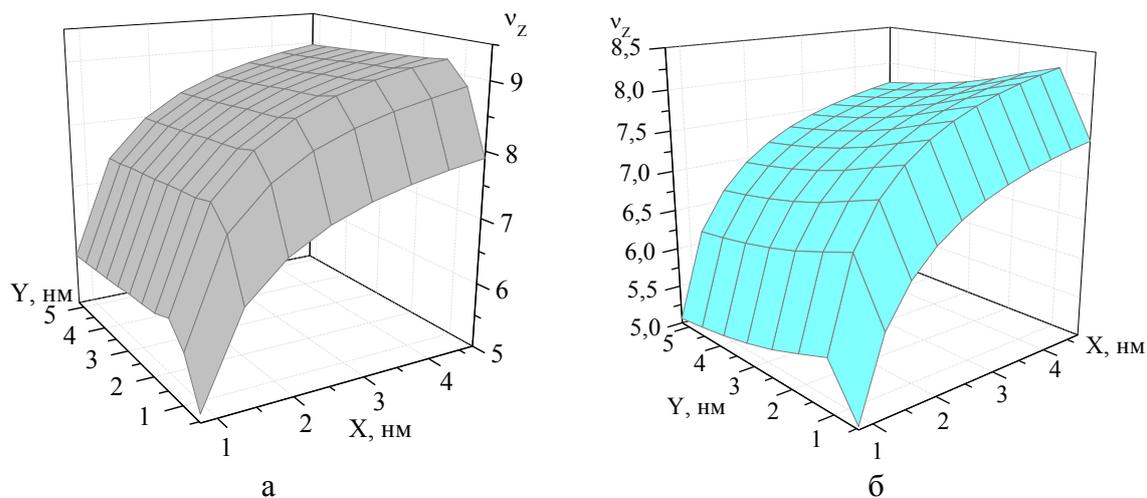


Рис. 6. Коэффициент поперечного сжатия силицена вдоль оси OZ : а – для поля центральных сил, б – для валентно-силового поля.

5. Заключение

Стоит отметить, что для минимальных размеров образца значения трех соответствующих модулей вычисленные в обеих моделях близки. С ростом размеров, при сохранении характера поведения, наблюдается постепенное отставание величин упругих модулей полученных в рамках валентно-силового поля от вычисленных с применением модели поля центральных сил.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственной программы научных исследований ГПНИ «Конвергенция 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. Press release. Nobelprize.org. Nobel Media AB 2018. Thu. 30 Aug 2018. – Режим доступа: [www.url: https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2010/press-release/](https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2010/press-release/). – 26.10.2018.
3. **Нагорный, Ю.Е.** Исследование механических свойств силицена в рамках модели поля центральных сил / Ю.Е. Нагорный, Д.Н. Политаев // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2017. – Вып. 9. – С. 341-346.
4. **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.
5. **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.

References:

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. Press release. Nobelprize.org. Nobel Media AB 2018. Thu. 30 Aug 2018. – Режим доступа: [www.url: https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2010/press-release/](https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2010/press-release/). – 26.10.2018.
3. **Nagorny, Yu.E.** Issledovanie mekhanicheskikh svojstv silicena v ramkah modeli polya central'nyh sil / Yu.E. Nagornyy, D.N. Politaev // Fiziko-himicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov. – 2017. – I. 9. – P. 341-346.
4. **Krivcov, A.M.** Sravnenie mikromodelej opisaniya uprugih svojstv almaza / A.M. Krivcov, O.S. Loboda, S.S. Hakalo // Mekhanika tvyordogo tela. – 2012. – no. 5. – P. 44-52.
5. **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.

**INVESTIGATION OF MECHANICAL PROPERTIES OF SILICANE IN THE VALENCE
FORCE FIELD MODEL**

Y.E. Nagorny, D.N. Politaev

Belarusian State University

DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.485

Abstract: Numerical simulation of mechanical properties of silicene samples are made in the valence force field model. The dependences of elastic modules on linear dimensions are found. The results are compared with those obtained in the of central force field model. Behavior of the corresponding graphs is similar. At the same time, a lag of values of the elastic modules received within the valence force field model in comparison with the central forces field model was observed. The lag in question accrues with growth of the sample sizes.

Keywords: central force field, valence force field, silicene, Young's modulus, Poisson's ratio.

Нагорный Юрий Евгеньевич – старший преподаватель кафедры био- и наномеханики Белорусского государственного университета

Политаев Дмитрий Николаевич – старший преподаватель кафедры Веб-технологий и компьютерного моделирования Белорусского государственного университета

Yury E. Nagorny – Senior Lecturer of the Department of Bio- and Nanomechanics, Belarusian State University

Dmitry N. Politaev – Senior Lecturer of the Department of Web Technologies and Computer Modeling, Belarusian State University