Die approbierte Originalversion dieser Dissertation ist an der Hauptbibliothek der Technischen Universität Wien aufgestellt (http://www.ub.tuwien.ac.at).

The approved original version of this thesis is available at the main library of the Vienna University of Technology (http://www.ub.tuwien.ac.at/englweb/).

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN
Vienna University of Technology

DISSERTATION

Beulanalyse einer gebetteten Kreisplatte mit nicht-*Euklidischer* Metrik

ausgeführt zum Zwecke der Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der technischen Wissenschaften unter der Leitung von

Ao.Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Alois STEINDL
E 325/2
Institut für Mechanik und Mechatronik
Abteilung für Mechanik fester Körper

eingereicht an der Technischen Universität Wien
Fakultät für
MASCHINENWESEN und BETRIEBSWISSENSCHAFTEN

von

Dipl.-Ing. Michael Hermann SCHWARZBART
0125399
Josef Bartmannstrasse 15
2483 Weigelsdorf

Wien, am 18.01.2013

Kurzfassung

Für das Erzeugen einer neuen Oberfläche in einem Festkörper oder einer Flüssigkeit ist Energie aufzuwenden. Auf atomarer Ebene werden dabei ungesättigte Bindungen erzeugt die eine erhöhte Energie, die sogenannte Oberflächenenergie, zur Folge hat. Bei dünnen Schichten wie Graphen kann diese Energie zu einer drastischen Veränderung der globalen Struktur führen [7]. Beispiele aus dem täglichen Leben, die ein vergleichbares Verhalten zeigen, treten beim Verformen von Kunststofffolien über die Streckgrenze hinaus auf [40]. Ähnliches gilt für das Wachstum von Blättern mit unterschiedlichen Wachstumsgeschwindigkeiten [34]. Bei beiden Beispielen führt eine geänderte Bindungskonfiguration zu einem gedehnten Rand, der eine wellige Gleichgewichtskonfiguration zur Folge haben kann. In der vorliegenden Arbeit steht der Einfluss einer freien Kante auf die globale Konfiguration eines kreisförmigen Graphenpatches im Vordergrund.
Im zweiten Kapitel wird eine molekularmechanische Modellierung vorgestellt [46]. Kleine Einheitszellen werden zur Bestimmung der Kantenenergie bzw. -spannung für *armchair*- und *zigzag*-Kanten verwendet. Graphen wird dabei mit Hilfe eines klassischen Vielteilchenpotentials, AIREBO [57] bzw. REBO [9, 10], beschrieben. Beide Potentiale sind für die Modellierung von Kohlenwasserstoffen geeignet. Prinzipiell stimmen die erzielten Ergebnisse mit jenen einer *Ab initio* Formulierung überein [28]. Eine genauere Analyse zeigt, dass die Energien und Spannungen für *armchair*-Kanten größer sind als jene für *zigzag*-Kanten. Dieses Resultat steht im Widerspruch zu den Ergebnissen einer *Ab initio* Modellierung. Die Größenordnung und das Vorzeichen der Kantenenergie und -spannung werden richtig abgebildet. Die veränderte Bindungskonfiguration führt zu einer Druckspannung die stark am Rand konzentriert ist, unabhängig von der Geometrie der Kante. Der Randbereich "will" sich aufgrund der geänderten Bindungsstruktur ausdehnen, wird aber von weiter innen liegenden Bereichen daran gehindert. Mit Hilfe einer empirischen Kraftfeldformulierung wird der Einfluss der Druckspannung auf die globale Gleichgewichtskonfiguration eines kreisförmigen Graphenpatches studiert. An der freien Kante tritt eine, in tangentialer Richtung, wellige transversale Verschiebung auf. In radialer Richtung klingt diese Verschiebung rasch ab. Um den Einfluss eines Substrats auf die

