12,13

Упругие волны в углеродных 2D-супракристаллах

© Р.А. Браже, А.И. Кочаев, Р.М. Мефтахутдинов

Ульяновский государственный технический университет,
Ульяновск, Россия

E-mail: a.kochaev@ulstu.ru

(Поступила в Редакцию 13 января 2011 г.)

Вычислены модули упругости и скорости распространения упругих волн в 2D-супракристаллических наноаллотропах углерода. Показано, что в sp^2-наноаллотропах эти скорости близки к значениям в графене и вдвое превышают скорости распространения объемных упругих волн в монокристаллическом алмазе. В углеродных 2D-супракристаллических sp^3-наноаллотропах скорости распространения как продольных, так и поперечных упругих волн в разы меньше, чем в sp^2-наноаллотропах.

Работа поддержана грантом РФФИ (проект № 10-02_97002-р_поволжье_а).

В работе [1] с помощью модифицированного метода Давыдова [2] нами были рассчитаны константы центрального (α) и нецентрального (β) взаимодействий атомов углерода в 2D-супракристаллах в сравнении с графеном. Используя эти константы и руководствуясь основанной на модели Китинга [3] схемой, предложенной в другой работе Давыдова [4], можно определить упругие постоянные описанных в [1] 2D-супракристаллов и оценить скорости распространения в них упругих волн, что и составляет цель настоящей работы. При этом необходимо получить отсутствующие в [4] выражения через α и β для модулей упругости 2D-супракристалла типа $(X)_{44}$, принадлежащего к классу симметрии $4mm$.

Соответствующая структура представлена на рис. 1. Помещая начало координат в „нулевом“ атомном комплексе, можно найти энергии центрального W_C и нецентрального W_{NC} взаимодействий [4]:

$$W_C = \frac{\alpha}{d^2}\sum_{i=1}^{4}\left(\mathbf{R}_{0i}^2 - \mathbf{r}_{0i}^2\right)^2,$$

$$W_{NC} = \frac{\beta}{d^2}\sum_{i.j>1}^{4}\left(\mathbf{R}_{0i}\mathbf{R}_{0j} - \mathbf{r}_{0i}\mathbf{r}_{0j}\right)^2. \tag{1}$$

Здесь α и β — константы центрального и нецентрального взаимодействий соответственно, d — длина ребра супраячейки (выражается через длину связи), где $\mathbf{R}_{0i} = \mathbf{r}_{0i} + \delta\mathbf{r}_{0i}$, $\delta\mathbf{r}_{0i} = u_{0i}\mathbf{i} + v_{0i}\mathbf{j}$ — смещение i-го атомного комплекса при деформации решетки. Координаты конца вектора смещения u_{0i} и v_{0i} по осям x и y соответственно имеют вид

$$u_{01} = u' - \frac{\sqrt{2}}{2}de_{xx} + \frac{\sqrt{2}}{4}de_{xy},$$

$$u_{02} = u' + \frac{\sqrt{2}}{2}de_{xx} + \frac{\sqrt{2}}{4}de_{xy},$$

$$u_{03} = u' + \frac{\sqrt{2}}{2}de_{xx} - \frac{\sqrt{2}}{4}de_{xy},$$

$$u_{04} = u' - \frac{\sqrt{2}}{2}de_{xx} - \frac{\sqrt{2}}{4}de_{xy},$$

$$v_{01} = v' + \frac{\sqrt{2}}{2}de_{yy} - \frac{\sqrt{2}}{4}de_{xy},$$

$$v_{02} = v' - \frac{\sqrt{2}}{2}de_{yy} + \frac{\sqrt{2}}{4}de_{xy},$$

$$v_{03} = v' - \frac{\sqrt{2}}{2}de_{yy} + \frac{\sqrt{2}}{4}de_{xy},$$

$$v_{04} = v' - \frac{\sqrt{2}}{2}de_{yy} - \frac{\sqrt{2}}{4}de_{xy}, \tag{2}$$

где u' и v' — внутренние смещения, а e_{xx}, e_{yy}, e_{xy} — компоненты тензора деформации.

