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**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 11

ТВЕРЬ 2019

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:

<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2019. – Вып. 11. – 680 с.

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

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров 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.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

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

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2019

© Тверской государственнй университет, 2019

УДК 539.3, 05.13.00

Оригинальная статья

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ СИЛИЦЕНА В РАМКАХ ОБОБЩЁННОГО ГАРМОНИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Ю.Е. Нагорный

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

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.336

Аннотация: Для модели обобщённого гармонического поля получены коэффициенты жёсткости двух линейных и двух угловых элементов из коэффициентов жёсткости двух линейных элементов модели поля центральных сил. Перерасчёт проведён через частоты трёхузлового элемента собранного из этих элементов. Осуществлено численное моделирование равномерного растяжения образцов силицена. Найдены зависимости продольного и двух поперечных упругих модулей от линейных размеров образцов.

Ключевые слова: обобщённое гармоническое поле, силицен, коэффициенты жёсткости, собственные частоты, модуль Юнга, коэффициент Пуассона.

1. Введение

Среди физических моделей молекулярных структур можно выделить следующие: модель поля центральных сил (ПЦС), модель валентно-силового поля (ВСП), модель обобщённо-гармонического поля (ОГП) [1]. В модели ПЦС считается, что атомы молекулярной структуры взаимодействуют вдоль линии, соединяющей их центры. При этом связи ближайших атомов, получили название валентные. Они являются самыми сильными из рассматриваемых в этой модели. При моделировании кроме этих связей учитываются обязательно и более удалённые связи. Обычно рассматриваются как самые сильные после валентных, связи соединяющие следующие по удалению атомы, то есть через один. Без учёта их влияния структура будет неустойчива и корректный расчёт механического поведения невозможен.

Для валентно-силового подхода свойственен учёт, кроме валентных связей, также связей внутри пар направленных валентностей, исходящими из одного атома. В данной ситуации рассматриваются усилия вызванные изменением угла между этими валентностями, в отличие от изменения расстояния между атомами, что характерно для ПЦС. Соответственно в матрице жёсткости упругого отрезка моделирующего связь вдоль линии соединяющей два атома коэффициент жёсткости представляет собой вторую производную потенциальной энергии взаимодействия этих атомов по расстоянию между ними. В матрице жёсткости упругого угла, моделирующего взаимодействие между направленными валентностями коэффициент жёсткости определяется как вторая производная функции потенциальной энергии взаимодействия трёх атомов по углу между этими

валентностями.

Для модели ОГП отсутствует ограничение, как по типу связи, так и по дальности действия. Предполагается, что происходит взаимодействие всех атомов со всеми в молекулярной структуре, что соответствует действительности, так как в молекуле образуется единое электронное облако. В работе [2] было показано, что для симметричной системы для четырёх атомов матрица жёсткости этой системы, полученная прямым построением с учётом равновесия сил и моментов, содержит четыре независимых коэффициента. В результате систему можно составить из элементов четырёх различных типов, каждый тип обладает собственным коэффициентом жёсткости, независимым от других. Обозначим эти элементы по номерам от 1 до 4 (см. рис. 1). Два из которых представляют собой упругие отрезки: 1 моделирует валентную связь, 2 – связь атомов расположенных через один. Два других – упругие углы: 3 отвечает за угловую связь между направленными валентностями, а 4 моделирует взаимодействие между валентной связью и связью, выходящей из того же атома, что и валентность и атомом расположенным через один (см. рис. 1).

Рис. 1. Образцы связей.

Указанное разбиение демонстрирует, что в полученной модели смешивается как набор элементов из ПЦС [3], так и из ВСП [4]. Это позволяет сделать вывод, что полученные с помощью этой модели результаты будут более точными, по сравнению с теми, которые были определены путём двух предыдущих моделей, ПЦС и ВСП. Даже не смотря на то, что рассматривается взаимодействие группы атомов в области ограниченной только радиусом валентной связи.

2. Получение коэффициентов жёсткости элементов

Воспользуемся этой моделью для получения механических характеристик наноструктур силицена. Для матриц жёсткости использованных четырёх типов элементов коэффициенты жёсткости будут получены из частот колебаний силицена.

