

18,12

Отрицательный коэффициент Пуассона в непланарном фаграфене

© Л.А. Опенов¹, А.И. Подливаев^{1,2}

¹ Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“, Москва, Россия

² Научно-исследовательский институт проблем развития научно-образовательного потенциала молодежи, Москва, Россия

E-mail: LAOpenov@gmail.com

(Поступила в Редакцию 23 ноября 2016 г.)

Представлены результаты численного моделирования упругих свойств фаграфена — недавно предсказанного квазидвумерного аллотропа графена. Показано, что для планарной конфигурации фаграфена коэффициент Пуассона положителен, а для непланарной отрицателен. Как коэффициент Пуассона, так и модуль Юнга планарного фаграфена изотропны, а для непланарного характеризуются сильной анизотропией в плоскости монослоя.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 15-02-02764).

DOI: 10.21883/FTT.2017.06.44499.423

1. Введение

Отклик изотропных материалов на внешние механические воздействия полностью описывается двумя скалярными величинами: модулем Юнга Y (характеризующим способность вещества сопротивляться продольному растяжению или сжатию при упругой деформации) и коэффициентом Пуассона ν , равным отношению относительного поперечного сжатия к относительному продольному растяжению [1]. Для описания упругих свойств анизотропных твердых тел используется более сложный математический аппарат: уравнения линейной теории упругости в общем случае содержат тензор модулей упругости — симметричный тензор четвертого ранга. Это относится как к трехмерным, так и к популярным сейчас низкоразмерным системам. Тем не менее часто оказывается возможным ограничиться двумя упомянутыми параметрами: Y и ν . Так, для квазидвумерного монослоя графена [2] в литературе приводятся значения $Y \sim 1.0$ ТПа [3,4] и $\nu = 0.15-0.45$ (см. ссылки в [5]).

В большинстве материалов коэффициент Пуассона положителен. Однако есть и исключения, к числу которых относятся, например, фрактальные структуры и другие неоднородные среды (см. работу [6] и ссылки в ней). Недавно было показано, что при слабой деформации достаточно узких графеновых нанолент величина ν может быть отрицательной и достигать значения ~ -1.5 [7]. Причина этого эффекта заключается в том, что в графеновых образцах конечных размеров сжимающие краевые напряжения (обусловленные малыми координационными числами граничных атомов углерода) приводят к формированию волн поперечных смещений, локализованных вблизи границ и затухающих по мере удаления от них [8]. При растяжении образца в продольном направлении волнистые участки распрямляются,

и поэтому в поперечном направлении образец также расширяется (a не сжимается, как это обычно бывает), что и приводит к отрицательной величине ν .

Как показано в работе [9], недавно предсказанный новый планарный аллотроп графена — фаграфен [10] — неустойчив относительно смещений атомов в перпендикулярном монослою направлении, что приводит к формированию волн поперечных смещений с амплитудой ~ 1 Å и образованию непланарной конфигурации [9,11]. По аналогии с графеновыми нанолентами [7,8] можно ожидать, что коэффициент Пуассона у непланарного фаграфена будет отрицательным. Отметим, однако, принципиальное отличие фаграфена от графеновых лент. Если в последних отрицательный коэффициент Пуассона обусловлен граничными эффектами, то в фаграфене — „объемными“ (волны поперечных смещений распространяются на весь образец).

Целью настоящей работы является численный расчет коэффициента Пуассона в планарной и непланарной конфигурациях фаграфена, а также вычисление модуля Юнга для этих конфигураций.

2. Методы расчета

Планарный фаграфен мы моделировали прямоугольной сверхъячейкой, состоящей из $4 \times 4 = 16$ примитивных 20-атомных ячеек (рис. 1, a, b). При формировании в этой сверхъячейке волн поперечных смещений ее энергия понижается. Минимальную энергию имеет сверхъячейка с двумя волнами (рис. 2, a, b), которую мы и использовали для моделирования непланарной конфигурации фаграфена. Граничные условия выбирались периодическими по обоим направлениям в плоскости (XY) и свободными в поперечном направлении Z .

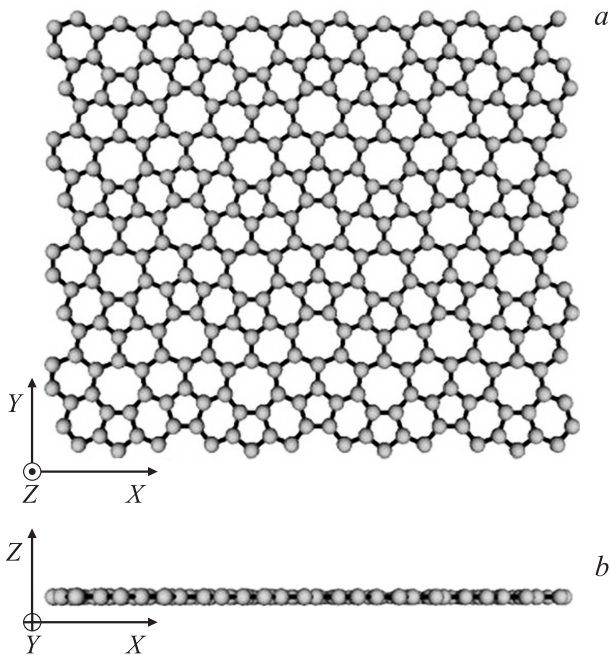


Рис. 1. 320-атомная сверхъчейка планарного фэграфена. Вид сверху (a) и сбоку (b).