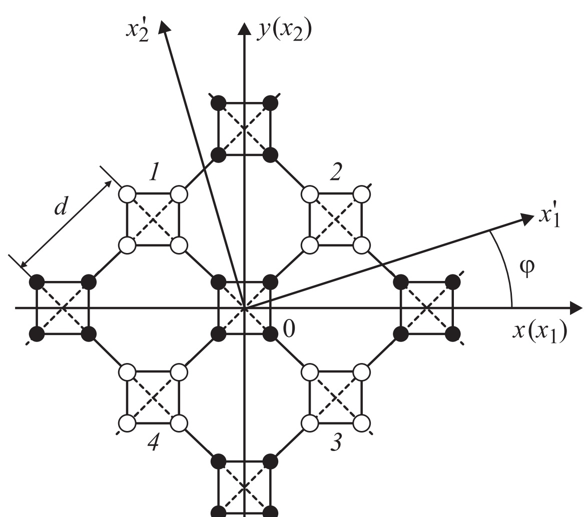


Рис. 1. Установка структуры $(X)_{44}$ относительно кристаллофизических осей x, y. *1–4* — номера атомных комплексов.

Разложим (1) с учетом (2) в ряд по u_{0i} и v_{0i}, ограничившись членами второго порядка, затем минимизируем полную упругую энергию $W = W_C + W_{NC}$ по внутренним смещениям, полагая $\partial W/\partial u' = \partial W/\partial v' = 0$. Это даст нам выражение для плотности упругой энергии $w = W/S$ в функции α, β, e_{xx}, e_{yy}, e_{xy}, e_{xy}, где $S = d^2$ — площадь, приходящаяся на одну супраячейку. Его можно сравнить с соответствующим выражением для двумерной структуры класса $4mm$ из [5]

$$w = \frac{1}{2}\lambda_{xxxx}(e_{xx}^2 + e_{xy}^2) + \lambda_{xxyy}e_{xx}e_{xy} + 2\lambda_{xyxy}e_{xy}^2. \quad (3)$$

Так как в (3) $\lambda_{xxxx} = c_{11}$, $\lambda_{xxyy} = c_{12}$, $\lambda_{xyxy} = c_{33}$ [6], получаем выражение для отличных от нуля компонентов тензора модулей упругости для 2D-супракристалла типа $(X)_{44}$ в виде

$$c_{11} = \frac{4(2\alpha + 3\beta)}{(1+\sqrt{2})^2}, \; c_{12} = \frac{4(2\alpha - \beta)}{(1+\sqrt{2})^2}, \; c_{33} = \frac{2\alpha + \beta}{(1+\sqrt{2})^2}. \quad (4)$$

Применение данной схемы к 2D-супракристаллам с гексагональной супраячейкой [1] приводит к таким же выражениям для независимых модулей упругости, что и для графеноподобных систем [4],

$$c_{11} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(4\alpha + \beta + 18\,\frac{\alpha\beta}{4\alpha + \beta}\right),$$

$$c_{12} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(4\alpha + \beta - 18\,\frac{\alpha\beta}{4\alpha + \beta}\right). \quad (5)$$

Перейдем теперь к рассмотрению особенностей распространения упругих волн в 2D-супракристаллах, трактуя их как двумерный континуум, в котором возможны смещения частиц лишь в плоскости кристалла, как это неявно предполагалось выше. Оболоченные волны типа Лява и др. на этом этапе из рассмотрения исключаем.

В произвольном направлении x_1' (рис. 1) могут распространяться в общем случае одна квазипродольная и одна квазипоперечная упругие волны, описываемые уравнением Грина–Кристоффеля [7]

$$\rho_2 v^2 u_\alpha = \lambda_{\alpha\beta\gamma\delta}\alpha_{1\beta}\alpha_{1\delta}u_\gamma, \quad (6)$$

где ρ_2 — двумерная (в данном случае) плотность среды, v — фазовая скорость волны, u_α и u_γ — компоненты смещения частиц, $\lambda_{\alpha\beta\gamma\delta}$ — тензор модулей упругости, $a_{1\beta}$ и $a_{1\delta}$ — элементы матрицы-столбца направляющих косинусов

$$\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi \\ \sin\varphi \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Скорости квазипродольной и квазипоперечной волны являются корнями соответствующего характеристического уравнения

$$|\lambda_{\alpha\beta\gamma\delta}a_{1\beta}a_{1\delta} - \rho_2 v^2| = 0 \quad (8)$$

