

Секция «Математика и механика»

Использование методов молекулярной динамики для определения механических параметров материала

Пендюр Д.А.¹, Кавешникова В.В.²

1 - Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,

Механико-математический факультет, 2 - МГУ им. Ломоносова,

Механико-математический факультет, Москва, Россия

E-mail: pendyurda@yandex.ru

В последние годы, в связи с большим практическим и теоретическим интересом к наноструктурным объектам для изучения их термомеханических свойств активно используются методы молекулярной динамики. Это объясняется как экспериментальными трудностями в изучении таких объектов, так и новыми возможностями, которые появились сейчас благодаря развитию новых теоретических методов и вычислительной техники.

В частности, одним из интереснейших объектов, который уже сейчас активно используется в нанoeлектронике, и весьма перспективен в будущем, является лист графена, обладающий уникальными электромагнитными свойствами. Исследования графена начали проводить ещё в 1947 году, но основные достижения были получены недавно, после публикации в Science статьи, где сообщалось о получении графена на подложке окисленного кремния.

Для решения задач о нахождении упругих параметров графена был использован следующий алгоритм. В начале, лист нагревается до температуры 300 К, при помощи включения в схему интегрирования уравнений движения термостата Нозе-Гувера, и эта температура поддерживается в дальнейшем. К листу не прикладываются никакие нагрузки. В результате, через некоторое время, атомы листа занимают равновесное положение. Далее к краевым атомам листа прикладывается некоторая сила f , направлена в разные стороны для противоположных концов листа, после чего листу даётся некоторое время на релаксацию. После установления равновесных значений размеров f увеличивается на заданный шаг, и процедура повторяется. В течение всего процесса такой ступенчатой нагрузки производится запись изменения значений компонент тензора деформации. На рис. 2 и 3, соответственно, изображено прикладывание сил для растяжения и сдвига, чтобы в итоге посчитать модуль Юнга и коэффициент Пуассона соответственно и результаты данных действий. Для проверки корректности расчёта, а так же того, находится ли значение прикладываемой силы в рамках применимости теории линейной упругости, производится ступенчатая разгрузка листа при включенном термостате и тем же заданным шагом (только обратным по знаку). Такая процедура ступенчатой нагрузки, а потом разгрузки листа, для достоверности вычислений проводится несколько раз. По полученным данным строится диаграмма зависимости величины деформации от прикладываемого напряжения. В итоге, пути нагрузки и разгрузки должны практически совпадать.

Литература

1. 1. Awasthi, Amnaya P., Lagoudas, Dimitris C., Hammerand, Daniel C.// Modeling of graphene polymer interfacial mechanical behavior using molecular dynamics. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2009.

2. 2. Allen M. P., Tildesley D. J. //Computer simulation of liquids, 1987
3. 3. Novoselov K. S. et al. //Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films, Science 2004, 306(5696), pp. 666-669.