

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра математической теории
упругости и биомеханики

**Исследование модуля сдвига углеродных молекулярных структур в виде
многослойного графена с вертикально ориентированными углеродными
нанотрубками**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента 4 курса 431 группы
направления 01.03.03 – Механика и математическое моделирование
механико-математического факультета
Федорова Максима Алексеевича

Научный руководитель
к.ф.-м.н., доцент

подпись, дата

А.С. Колесникова

Зав. кафедрой
д.ф.-м.н., профессор

подпись, дата

Л.Ю. Коссович

Саратов 2024

Введение

Несмотря на широкие перспективы применения углеродных наноструктур в электронике, специалисты при попытке внедрения этих структур в электронику столкнулись с рядом научно-технических проблем, требующих своевременного решения. В качестве материала, который должен решить эти проблемы была выдвинута углеродная молекулярная структура в виде многослойного графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками.

Также на данный момент очень востребованным является направление гибкой электроники. В частности, гибкая наноэлектроника. Гибкие схемы, созданные на базе наноструктур могут применятся в совершенно разных областях. От создания дисплеев и камер для телефонов, мониторов и телевизоров до высокоэффективных солнечных панелей. Также важным возможным направлением может является применение гибкой наноэлектроники в сверхчувствительных биосенсорах. Использование углеродных молекулярных структур в виде многослойного графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками в гибкой электронике может принести огромную пользу, но для этого должны быть хорошо известны все ее механические свойства.

На данный момент активно изучается лишь модуль Юнга данной структуры, что можно увидеть в работах. Информации про модуль сдвига подобных структур гораздо меньше и исследуется только в работе, что говорит о необходимости дополнительного исследования данной характеристики.

В связи с этим **целью данной работы** является исследование модуля сдвига углеродной молекулярной структуры в виде многослойного графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками (ВО-УНТ).

Задачи:

1. Провести анализ актуальности исследования модуля сдвига углеродной молекулярной структуры в виде многослойного графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками.
2. Создать модель углеродной молекулярной структуры в виде многослойного графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками диаметром 1,2 нм и 1,4 нм
3. Написать программу для реализации сдвига атомов в молекулярной структуре.
4. Используя программный пакет Lammps рассчитать полную энергию исследуемой структуры.
5. Исследовать модуль сдвига молекулярной структуры при увеличении деформации сдвига.
6. Анализ, полученных результатов.

Объектом исследования является молекулярная углеродная структура в виде многослойного графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками с размерами графенового листа 4,4 нм x 4,9 нм. И двумя типами УНТ с диаметрами 1,2 нм и 1,4 нм.

Структура и объем работы. Выпускная квалификационная работа состоит из введения, 4 глав, заключения, списка использованных источников, включающего 23 наименования и двух приложений. Работа изложена на 44 листах машинописного текста, содержит 18 рисунков и 5 таблиц.

Основное содержание

Во введении обосновывается актуальность, приводится информация о существующих исследованиях рассматриваемой структуры.

В первой главе описываются методы получения молекулярных структур в виде многослойного графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками, производится краткий обзор результатов исследования механических свойств механических свойств в других работах.

Во второй главе приводится метод исследования. В данной работе используется один из методов молекулярной механики с использованием потенциала AIREBO. Для моделирования процессов молекулярной динамики используется программный пакет LAMMPS.

С помощью метода молекулярной механики, можно находить геометрические характеристики и энергии многоатомных систем. Полная энергия структуры при данном подходе представляет собой сумму энергетических термов: энергия химического взаимодействия, энергия валентных углов, энергия торсионного взаимодействия, энергия ван-дер-ваальсового взаимодействия, энергия электростатического взаимодействия.

В методе AIREBO в выражении для полной энергии системы потенциал REBO, который описывает химическое взаимодействие атомов, дополняется еще двумя дополнительными термами (терм, описывающий Ван-дер-Ваальсово взаимодействие, и терм, описывающий торсионное взаимодействие).