и зависят от модулей упругости кристалла, его плотности и направляющих косинусов. Подобная задача успешно решена для трехмерных кристаллов. Более того, существуют компьютерные программы построения 3D-поверхностей фазовых скоростей упругих волн, распространяющихся в таких кристаллах [8,9]. Они могут быть использованы и для построения 2D-линий фазовых скоростей в двумерных кристаллах. Направления распространения чисто продольных и чисто поперечных упругих волн соответствуют экстремальным значениям соответствующих фазовых скоростей и перпендикулярны касательным к линиям скоростей в точках экстремумов [10].

Аналитические методы расчета направлений распространения чистых мод упругих волн предложены в работах [11–16]. Их применение приводит для эффек-

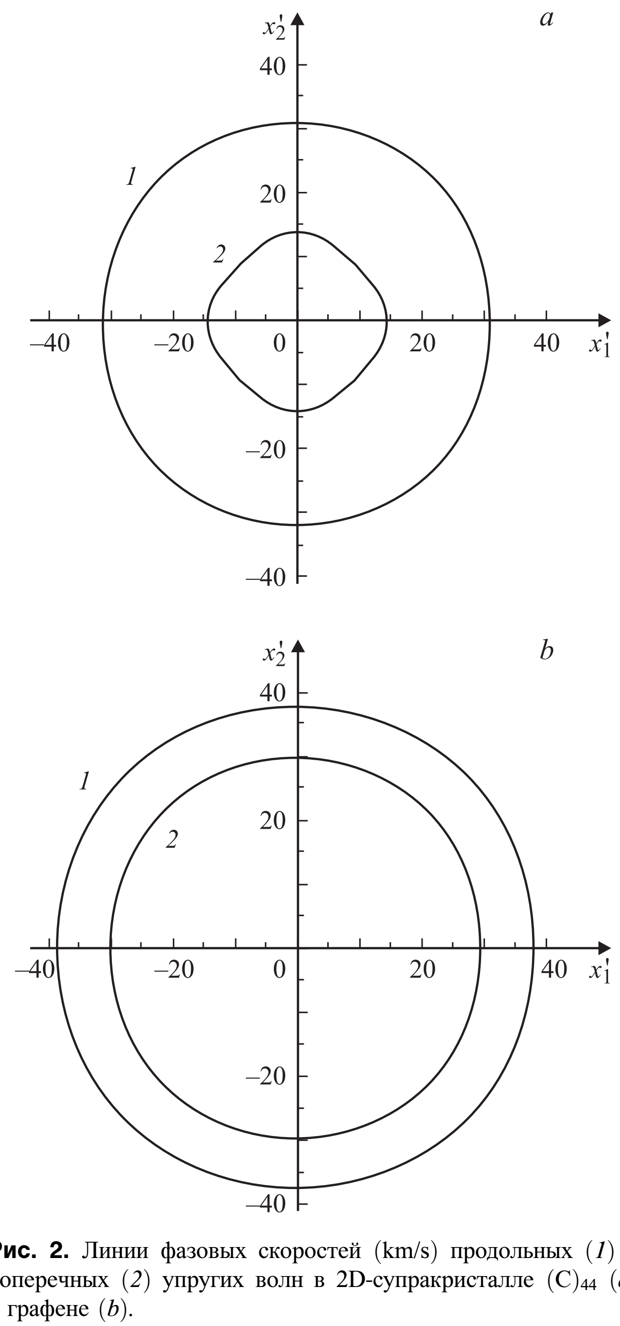


Рис. 2. Линии фазовых скоростей (km/s) продольных (*1*) и поперечных (*2*) упругих волн в 2D-супракристалле (C)$_{44}$ (*a*) и графене (*b*).