Расчёт коэффициентов для матриц жёсткости элементов будет проводиться при помощи вычисления собственных частот колебаний трёхузлового структурного элемента. Для этого запишем следующую формулу:

$$\det([K] - \omega^2[M]) = 0, \quad (1)$$

где $[K]$ – матрица жёсткости в системе из трёх линейных упругих отрезков, два из которых моделируют валентные связи и имеют жёсткость соответственно $k_1 = 161,7$ Н/м [5], третий упругий отрезок предназначен для моделирования связи атомов расположенных через один и имеют жёсткость $k_2 = 9,3$ Н/м [5], $[M]$ – диагональная матрица, содержащая на главной диагонали массы атомов кремния m_{Si} , ω – собственная частота колебаний.

Решив получившиеся уравнения, получим значение трёх частот: $\omega_1 = 1,38 \cdot 10^{13}$ Гц, $\omega_2 = 7,33 \cdot 10^{13}$ Гц, $\omega_3 = 9,28 \cdot 10^{13}$ Гц. Подставим их в систему из трёх уравнений:

$$\det([K]_{(GHF)} - \omega_i^2[M]) = 0, \quad i = \overline{1,3}. \quad (2)$$

где $[K]_{(GHF)}$ – матрица жёсткости трёхузловой системы, составленная из трёх матриц жёсткости линейных упругих отрезков (тип 1 и 2), как и в указанном выше случае. Также она содержит три матрицы жёсткости упругих углов: один моделирует связь между направленными валентностями, а два других – между валентной и невалентной связью. В результате имеем, не смотря на то, что присутствуют шесть элементов, только четыре различных коэффициента. Это вызвано физической симметрией системы, поэтому жесткости двух валентных связей совпадают между собой. Точно также совпадают коэффициенты для двух угловых элементов.

Система содержит уравнений на одно меньше, чем число независимых коэффициентов. Поэтому при её решении мы получаем зависимость трёх из этих коэффициентов от четвёртого. Полученные формулы:

$$\begin{aligned} k_1 &= \frac{1}{6} \left(3k_{1(CFF)} - 6k_2 + 4k_{2(CFF)} + \right. \\ &+ \sqrt{9k_{1(CFF)}^2 + 18k_{1(CFF)}k_2 - 36k_2^2 - 6k_{1(CFF)}k_{2(CFF)} + 24k_2k_{2(CFF)} + 16k_{2(CFF)}^2} \left. \right), \\ k_{\gamma} &= \frac{1}{5} a^2 \left(-3k_{1(CFF)} - 8k_2 + 6k_{2(CFF)} + \right. \\ &+ \sqrt{9k_{1(CFF)}^2 + 18k_{1(CFF)}k_2 - 36k_2^2 - 6k_{1(CFF)}k_{2(CFF)} + 24k_2k_{2(CFF)} + 16k_{2(CFF)}^2} \left. \right), \\ k_{\gamma 2} &= \frac{1}{2} a^2 \left(3k_{1(CFF)} + 6k_2 - 4k_{2(CFF)} - \right. \\ &- \sqrt{9k_{1(CFF)}^2 + 18k_{1(CFF)}k_2 - 36k_2^2 - 6k_{1(CFF)}k_{2(CFF)} + 24k_2k_{2(CFF)} + 16k_{2(CFF)}^2} \left. \right), \end{aligned} \quad (3)$$

где $k_{1(CFF)}$ и k_1 – жёсткость валентной связи соответственно в рамках ПЦС и

ОГП, $k_{2(CFF)}$, k_2 – жёсткость элемента моделирующего силы Ван-дер-Ваальса связи соответственно в рамках ПЦС и ОГП, k_γ и $k_{\gamma 2}$ – жёсткости угловых элементов типа 3 и 4 в рамках ОГП.

Эти формулы накладывают ограничения на коэффициент k_2 . Он может изменяться в пределах

$$-47,13 \leq k_2 \leq 134,18 \text{ Н/м.} \quad (4)$$

При любом значении из указанных пределов можно получить, подставив значение k_2 в формулу (3) набор из четырёх коэффициентов. Графики этих функций представлены на рис. 2. Полученные наборы можно применить для расчёта механических свойств силицена в рамках ОГП.

Рис. 2. График зависимости коэффициентов трёхузлового элемента в рамках ОГП от коэффициента k_2 .

Расстояние между соседними атомами в силиcene $a = 0,2276$ нм [6]. Значения коэффициентов k_1 , k_γ , $k_{\gamma 2}$ могут быть отрицательными, то есть возникающее в соответствующих элементах усилия будут препятствовать возвращению элемента в положение равновесия в случае его деформации. Но в данной ситуации это не играет никакой роли, так как действует совокупность элементов, результирующая сила которых направлена к положению равновесия.