Определение модуля сдвига структуры с помощью определения энергии деформации будет осуществляться по формуле:

$$G = \frac{1}{V_0} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \gamma_{xy}^2} \right)_{\gamma_{xy}=0}, \quad (1)$$

Третья глава посвящена описанию модели исследования и рассматриваемые направления сдвига. Визуализация углеродной молекулярной структуры представлена на рисунке 1 с помощью программы ovito. Различие двух перпендикулярных краев рассматриваемой структуры представлен на рисунке 2. Сдвиг будет проводиться в двух направлениях, которые представлены на рисунках 3 и 4. Исследование модуля сдвига вдоль двух разных краев структуры необходимо из-за различий в механических характеристиках графена и структур, построенных на его основе.

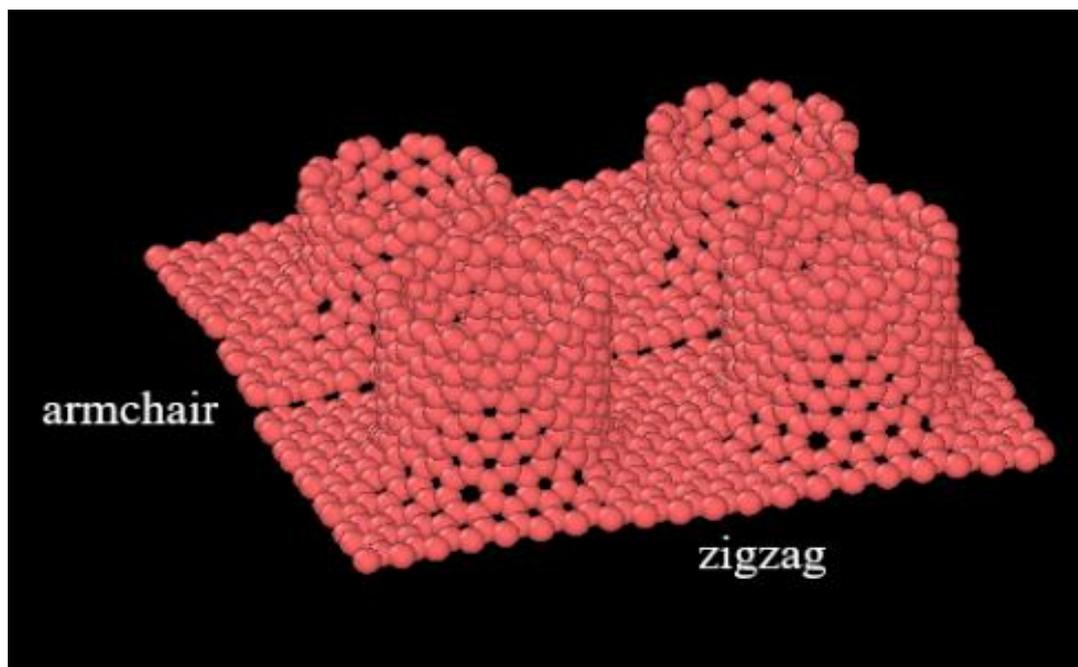


Рисунок 1 – Идеализированная молекулярная структура квадратной формы с различными типами УНТ