Таблица 1. Удельные поверхности углеродных 2D-структур

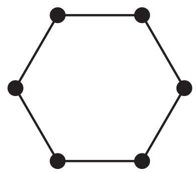
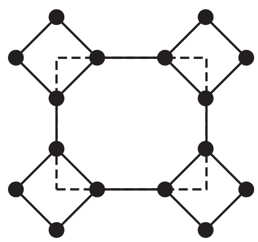
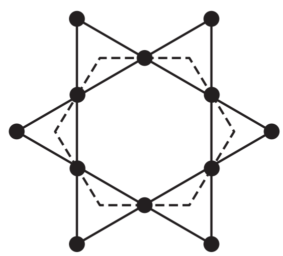
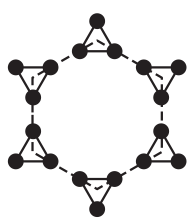
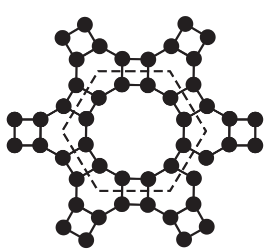
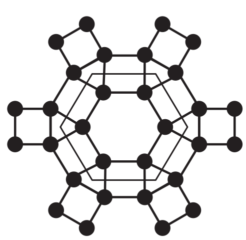
Структура		Удельная поверхность	
Вид ячейки	Обозначение	Формула	s, $10^6\,\mathrm{m^2/kg}$
	$(C)_6$	$s = \frac{3\sqrt{3}}{2}\,\frac{N_A}{\mu}\,l^2$	2.63
	$(C)_{44}$	$s = \frac{1}{2}\,(1+\sqrt{2})^2\,\frac{N_A}{\mu}\,l^2$	2.99
	$(C)_{63(6)}$	$s = \frac{4\sqrt{3}}{2}\,\frac{N_A}{\mu}\,l^2$	4.01
	$(C)_{63(12)}$	$s = \frac{\sqrt{3}}{6}\,(2+\sqrt{3})^2\frac{N_A}{\mu}\,l^2$	5.79
	$(C)_{664}$	$s = \frac{\sqrt{3}}{12}\,(3+\sqrt{3})^2\frac{N_A}{\mu}\,l^2$	3.94
	$(C)_{634}$	$s = \frac{\sqrt{3}}{6}\,(1+\sqrt{3})^2\frac{N_A}{\mu}\,l^2$	5.09

Таблица 2. Характеристики упругих волн в углеродных 2D-структурах

Параметр	$(C)_6$	$(C)_{44}$	$(C)_{63(6)}$	$(C)_{63(12)}$	$(C)_{664}$	$(C)_{634}$
c_{11}, N/m	533	328	9.84	75.7	361	10.5
c_{12}, N/m	331	215	6.15	47.1	226	6.52
c_{33}, N/m		68				
v_L, 10^3 m/s	37.4	31.3−31.9	6.30	20.9	37.7	7.30
v_T, 10^3 m/s	29.5	13.0−14.3	5.00	16.5	29.8	5.80

тивных модулей упругости в случае чисто продольной и чисто поперечной волн в 2D-кристаллах к следующим выражениям:

класс $4mm$

$$\lambda'_{1111} = (\sin^4\varphi + \cos^4\varphi)c_{11} + 2\sin^2\varphi\cos^2\varphi(c_{12} + 2c_{33}),$$

$$\lambda'_{2121} = (\cos^4\varphi + \sin^4\varphi)c_{33} + 2\sin^2\varphi\cos^2\varphi(c_{11} - c_{12} - c_{33}), \tag{9}$$

$$\varphi = n\frac{\pi}{4}, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots, 7;$$

класс $6mm$

$$\lambda'_{1111} = c_{11}, \qquad \lambda'_{2121} = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12}). \tag{10}$$

Скорости распространения чисто продольной и чисто поперечной волн соответственно находятся из выражений

$$v_L = \sqrt{\lambda'_{1111}s}, \qquad v_T = \sqrt{\lambda'_{2121}s}, \tag{11}$$

где $s = \rho_2^{-1}$ — удельная поверхность кристалла. Ее значения для углеродных 2D-суперкристаллов в сравнении с графеном $(\mathrm{C})_6$ представлены в табл. 1. В соответствующих формулах N_A — число Авогадро, $\mu = 0.012\,\mathrm{kg/mol}$ — молярная масса (углерода), l — длина связи [1].