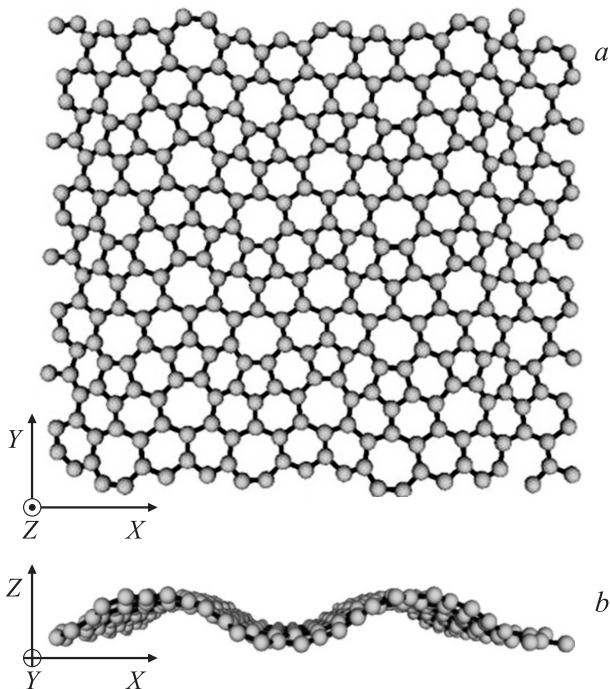


Рис. 2. То же, что на рис. 1, для непланарной конфигурации фэграфена. Энергия этой сверхъчейки на 3.1 eV (~ 0.01 eV/atom) ниже, чем у планарной.

Для расчета энергии сверхъчейки при заданных координатах атомов использовалась неортогональная модель сильной связи [12], учитывающая все четыре валентные орбитали каждого атома углерода и хорошо

зарекондовавшая себя при моделировании различных характеристик графена и других углеродных структур (см. работы [9,11,13] и ссылки в них).

3. Результаты и их обсуждение

Начнем с формул для вычисления ν и Y в квазидвумерных материалах, принимая во внимание возможную анизотропию этих величин в плоскости (XY) [14]. Пусть исходный образец имеет форму прямоугольника длиной L_0 (по оси X) и шириной W_0 (по оси Y). Если после растяжения образца вдоль оси X его длина и ширина становятся равными L и W соответственно, то коэффициент Пуассона в направлении Y вычисляется как

$$\nu_{YX} = -\varepsilon_Y/\varepsilon_X, \quad (1)$$

где $\varepsilon_X = (L - L_0)/L_0$ и $\varepsilon_Y = (W - W_0)/W_0$ — относительные деформации в направлении X и Y соответственно. Аналогично определяется коэффициент Пуассона в направлении X при растяжении вдоль оси Y

$$\nu_{XY} = -\varepsilon_X/\varepsilon_Y. \quad (2)$$

В нашем случае роль длины и ширины образца играют периоды сверхъчейки a и b соответственно. Следует отметить, что при вычислении ν_{YX} величина ε_X задается как входной параметр, а ε_Y находится из условия минимума энергии сверхъчейки, тогда как при расчете ν_{XY} , напротив, фиксируется ε_Y , а ε_X определяется, т.е. является выходным параметром. Вообще говоря, величина ν зависит от относительной деформации [7]. Мы ограничиваемся случаем малых деформаций (линейный режим), причем для определенности во всех расчетах полагаем входные параметры ε_X и ε_Y равными 10^{-3} .

Модуль Юнга в направлениях X и Y при слабых деформациях рассчитывается по формулам (аналогично случаю нанотрубок [15])

$$Y_X = \frac{2\Delta E}{Sd\varepsilon_X^2}, \quad Y_Y = \frac{2\Delta E}{Sd\varepsilon_Y^2}, \quad (3)$$

где $S = ab$ — площадь сверхъчейки, ΔE — приращение ее энергии при соответствующей деформации, d — толщина монослоя. Здесь следует иметь в виду, что для квазидвумерных систем понятие толщины образца лишено четкого смысла. Тем не менее эту величину часто используют, чтобы выразить модуль Юнга в привычных единицах (Па). Так, для графена и углеродных нанотрубок ее принимают равной 3.35 \AA [3,15] — расстоянию между соседними графеновыми слоями в графите. Мы также полагаем $d = 3.35 \text{ \AA}$ в выражениях (3), что дает нам возможность сопоставить механическую жесткость фэграфена и графена.