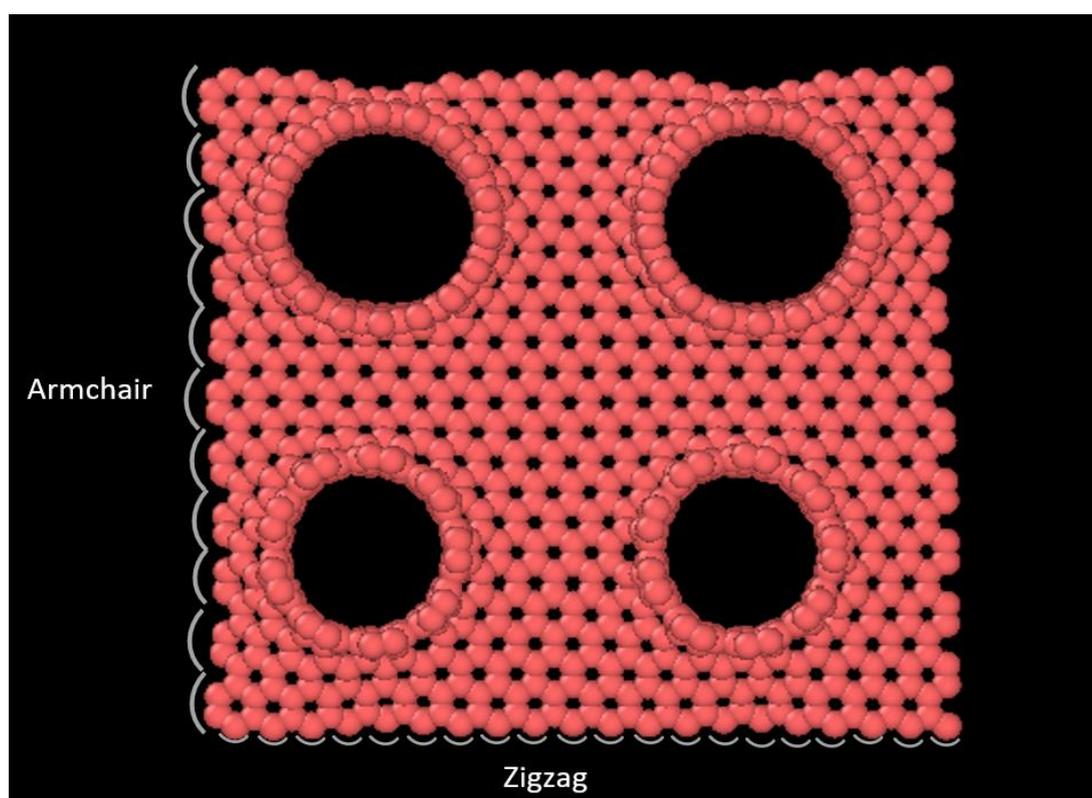


Рисунок 2 – Визуализация armchair и zigzag края в углеродных молекулярных структурах