ausgebeulte Konfiguration zu untersuchen, wird eine zusätzliche Graphenschicht in Rechnung gestellt, die in der Ebene festgehalten ist und über die *Van der Waals*-Kraft mit dem Patch interagiert. Eine entsprechende Formulierung im Rahmen der Kontinuumsmechanik ermöglicht das Studium eines passenden Stabilitätsproblems. Die veränderte Bindungskonfiguration führt zu einer mechanischen Spannung die am Rand konzentriert ist. Diese Vorgehensweise liefert die Stabilitätsgrenze für die Intensität dieser Kantenspannung in der dimensionslosen Parameterebene.
Im dritten Kapitel werden die Plattengleichungen für eine nicht-*Euklidische* Metrik hergeleitet. Die Messung von Abständen auf einer Oberfläche ist untrennbar mit dem Begriff des Metriktensors verbunden. Mit Hilfe einer vom Radius abhängigen Störung des Metriktensors, die als *target metric* [40] bezeichnet wird, wird die geänderte Bindungsstruktur des Graphenpatches im kontinuumsmechanischen Modell dargestellt. Der Verzerrungstensor stellt sich als Differenz zwischen dem aktuellen und dem *target metric* Tensor dar und bildet den Ausgangspunkt für die Herleitung der nichtlinearen *Föppl-von-Kármán* Plattengleichungen für eine nicht-*Euklidische* Kreisplatte. Die Formulierung des *target metric* Terms muss eine Vergrößerung des Umfangs direkt an der Kante liefern, aber in radialer Richtung rasch abklingen. Die nichtlineare Bettung der Platte ist der *Van der Waals*-Wechselwirkung nachempfunden, um eine Vergleichbarkeit der Resultate mit der molekularmechanischen Formulierung zu gewährleisten. Im Plattenproblem tritt keine externe Belastung auf, sondern nur ein Eigenspannungszustand aufgrund des veränderten Metrikterms. Die lineare Stabilitätsanalyse der nicht ausgebeulten Platte liefert eine Stabilitätsgrenze für die Intensität der ortsabhängigen Störung des Metriktensors in Abhängigkeit von der Steifigkeit der Bettung. Um die auf numerischen Weg erzielten Ergebnisse zu verifizieren, wird eine Analyse der einzelnen Energieterme durchgeführt. Der auf diese Weise erzielte Zusammenhang liefert den qualitativen Verlauf der Stabilitätsgrenze. Kurven unterschiedlicher Beulmoden schneiden einander in der dimensionslosen Parameterebene, wobei die Intensität der Störung und die Steifigkeit der Bettung die entscheidenden Parameter sind. An einem solchen Schnittpunkt wird eine nichtlineare Stabilitätsanalyse durchgeführt, um zu klären ob die beiden am Schnittpunkt beteiligten Moden interagieren. Die komplexwertige Lösung des linearen Problems wird als *Galerkin*-Ansatz für das Randwertproblem verwendet, wobei nur die führenden nichtlinearen Terme betrachtet werden. Lineare Entfaltungsparameter für die Steifigkeit der Bettung und die Intensität des zusätzlichen Metrikterms liefern zwei reelle Verzweigungsgleichungen. Es zeigt sich, dass die am betrachteten Schnittpunkt beteiligten Lösungen an entsprechenden Stabilitätsgrenzen subkritisch verzweigen. Es existiert

zwar eine Interaktion beider Lösungen zwischen den beiden Stabilitätsgrenzen, allerding gibt es keinen stabilen, zweiten Lösungszweig. Aus diesem Grund brauchen die Terme fünfter Ordnung nicht weiter untersucht werden.
Für die Analyse des Nachbeulverhaltens jenseits der Stabilitätsgrenze kommt ein diskretes Modell zum Einsatz. Die kontinuierliche Platte wird mittels eines Netzwerks aus linear elastischen Federn diskretisiert. Die Federn sind so angeordnet, dass sie jeweils die Kante eines gleichseitigen Dreieckes bilden. Die Verzerrungsenergie zufolge Biegung aus der Plattenebene und Dehnung in der Plattenebene wird durch die Position der Eckpunkte der Dreiecke und entsprechender Steifigkeiten bestimmt [52]. Der veränderte Metrikterm des kontinuumsmechanischen Plattenmodells kann in sehr anschaulicher Weise als eine passende Vergrößerung der ungedehnten Federlängen im diskreten Modell abgebildet werden. Mit diesem Modell wird das Nachbeulverhalten der Kreisplatte studiert.

Abstract

To create a new surface in a solid or a liquid material, energy needs to be spent. On the atomistic level dangling bonds are formed, which tend to be reconstructed accompanied by an excess surface energy. For thin structures like graphene this energy can change the global shape of the structure drastically [7]. There are also examples of such a behaviour of thin structures in our every day's life. Considering the stretching of pliable plastic (garbage bag) past the yield point [40], or the effect of different growth in leaves [34]. In both cases the change of the bonding configuration leads to an expanding edge and/or to wrinkled equilibrium configurations, which are optimal from an energetic point of view. In this work the effect of a free edge on the global behaviour of a circular graphene patch is studied.

