

Молекулярно-динамическое моделирование высокоскоростного нагружения фосфорена*

И. Д. Колесников✉, *И. А. Шепелев*

Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского

✉ kole200@yandex.ru

Фосфорен, широко известный своей превосходной термической стабильностью, недавно был вновь открыт в двумерной форме вслед за недавней тенденцией создания различных новых материалов с уменьшенными размерами, где кристаллы толщиной в один атом составляют большой набор материалов, охватывающих широкий спектр свойств. Анализ работ, посвященных изучению влияния высоких скоростей деформации на структуру и свойства двумерных материалов, выявил существенное отличие от таковых при обычных скоростях деформации. Например, в экспериментальном исследовании [1] было показано, что углеродные нанотрубки повреждаются гораздо сильнее при сжатии ударной волной, чем при статическом сжатии при том же уровне давления. Графен обладает потенциалом поглощения ударных волн без разрушения или в качестве промежуточного слоя для отражения и затухания ударной волны. Обсуждаются потенциальные возможности применения нескольких 2D-материалов в баллистических приложениях. Исследования эволюции структуры различных объемных конформаций (наносcrollов, фуллеренов, нанотрубок) графена и нитрида бора при столкновении с препятствием были проведены в работе [2], где было показано, что сценарий эволюции структуры при столкновении сильно зависит от начальной скорости и ориентации. В связи с тем, что двумерный фосфорен является материалом с широким спектром потенциальных применений, где существует значительная вероятность высокоскоростного нагружения, исследование его механического поведения и механизмов аккомодации деформаций при высокоскоростных нагрузках является важной задачей, решаемой в данной работе. Моделирование проводилось методом молекулярной динамики с использованием эмпирических потенциалов межатомного взаимодействия в программном пакете LAMMPS. Ранее

*Работа поддержана Советом при Президенте Российской Федерации по государственной поддержке молодых российских ученых, грант № МК-815.2020.2.

было показано, что этот метод является эффективным инструментом для исследования различных эффектов в кристаллах, например нелинейной динамики решеток, эволюции структуры и механических свойств при нагружении, фазовых превращений и многих других явлений. Для описания взаимодействия между атомами фосфора в рассматриваемой работе используется потенциал Стиллинжера–Веббера. В данной работе проводится подробный анализ количественных структурных параметров и каналов рассеяния энергии в гексагональной решетке фосфорена, подвергнутой ударному нагружению. Это внешнее воздействие приводит к образованию в материале ударной волны. Показано, что ударные волны могут быть инициированы путем подачи начального импульса в один атомный ряд в направлении, нормальном к этому ряду. В то же время такие начальные условия не соответствуют стабильному профилю ударной волны, но она формируется после достаточно короткого переходного периода около 0.1–0.2 пс. Показано, что ударные волны в исследуемом материале могут распространяться только в двух кристаллографических направлениях – зигзаг и кресло. Во всех случаях ударные волны распространяются быстрее скорости звука в исследуемом материале. Исследованы механизмы распространения ударной волны.

Список литературы

1. *Naimark O. B., Bayandin Y. V., Zocher M. A.* Collective properties of defects, multiscale plasticity, and shock induced phenomena in solids // *Physical Mesomechanics*. 2017. Vol. 20, no. 1. P. 10–30.
2. *Hosseini-Hashemi S., Sepahi-Boroujeni A., Sepahi-Boroujeni S.* Analytical and molecular dynamics studies on the impact loading of single-layered graphene sheet by fullerene // *Applied Surface Science*. 2018. Vol. 437. P. 366–374.