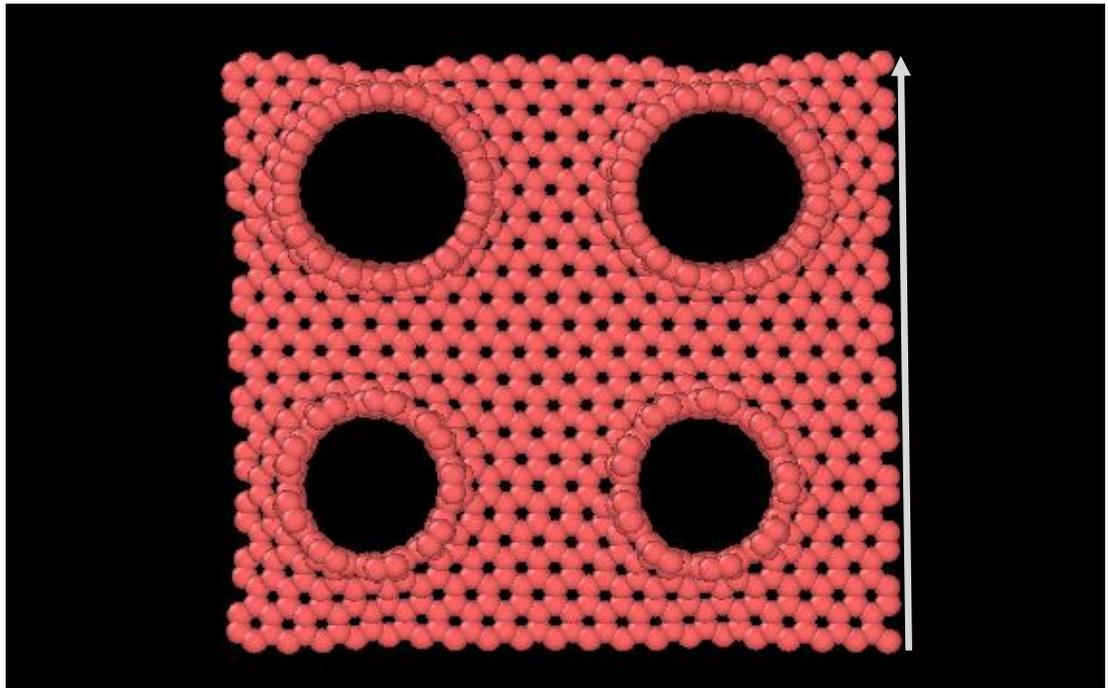


Рисунок 3 – Направление сдвига вдоль armchair края

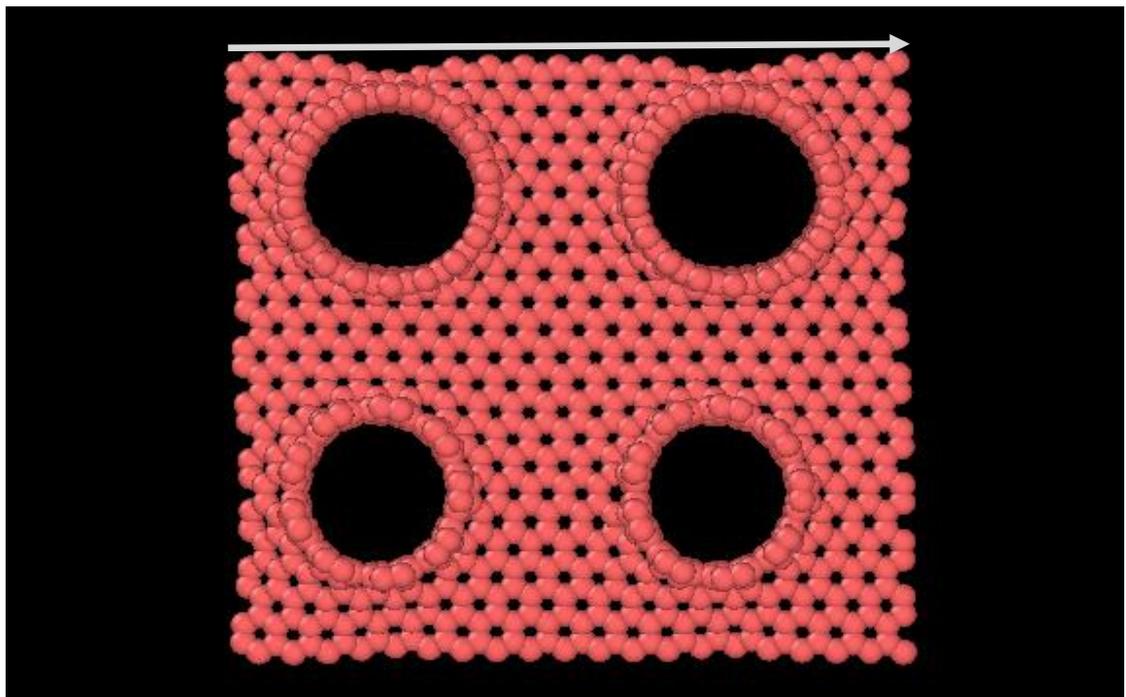


Рисунок 4 – Направление сдвига вдоль zigzag края

В четвертой главе представлены результаты исследования и проводится анализ этих результатов.