The second chapter is devoted to the molecular mechanics approach [46]. Small unit cells are used to compute the edge energy and edge stress of armchair and zigzag edges respectively. Graphene is modelled by classical multibody potentials called AIREBO [57] and REBO [9, 10], which are reasonable for describing hydrocarbon structures. At first glance the results are in good agreement with values obtained with *Ab initio* methods [28]. It is worth mentioning that the energies and stresses for armchair edges are larger than for zigzag ones, which is inconsistent with *Ab initio* results. Nevertheless the order of magnitude and the sign of edge energy and edge stress are correct. As a result of the changed bonding configuration there is a compressive stress localised at the edge, independent of the underlying geometry of the edge. With an empirical force field formulation the effect of the compressive stress on the global configuration of a circular graphene patch is studied. The free edge shows a wavy out of plane displacement in the circumferential direction. In radial direction the displacement decays away from the edge. To investigate the influence of a substrate on the buckled configuration, an additional fixed graphene sheet interacting via the *Van der Waals* force is considered. Formulating this problem in the framework of continuum mechanics, offers the possibility of stating an appropriate stability problem. The aim of such an approach is to obtain the stability boundary in the plane of suitable parameters.

In the third chapter the plate equations for a non-*Euclidean* metric are derived. The question of measuring lengths on a surface is intrinsically tied to the metric tensor. The expanding edge is modelled as a perturbation of the metric tensor of the elastic plate, which is called *target metric* [40]. The strain tensor results from the difference between the actual and the *target metric* tensor, and is the starting point of deriving the nonlinear *Föppl-von-Kármán* plate equations for a non-*Euclidean* annular plate. The formulation of the *target metric* term needs to model the elongated circumference just near the edge, and decay very rapidly in radial direction. The nonlinear foundation of the plate is modelled according to the *Van der Waals* interaction, in order to make the results comparable with the molecular static ones. There is no external load, but the attempt of the edge to increase its circumferential line due to the changed metric term. Performing a linear stability analysis of the flat unbuckled configuration leads to the stability boundary in the dimensionless parameter plane, namely the critical metric coefficient as a function of the foundation stiffness. To validate the results obtained from the numerical solution of the boundary value problem, a simple scaling analysis is performed. The resulting scaling law reproduces the stability boundary qualitatively. Curves of different modes of instability cross each other in the parameter plane. At such a point a nonlinear analysis is performed, to answer the question if the two modes may interact at this point. The complex solution of the linear analysis is used as a *Galerkin*-ansatz for the boundary value problem with the leading nonlinear terms taken into account. Linear unfolding parameters for the stiffness of the foundation and the metric parameter respectively results in two real bifurcation equations. It turns out, that both solutions bifurcate subcritical at the corresponding stability boundaries. Although there exists a mode interaction between two boundaries, no stable secondary branch remain. Therefore the resonant fifth order terms are not investigated.
To study the post buckling behaviour beyond the stability boundary a discrete model is used. The continuous plate is discretised by means of a triangular spring network model. For a network of equilateral triangles the stretching and bending energies of the plate are represented as a function of the position of individual corners of the triangles [52]. The expanding edge can be defined very intuitively by increasing the equilibrium lengths of corresponding springs. With this discrete formulation of the plate the postbuckling configurations of the circular plate are computed.

. . . " Weil die Menschen nur ein Einziges wollen und preisen, weil sie, um sich zu sättigen, sich in das Einseitige stürzen, machen sie sich unglücklich. Wenn wir nur in uns selber in Ordnung wären, dann würden wir viel mehr Freude an den Dingen dieser Erde haben. Aber wenn ein Übermaß von Wünschen und Begehrungen in uns ist, so hören wir nur diese immer an und vermögen nicht die Unschuld der Dinge außer uns zu fassen. Leider heißen wir sie wichtig, wenn sie Gegenstände unserer Leidenschaft sind, und unwichtig, wenn sie zu diesen in keinen Beziehungen stehen, während es doch oft umgekehrt sein kann."
Ich verstand dieses Wort damals noch nicht so ganz genau, ich war noch zu jung, und hörte selber oft nur mein eigenes Innere reden, nicht die Dinge um mich. . . .