На рис. 2 показаны линии фазовых скоростей упругих волн в 2D-суперкристалле $(\mathrm{C})_{44}$ и графене, построенные с использованием компьютерной программы, основанной на решении уравнения Грина–Кристоффеля. Из него видно, что в структуре $(\mathrm{C})_{44}$, принадлежащей к классу симметрии $4mm$, существуют четыре направления (через каждые 45°), в которых могут распространяться чистые моды упругих волн. Графен, как и остальные 2D-суперкристаллы, принадлежащие к классу симметрии $6mm$, является акустически изотропной двумерной средой.

В табл. 2 представлены результаты вычислений скоростей распространения продольной и поперечной упругих волн в углеродных 2D-структурах из табл. 1 по формулам (9)–(11). Края диапазона значений скорости соответствуют чисто продольным и чисто поперечным волнам, распространяющимся под углами $\varphi_1 = 0$ и $\varphi_2 = 45°$ к оси x_1.

Из анализа результатов, представленных на рис. 2 и в табл. 2, следует, что скорости распространения упругих волн в графене почти вдвое превышают их значения для объемных волн в алмазе [17]. Близки к ним значения скоростей упругих волн и в 2D-суперкристаллах $(\mathrm{C})_{44}$, $(\mathrm{C})_{664}$. Правда, за счет малой величины c_{33} по сравнению с c_{11} и c_{12} скорость чисто поперечной волны в структуре $(\mathrm{C})_{44}$ существенно меньше, чем в графене и в структуре $(\mathrm{C})_{664}$. Несколько меньшими значениями характеризуются скорости распространения упругих волн в структуре $(\mathrm{C})_{63(12)}$. Что касается двумерных углеродных sp^3-наноаллотропов, то в них скорости распространения упругих волн в несколько раз меньше, чем в sp^2-наноаллотропах углерода, что связано с их гораздо худшими упругими характеристиками [1].

Приведенные результаты носят оценочный характер и нуждаются в экспериментальной верификации. Тем не менее они представляют интерес с точки зрения перспектив использования 2D-суперкристаллов в устройствах двумерной акустоэлектроники и акустооптики.

Список литературы

[1] Р.А. Браже, А.А. Каренин, А.И. Кочаев, Р.М. Мефтахутдинов. ФТТ **53**, 7, 1406 (2011).
[2] С.Ю. Давыдов. ФТТ **52**, 756 (2010).
[3] P.N. Keating. Phys. Rev. **145**, 637 (1966).
[4] С.Ю. Давыдов. ФТТ **52**, 172 (2010).
[5] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория упругости. Наука, М. (1987). 248 с.
[6] Дж. Най. Физические свойства кристаллов. Мир, М. (1967). 386 с.
[7] E.B. Christoffer. Ann. di matematica pura ed applicata **8**, 193 (1877).
[8] M. Duarte, C. Piedrahita, T. Salinas, H. Altamar, K. Pachano. Earth Sci. Res. J. **8**, *1*, 63 (2004).
[9] Laboratory for scientific visual analysis. URL: http://www.sv.vt.edu.
[10] T.C.T. Ting. Acta Mechanica **185**, 147 (2006).
[11] F.E. Borgnis. Phys. Rev. **98**, 1000 (1955).
[12] K. Brugger. J. Appl. Phys. **36**, 759 (1965).
[13] Z.P. Chang. J. Appl. Phys. **39**, 5669 (1968).
[14] Р.А. Браже, М.А. Григорьев, В.И. Наянов. ФТТ **17**, 886 (1975).
[15] Р.А. Браже, А.И. Кочаев. Изв. вузов. Поволжский регион. Физ.-мат. науки **3**, 116 (2010).
[16] Р.А. Браже, А.И. Кочаев. Радиоэлектронная техника. Межвуз. сб. науч. тр. УлГТУ, Ульяновск (2010). Т. 40.
[17] C.M. Flannery, M.D. Whitfield, R.B. Jackman. Semicond. Sci. Technol. **18**, S 86 (2003).