С целью проверки наших вычислительных алгоритмов и последующего сравнения с данными по графену на первом этапе мы рассчитали ν и Y в однослойном графене, используя для этого как прямоугольные, так и

ромбические сверхъячейки с периодическими граничными условиями. Мы нашли $\nu_{XY} = \nu_{YX} = 0.35$ и $Y_X = Y_Y = 0.97$ ТПа, что хорошо согласуется с приводимыми в литературе значениями $\nu = 0.34$ [7] и $Y = 1.0$ ТПа [3] (графен изотропен в плоскости монослоя).

Несмотря на кажущуюся анизотропию планарной конфигурации фаграфена (рис. 1, *a*), мы получили для нее (как и для графена) одинаковые (в пределах погрешности вычислений) значения $\nu_{XY} = \nu_{YX} = 0.38$ и очень близкие величины $Y_X = 0.84$ ТПа и $Y_Y = 0.86$ ТПа. Таким образом, по своим упругим характеристикам планарный фаграфен мало отличается от графена, будучи при этом почти изотропным. Чуть более низкая (на $\sim 15\%$) по сравнению с графеном величина модуля Юнга является, по-видимому, следствием наличия в фаграфене отсутствующих в графене пяти- и семиугольников из связей С–С, которые „смягчают“ двумерную кристаллическую решетку. Для практических приложений это не очень существенно, поскольку основной интерес представляют электронные характеристики планарного фаграфена, определяющиеся наличием в его зонной структуре так называемых дираковских конусов [10].

Анизотропия атомной структуры непланарного фаграфена в плоскости (XY) обусловлена наличием в нем волн поперечных смещений, минимумы и максимумы которых чередуются вдоль оси X (рис. 2, *b*). Это приводит к сильной анизотропии ν и Y при растяжении вдоль осей X и Y . Так, для коэффициента Пуассона мы получили $\nu_{YX} = -0.04$ и $\nu_{XY} = -0.50$, а для модуля Юнга $Y_X = 0.06$ ТПа и $Y_Y = 0.75$ ТПа. Обращает на себя внимание тот факт, что, несмотря на почти десятикратное различие абсолютных значений ν_{XY} и ν_{YX} , обе эти величины являются отрицательными, тогда как в планарном фаграфене они положительны. Причина аномально низкого модуля Юнга вдоль оси X кроется в соответствующей ориентации волн поперечных смещений, смягчающих образец в этом направлении (рис. 2, *b*). Модуль Юнга вдоль оси Y на порядок величины больше, хотя и несколько меньше, нежели в графене и планарном фаграфене.

4. Заключение

Выполненные в настоящей работе расчеты коэффициента Пуассона и модуля Юнга фаграфена свидетельствуют об изотропии упругих характеристик планарной конфигурации в плоскости (XY) и об их сильной (десятикратной) анизотропии в непланарной конфигурации. Основным результатом заключается в том, что в планарном и непланарном фаграфене коэффициент Пуассона имеет разный знак независимо от направления деформации. Это качественное различие можно использовать на практике для определения типа атомной конфигурации фаграфена.

Список литературы

- [1] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория упругости. Наука, М. (1987). 246 с.
- [2] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov. *Science* **306**, 666 (2004).
- [3] C. Lee, X. Wei, J.W. Kysar, J. Hone. *Science* **321**, 385 (2008).
- [4] А.Е. Галашев, О.Р. Рахманова. *УФН* **184**, 1045 (2014).
- [5] C.D. Reddy, S. Rajendran, K.M. Liew. *Nanotechnology* **17**, 864 (2006).
- [6] В.В. Новиков, К.В. Wojciechowski. *ФТТ* **41**, 2147 (1999).
- [7] J.-W. Jiang, H.S. Park. *Nano Lett.* **16**, 2657 (2016).
- [8] V.B. Shenoy, C.D. Reddy, A. Ramasubramaniam, Y.W. Zhang. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 245501 (2008).
- [9] А.И. Подливаев, Л.А. Опенов. Письма в *ЖЭТФ* **103**, 204 (2016).
- [10] Z. Wang, X.-F. Zhou, X. Zhang, Q. Zhu, H. Dong, M. Zhao, A.R. Oganov. *Nano Lett.* **15**, 6182 (2015).
- [11] Л.А. Опенов, А.И. Подливаев. *ФТТ* **58**, 1646 (2016).
- [12] М.М. Maslov, A.I. Podlivaev, K.P. Katin. *Mol. Simulation* **42**, 305 (2016).
- [13] Л.А. Опенов, А.И. Подливаев. *ФТТ* **58**, 821 (2016).
- [14] Б.Д. Аннин, Н.И. Остросаблин. *ПМТФ* **49**, 131 (2008).
- [15] О.Е. Глухова, О.А. Терентьев. *ФТТ* **48**, 1329 (2006).