

УДК 538.9

## МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРУГИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПСЕВДОГРАФЕНОВ

Абраменко Н.Д. (Университет ИТМО), Рожков М.А. (Университет ИТМО), Романов А.Е. (Университет ИТМО), Колесникова А.Л. (Университет ИТМО),

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Романов А.Е.

(Университет ИТМО)

**Введение.** Углерод способен образовывать множество аллотропов - твердых тел из одного и того же элемента, различного по строению. Например, алмаз - самый твердый природный материал; графит, который имеет широкое применение (например, в качестве сухой смазки и проводника), и др. В зависимости от своей внутренней структуры эти аллотропы могут демонстрировать различное поведение электронов на внешней электронной оболочке, ответственных за взаимодействие между атомами углерода.

Если взять один изолированный атомный слой графита, то мы получим графен - двумерный кристалл углерода с гексагональной решеткой. Графен обладает многообещающими прикладными свойствами: необычными электронными свойствами, высокой теплопроводностью и уникальным набором механических характеристик. Его успешный синтез привлек большое внимание и ознаменовал активный рост интереса к изучению двумерных кристаллов.

Физическими и механическими свойствами подобных материалов можно управлять с помощью внешних воздействий: механических, электрических, магнитных и / или путем изменения локального кристаллического совершенства кристаллической решетки. Дефекты кристаллической решетки, в свою очередь, изменяют механические свойства (что аналогично эффектам, наблюдаемым в обычных трехмерных кристаллах), способствуя в то же время изменению электропроводности и теплопроводности данных кристаллов.

Одним из способов теоретического предсказания свойств данных материалов является компьютерное моделирование. Широкой популярностью пользуются два метода – теория функционала плотности и молекулярная динамика. Первый метод позволяет точно рассчитывать фундаментальные характеристики материала, в т.ч. упругие константы, но при этом потребляет большое количество ресурсов и времени. Второй метод позволяет упростить вычисления, используя подобранные потенциалы межатомного взаимодействия – это модели, приблизительно описывающие межатомное взаимодействие в материале. С помощью данного подхода рассчитывают механические характеристики материала и рассматривают его структуру при механическом воздействии.

Целью данного обзора является расчет упругих констант для псевдографенов G5-7v1 и G-5-6-7v2 с помощью метода молекулярной динамики. В работе будет проведено сравнение различных существующих на данный момент потенциалов межатомного взаимодействия, а затем полученные результаты будут проанализированы на предмет соответствия результатам, полученным с помощью теории функционала плотности.

**Основная часть.** В результате расчетов были получены:

- упругие константы для искомым псевдографенов с помощью теории функционала плотности.
- упругие константы для искомым псевдографенов с помощью потенциалов AIREBO, Tersoff, Isbor, и др. .

Было проведено сравнение результатов расчетов, полученных с помощью метода молекулярной динамики, с расчетами на основе теории функционала плотности. Было обнаружено, что ни один из используемых нами в работе потенциалов межатомного взаимодействия не подходит для решения задачи нахождения упругих констант для

псевдографенов, так как не было найдено соответствия в поведении между данными методами. Это может объясняться тем, что потенциалы были разработаны для хорошо изученных до этого углеродных материалов: алмаз, графит и графен. Псевдографены в свою очередь можно назвать новым классом материалов, для которых необходимо уточнение существующих потенциалов потенциала межатомного взаимодействия, либо разработка нового.

В дальнейшем предлагается провести следующие исследования:

- мы предлагаем обратить внимание на новое направление в численном моделировании – создание потенциала межатомного взаимодействия с помощью машинного обучения, и попробовать решить поставленную задачу с помощью данного инструмента;
- опробовать другие потенциалы, не покрытые нашим обзором.

**Выводы.** Был проведен расчет упругих констант для псевдографенов G5-7v1 и G5-6-7v2 с помощью метода молекулярной динамики с использованием различных потенциалов межатомного взаимодействия, а также с помощью теории функционала плотности. Полученные результаты свидетельствуют о неприменимости использованных потенциалов для расчета характеристик псевдографенов.

#### **Список использованных источников:**

1. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva and A.A. Firsov, Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films // Science 306(5696) (2004) 666–669; DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1102896>.
2. Y. Wei, J. Wu, H. Yin, X. Shi, R. Yang and M. Dresselhaus, The Nature of Strength Enhancement and Weakening by Pentagon–heptagon Defects in Graphene // Nat. Mater. 11(9) (2012) 759–763; DOI: <https://doi.org/10.1038/nmat3370>.
3. J.P. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple.// Phys. Rev. Lett. 77(18) (1996) 3865–3868; DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>.