(Der Nachsommer, Adalbert Stifter (1805-1886))

Vorwort

Die vorliegende Arbeit bildet den Abschluss meiner Ausbildung an der TU-Wien. Anlass genug um Rückschau zu halten und Dankbarkeit für meine Wegbegleiter auszudrücken. Während meines Diplomstudiums für Maschinenbau habe ich sehr bald meine Vorliebe für die Mechanik entdeckt. Besonders in Erinnerung geblieben ist mir die Demonstration der Stabilität des momentenfreien Kreisels mit Hilfe eines Tafelschwamms, durch den unvergesslichen Prof. Hans Troger(1943-2010). Drei Jahre später wurde ich in seiner Arbeitsgruppe Universitätsassistent, was den Grundstein für die vorliegende Arbeit bildet. In seinen schwersten Stunden setzte sich Prof. Troger noch erfolgreich für mich ein. Meine Dankbarkeit in Worte zu fassen ist in Anbetracht dieses selbstlosen Einsatzes unmöglich.
Im besonderen Maße möchte ich meinem Betreuer Alois Steindl danken. Ich habe sehr von seiner, über die Institutsgrenzen hinaus bekannten, Fachkompetenz profitiert. Seine Fähigkeit in großen mathematisch fundierten Zusammenhängen zu denken, hat mich oft davor bewahrt mich in Kleinigkeiten zu verlieren. Für die rasche und unbürokratische Übernahme des Koreferats danke ich Prof. Franz Rammerstorfer.
Mein aufrichtiger Dank gilt nicht zuletzt Prof. Hans Peter Rossmanith. Er hat mich auf das ASAG-Mobilitätsstipendium aufmerksam gemacht, was mir einen Forschungsaufenthalt an der renommierten *Rice University* in *Houston* TX ermöglichte. Darüber hinaus ist uns die Schwäche für Bücher, Briefmarken und Kaffee gemein. Das gute Arbeitsklima am Institut ist nicht zuletzt auf meine Doktoranden-Kollegen, Andreas Teufel, Hans Renezeder, Amin Chabchoub und Richard Jurisits sowie unserer Sekretärin Verena Rothbauer zurückzuführen, denen ich recht herzlich danke. Abschließend möchte ich meiner Familie, allen voran meiner Lebensgefährtin Christine, für die Unterstützung danken.

Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig und ohne fremde Hilfe verfasst, andere als die angegebenen Quellen nicht benützt und die den benutzten Quellen wörtlich oder inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

Wien, am 18.01.2013 Michael Schwarzbart

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung **1**

2. Atomistische Betrachtung **6**

2.1. Molekularstatische Simulation 7

2.1.1. Grundzustand der primitiven Elementarzelle 7

2.1.2. Kantenenergie und -spannung 9

2.1.3. Elastische Eigenschaften von Graphen 15

2.2. Einfluss der Kantenenergie auf die globale Struktur von Graphen 22

3. Kontinuumsmechanische Betrachtung **27**

3.1. Herleitung der *Föppl von Kármán'schen* Plattengleichungen mit nicht-*Euklidischer* Metrik 28

3.1.1. Die synthetische Herleitung 29

3.1.2. Die analytische Herleitung 36

3.2. Die qualitative Bestimmung der Stabilitätsgrenze für den Metrikkoeffizienten 48

3.3. Lösung der *Föppl von Kármán'schen* Plattengleichungen 52

3.3.1. Die inhomogene Scheibengleichung 52

3.3.2. Die lineare Plattengleichung 55

3.3.3. Nichtlineare Stabilitätsuntersuchung 61

4. Simulation des Nachbeulverhaltens und Vergleich der Resultate **70**

4.1. Vergleich der atomistischen mit den kontinuumsmechanischen Ergebnissen 76

A. Notwendige Begriffe der Tensorrechnung **81**

B. Nichtlineare Stabilitätsuntersuchung eines gebetteten Stabes **82**

C. Empirische Kraftfeldpotentiale **87**

Abbildungsverzeichnis

1.1. Graphen als übergeordnete Struktur für *Buckyballs*, *Carbon Nanotubes* und für Graphit [20](a). TEM-Aufnahme einer Graphenschicht, die sich als zufällige Anordnung von Fünf-, Sechs- und Siebenecken darstellt [19](b). 1

1.2. Gleichgewichtslagen von Graphenbändern für verschiedene Temperaturen, berechnet mit einem Molekulardynamikprogramm [7]. 3