Результаты исследования зависимости модуля сдвига углеродных молекулярных структур в виде многослойного графена с вертикально

ориентированными углеродными нанотрубками от величины сдвиговых деформаций представлены на рисунках 5 и 6. Выполнена полиномиальная аппроксимация 5 степени для того, чтобы определить тенденцию изменения модуля сдвига в зависимости от величины деформации и нивелировать погрешности нахождения энергии. Объем исследуемого композита составил $1,6362E-27 \text{ м}^3$.

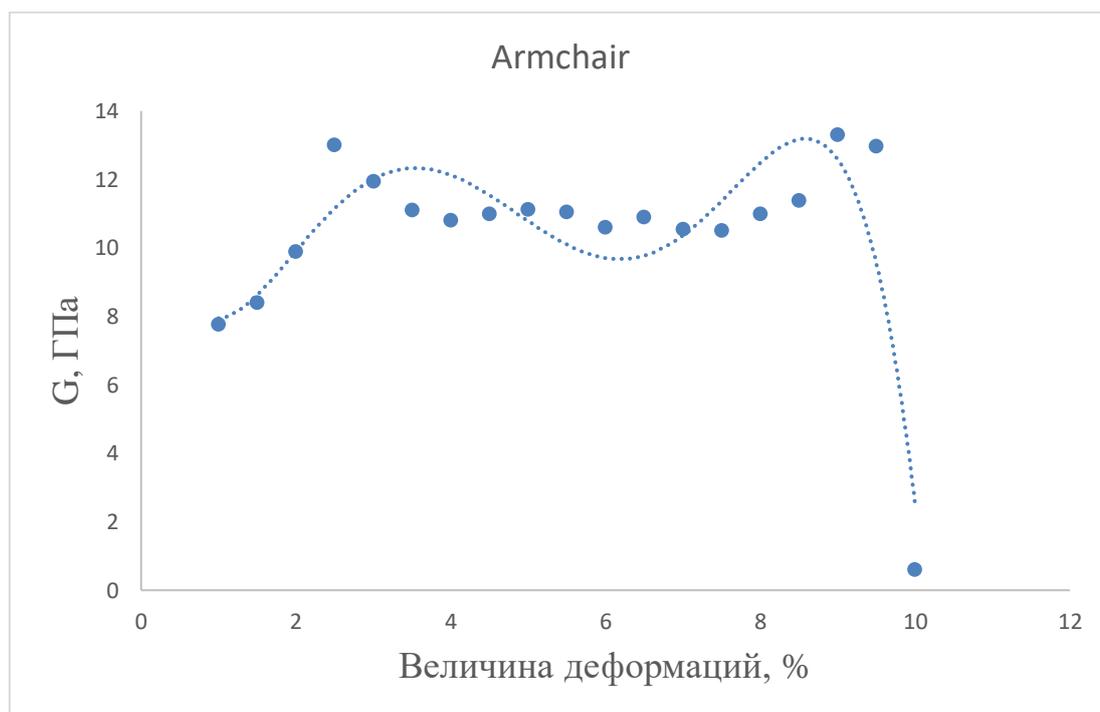


Рисунок 5 – График аппроксимации зависимости модуля сдвига вдоль armchair края от величины сдвига