3. Расчёты

Для примера воспользуемся набором коэффициентов при среднем значении коэффициента $k_2 = 50$ Н/м, соответственно $k_1 = 127,5$ Н/м, $k_\gamma = -2,97 \cdot 10^{-18}$ Н·м/рад², $k_{\gamma 2} = 5,32 \cdot 10^{-18}$ Н·м/рад².

Рассмотрим в качестве образца исследования фрагмент силицена прямоугольной формы, который подвергнем равномерной растягивающей нагрузке, приложенной к верхней грани образца. При этом узлы на нижней

грани фиксируются по направлению вдоль направления растяжения, оставаясь свободной по двум остальным (см. рис. 3). Для исключения смещения образца, как целого, вдоль оси OX , закрепим все узлы рассматриваемой структуры вдоль этого направления, которые расположены на плоскости симметрии ортогональной оси OY . В нашем случае она совпадает с плоскостью YOZ . Это также приведёт к тому, что при рассматриваемой нагрузке смещение вдоль направлений OX и OY будут симметричны относительно OY . Кроме того, чтобы избежать перемещения образца вдоль OZ , вдоль соответствующего направления закрепим узлы лежащие в плоскости XOY . Составим матрицу жёсткости системы из матриц жёсткости отдельных элементов и применим к ней перечисленные выше граничные условия путём обнуления пар строк и столбцов соответствующих фиксируемым степеням свободы и установим на пересечении соответствующей строки и столбца значение 1. Это приведёт к тому, что получившаяся матрица будет иметь определитель отличный от нуля, позволяя однозначно решить систему линейных алгебраических уравнений [7]:

$$[K] \cdot \bar{U} = \bar{F}, \quad (5)$$

где $[K]$ – это матрица жёсткости системы, $\bar{U}$ – вектор перемещений, $\bar{F}$ – вектор усилий, приложенных в каждой степени свободы.

Рис. 3. Схема нагружения и закрепления образца силицена

Полученные в результате разрешения системы перемещения используем для вычисления относительной деформации образца вдоль каждой из осей. Это относительная деформация вдоль направления действия сил ε_Y и поперечных деформаций ε_X и ε_Z .

$$\varepsilon_Y = \frac{\Delta l_Y}{l_Y}, \quad \varepsilon_X = \frac{\Delta l_X}{l_X}, \quad \varepsilon_Z = \frac{\Delta l_Z}{l_Z}, \quad (6)$$

где Δl_Y – среднее арифметическое смещения узлов с максимальной координатой Y вдоль соответствующего направления, а l_Y – размер образца вдоль этого направления, Δl_X – поперечная деформация образца вдоль направления OX , вычисляется как среднее арифметическое разностей смещения узлов вдоль оси OX , лежащих на боковых гранях с одной координатой Y , l_X – размер образца вдоль направления OX , определяется по самым удалённым узлам от плоскости симметрии YOZ , Δl_Z – поперечная деформация образца вдоль направления OZ , вычисляется как среднее арифметическое смещений узлов вдоль направления OZ , которые свободно смещаются по этой оси, l_Z – расстояние между двумя плоскостями ограничивающими структуру силицена и расположенными ортогонально оси OZ .

Другим необходимым параметром для расчётов является напряжение σ возникающее в плоскости ортогональной приложенной нагрузки

$$\sigma = \frac{\sum F_i}{S}, \quad (7)$$

где $\sum F_i$ – сумма всех приложенных усилий на верхней грани вдоль оси OY , а $S = l_X \cdot l_Z$ – площадь сечения образца ортогонального оси Y . За l_X и $l_Z = 0,041$ нм, будем принимать максимальные размеры вдоль соответствующих направлений. Подставив полученное значение в формулу связи деформации и напряжения

$$E \cdot \varepsilon_Y = \sigma, \quad (8)$$

получим значение продольного модуля упругости E .

Расчёт проводится для различных размеров образца с целью получения зависимости продольного модуля упругости от этих параметров.

Полученные результаты используем для вычисления коэффициентов поперечной деформации вдоль направлений X и Z . Они будут различны, так как рассматриваемая структура силицена не является изотропной. Расчёт будет проводиться по формулам:

$$\nu_X = -\frac{\varepsilon_X}{\varepsilon_Y}, \quad \nu_Z = -\frac{\varepsilon_Z}{\varepsilon_Y}, \quad (9)$$

где ε_X – относительная деформация вдоль оси OX , ε_Y – относительная деформация вдоль оси OY , ε_Z – относительная деформация вдоль оси OZ .