1.3. Vier große Gruppen von physikalischen Theorien (**Q**uanten **M**echanik, **M**olekular **D**ynamik, **M**onte **C**arlo, **K**ontinuums-**M**echanik), aufgetragen in Abhängigkeit von der Zeit und Länge. 4

2.1. Gesamtenergie der primitiven Elementarzelle in Abhängigkeit vom Gleichgewichtsabstand (a). Primitive Elementarzelle von den beiden Vektoren $\vec{a}_1$ und $\vec{a}_2$ aufgespannt (b). Hexagonales Gitter mit *armchair*-Richtung (n, n) und *zigzag*-Richtung $(n, 0)$ (c). 8

2.2. Die Einheitszelle (a) und zwei Beispiele größerer Zellen (b) für die Bestimmung der Kantenenergie/-spannung. 10

2.3. 1×2 *armchair*-Zelle mit periodischen Randbedingungen in $\vec{e}_x$- und $\vec{e}_y$-Richtung (a), bzw. periodisch fortgesetzt nur in $\vec{e}_x$-Richtung (b). 11

2.4. Berechnete Kantenenergie in Abhängigkeit von der Bandbreite. 11

2.5. Energieverläufe für 1×4 *armchair*- bzw. 4×1 *zigzag*-Zelle. Die Steigung der Kantenenergie repräsentiert entsprechend (2.1) die Kantenspannung (a). Energiedifferenz (2.2) in den Ursprung verschoben (b). 13

2.6. Kantenenergie in $eV/\text{Å}$, bzw. Gesamtenergie in eV (Insert) einer 1×4- bzw. 4×1-Zelle in Abhängigkeit von der Verzerrung aus einer *Ab initio*-Rechnung [28]. 13

2.7. Einheitszellen zur Bestimmung der Dehnsteifigkeit in *armchair*-Richtung (a) bzw. *zigzag*-Richtung (b). 16

2.8. Gesamtenergie pro Atom für Zugversuche gemäß Abb. 2.7 in *armchair*- bzw. *zigzag*-Richtung unter Verwendung des REBO und des AIREBO-Potentials. 17
2.9. Spannungen in Abhängigkeit von der in *armchair*- und *zigzag*-Richtung aufgebrachten Verzerrungen (a). Der Spannungsverlauf für sehr kleine Dehnungen (b). 18
2.10. Beispiele zweier Einheitszellen zur Bestimmung der Biegesteifigkeit in *armchair*- und *zigzag*-Richtung (a). (10,10) *armchair*- bzw. (20,0) *zigzag*-Zellen deren Gesamtenergie mit periodischen Randbedingungen in axialer Richtung berechnet wird (b). 20
2.11. Zuwachs der Verzerrungsenergiedichte in Abhängigkeit von der Krümmung für *armchair*- bzw. *zigzag*-Richtung unter Verwendung des REBO und des AIREBO-Potentials. 21
2.12. Rasterelektronenmikroskop-Aufnahmen von Graphenbändern mit unterschiedlicher Vergrößerung [12]. 23
2.13. Zwei verschiedene Startkonfigurationen (1090 Kohlenstoffatome) für die Minimierung des Gesamtpotentials. Rein geometrisch konstruiertes Patch (a), dasselbe Graphenpatch mit zufällig verteilter Verschiebung einzelner Atome in transversaler Richtung (b). 23
2.14. Energieminimale Konfigurationen ohne Bettung (a), bzw. mit einer Bettung (b). 25

3.1. Der Zusammenhang zwischen unverformten und verformten Zustand, dargestellt in körperfesten Koordinaten x^i. 30
3.2. Mechanisches Modell zur Berechnung der nichtlinearen Bettung aus der *Van der Waals*-Wechselwirkung (a). Abmessung der kleinsten Elementarzelle (b). 39
3.3. Skizze der trivialen (grau) und der ausgebeulten Lage (grün) einer Kreisplatte (a). Ansicht des Kreissektors ($\frac{\pi}{m}$) entlang der $\vec{e}_r$-Richtung (b). . . . 50
3.4. Der kritische Metrikkoeffizient, aufgetragen über der dimensionslosen Steifigkeit der Bettung für verschiedene Wellenzahlen, sowie für $n = 10$. . . . 51
3.5. Die Verzerrungen (3.65) für $\mu = 0,13$ bzw. die Schnittgrößen (3.63) aufgetragen über dem skalierten Radius. 55