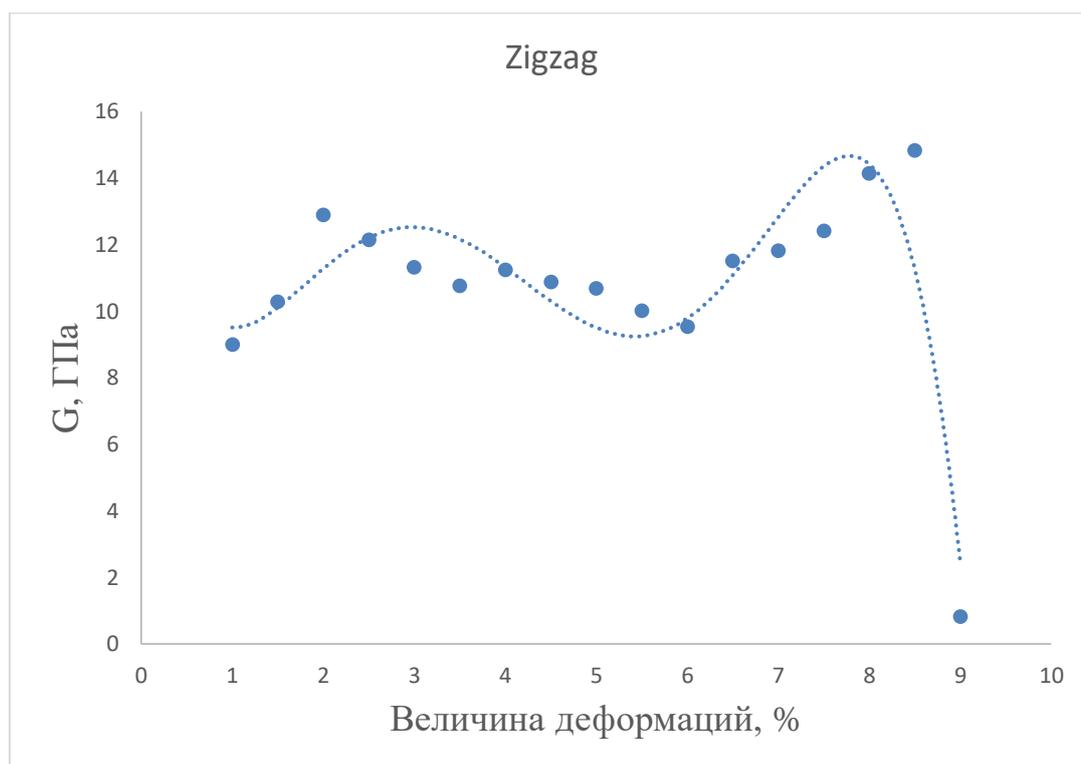


Рисунок 6 - График аппроксимации зависимости модуля сдвига вдоль zigzag края от величины сдвига

Заключение

С помощью методов компьютерного моделирования в работе впервые проведено теоретическое исследование зависимости модуля сдвига молекулярной углеродной структуры в виде многослойного графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками. Из результатов, полученных в ходе выполнения работы можно сделать следующие выводы.

1. При деформациях меньше 2,5 % модуль сдвига растет, и наблюдаются упругие деформации. Для упругих деформаций модуль сдвига вдоль zigzag края больше, чем для armchair края.
2. Максимальный модуль сдвига достигается при деформациях в 2% для zigzag края и 2,5% armchair края.
3. При деформациях более 2,5% функция аппроксимации сначала выходит примерно на прямую и модуль сдвига вдоль обоих краев становится

примерно равен 10,9 Гпа и наблюдаются пластические деформации. После этого идет увеличение модуля.

4. При деформациях близких к разрушающим модуль сдвига начинает расти.

5. При сдвиговых деформациях в 9% вдоль zigzag края и 10% вдоль armchair края происходит разрушение структуры, сопровождающееся резким уменьшением энергии и модуля сдвига.

6. Полученные результаты хорошо согласуются с результатами в работе. Отличия заключаются в геометрических размерах исследуемого композита (диаметром УНТ).

Несмотря на сходство аппроксимирующих функций для сдвига по двум разным направлениям есть несколько важных различий:

1. Модуль сдвига данной молекулярной структуры вдоль zigzag края больше, чем вдоль armchair края.

2. Для сдвига вдоль zigzag края пластические деформации достигаются раньше.

3. Разрушение структуры при сдвиге вдоль zigzag края также наступает раньше.

В приложениях предоставлен код программы на языке Python, с помощью которой осуществлялся сдвиг молекулярной структуры, а также исполняемый файл LAMMPS, в котором задаются все необходимые параметры для моделирования процессов молекулярной динамики.