4. Заключение

Наблюдается выход расчётных показателей на асимптотические значения с ростом размеров образца. Получившиеся результаты позволяют определить верхнюю и нижнюю границу возможных значений упругих параметров, в зависимости от линейных размеров.

Рис. 4. Модуль продольной упругости.

Рис. 5. Коэффициент поперечного сжатия вдоль оси OX .

Рис. 6. Коэффициент поперечного сжатия силицена вдоль оси OZ .

Модуль продольной упругости (см. рис. 4) растёт с увеличением размеров, наибольший рост, с выходом на асимптоту, наблюдается с увеличением длины образца Y , в тоже время с ростом ширины значение меняется мало. Абсолютное отличие значений находятся в пределах: $0,70 < E < 1,66$ ТПа. Для коэффициентов поперечного сжатия (см. рис. 5 и 6) пределы изменения составляют соответственно $0,063 < v_x < 0,258$ и $8,41 < v_z < 29,72$.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственной программы научных

исследований ГПНИ «Ковергенция 2020» (подпрограмма «Методы математического моделирования сложных систем»).

Библиографический список:

1. **Грибов, Л.А.** Колебания молекул / Л.А. Грибов. – М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2009. – 544 с.
2. **Zhuravkov, M.A.** Finite element modeling of nanoscale structures / M.A. Zhuravkov, Yu.E. Nagorniy, V.I. Repchenkov // Nanotechnologies in Russia. – 2011. – V. 6. – № 9-10. – P. 597-606.
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. **Нагорный, Ю.Е.** Исследование механических свойств силицена в рамках модели валентно-силового поля / Ю.Е. Нагорный, Д.Н. Политаев // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2018. – Вып. 10. – С. 485- 491.
5. **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.
6. **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.
7. **Зенкевич, О.** Метод конечных элементов в технике / О. Зенкевич; пер. с англ. под ред. Б.Е. Победри. – М.: Мир, 1975. – 541 с.

References:

1. **Gribov, L.A.** Molecular vibrations / L.A. Gribov. – M.: Knizhniy dom «LIBROKOM», 2009. – 544 p. (In Russian).
2. **Zhuravkov, M.A.** Finite element modeling of nanoscale structures / M.A. Zhuravkov, Yu.E. Nagorniy, V.I. Repchenkov // Nanotechnologies in Russia. – 2011. – V. 6. – № 9-10. – P. 597-606.
3. **Nagorniy, Yu.E.** Investigation of mechanical properties of silicone in a central force field model / Yu.E. Nagorniy, D.N. Politaev // Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. – 2017. – I. 9. – P. 341-346. (In Russian).
4. **Nagorniy, Yu.E.** Investigation of mechanical properties of silicane in the valence force field model / Yu.E. Nagorniy, D.N. Politaev // Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. – 2018. – I. 10. – P. 485-491.
5. **Krivtsov, A.M.** Comparison of micromodels describing the elastic properties of diamond / A.M. Krivtsov, O.S. Loboda, S.S. Khakalo // Mekhanika tvyordogo tela. – 2012. – № 5. – P. 44-52. (In Russian).
6. **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.
7. **Zenkevich, O.** The finite element method in engineering science / O. Zenkevich; per. s angl. pod red. B.E. Pobedri. – M.: Mir, 1975. – 541 p. (In Russian).

**NUMERICAL SIMULATION OF MECHANICAL BEHAVIOR OF SILICENE IN A
GENERAL HARMONIC FIELD MODEL**

Y.E. Nagorny

Belarusian State University, Minsk, Belarus

DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.336

Abstract: The stiffness coefficients of two linear and two angular elements for the generic harmonic field model are derived from the stiffness coefficients of two linear elements for the central force field model. Recalculation is carried out through frequencies of three-node element assembled from these elements. Numerical modeling of uniform stretching of silicene samples was performed. Longitudinal and two transverse elastic modules are found to be dependent on linear dimensions.

Key words: general harmonic field, silicene, stiffness coefficients, natural frequency, Young's modulus, Poisson's ratio.

Нагорный Юрий Евгеньевич – старший преподаватель кафедры био- и наномеханики, Белорусский государственный университет

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

Поступила в редакцию/received: 15.08.2019; после рецензирования/revised: 26.10.2019; принята/accepted 15.11.2019.