3.6. Der kritische Metrikkoeffizient aufgetragen über der dimensionslosen Steifigkeit der linearen Bettung. Die Einhüllende der Kurven für unterschiedliche Wellenzahlen m stellt die Stabilitätsgrenze für β im linearen Modell dar. Das Ergebnis der numerischen Analyse ist durch die Kurvenschar (a) repräsentiert, zusätzlich ist das Ergebnis der bereits diskutierten qualitativen Analyse (b) dargestellt. 60
3.7. Bereich in der Parameterebene, in dem sich der 1. und der 2. Beulmode schneiden. 61
3.8. Die Eigenfunktionen $u(r)$ für $m = 2$ bzw. $v(r)$ für $m = 3$ am Schnittpunkt beider Beulmoden in der Parameterebene. 62
3.9. Verzweigungsdiagramm (a) für den Pfad in der dimensionslosen Ebene der Entfaltungsparameter am kritischen Punkt (b). 68
3.10. Schnittpunkt der beiden Beulmoden, mit Darstellung der mathematischen Entfaltungsparameter am Verzweigungspunkt (a). Ebene der Entfaltungsparameter mit dem Koordinatensystem der physikalischen Parameter (b). 69

4.1. Schematische Darstellung der Dreiecksflächen, wobei die entsprechenden Eckpunkte mit Federn verbunden sind, deren Energie mit (4.1) zu bestimmen ist. Die Lage zweier benachbarter Dreiecksflächen zueinander, ausgedrückt durch die Flächennormalen $\boldsymbol{n}_\alpha$ und $\boldsymbol{n}_\beta$, geht in die Verzerrungsenergie (4.2) ein (a). Die diskretisierte Kreisplatte mit einer Teilung des Umfanges in 128 Dreieckskanten (b). 71
4.2. Geometrische Zusammenhänge zur Bestimmung der ungedehnten Federlänge gemäß (4.4). 73
4.3. Stabilitätsgrenze in der dimensionslosen Parameterebene, mit Kennzeichnung der Bereiche für die Untersuchung des Nachbeulverhaltens. 73
4.4. Karte mit verschiedenen Nachbeulkonfigurationen, resultierend aus der im Text beschriebenen numerischen Simulation. Die Buchstaben entsprechen der Lage in der Parameterebene Abb. 4.3. 75
4.5. Verzerrungsenergie für die in Abb. 4.1(b) dargestellte Kreisplatte in Abhängigkeit von der ungedehnten Federlänge am Rand. 78
4.6. Karte mit Nachbeulkonfigurationen der diskretisierten Kreisplatte (Abb 4.1(b)), resultierend aus der Veränderung der ungedehnten Federlänge am Rand ($l_0 = 1,88$Å). 79

B.1. Gelenkig gelagerter Stab auf einer linearen Bettung, mit den beiden ersten Beulmoden. 82
B.2. Stabilitätsgrenze in der dimensionslosen Parameterebene. 84
B.3. Verzweigungsdiagramm (a) für den Pfad in der dimensionslosen Ebene der Entfaltungsparameter am kritischen Punkt (b). 86

C.1. Das REBO-Potential und die entsprechende Kraft als Funktion des Atomabstandes für $b_{ij} = 1$. 88
C.2. Das Torsions-Potential (C.4), bzw. das entsprechende Torsionsmoment $M = E^{\text{tors}}{}_{,\omega}$, als Funktion des Winkels ω_{kijl}. 90
C.3. Der Zusammenhang zwischen der Lage von vier Atome im Raum und dem Torsionswinkel. 90
C.4. *Lennard-Jones* Potential und die entsprechende Kraft als Funktion vom Atomabstand. 91

1. Einleitung

Die Erforschung von Nanostrukturen wurde aufgrund deren außergewöhnlichen Eigenschaften in den letzten Jahren intensiv vorangetrieben. Sowohl auf experimenteller als auch auf theoretischer Ebene sind Fortschritte in der Synthese entsprechender Strukturen, bzw. in der Berechnung ihrer Eigenschaften gemacht worden. Wie sehr dieses Gebiet die Forschung der letzten Jahrzehnte geprägt hat, kann am Besten anhand der Nobelpreise für Chemie 1996 und für Physik 2010 illustriert werden. Der Chemienobelpreis 1996 wurde für die Entdeckung von sogenannten *Fullerene* [27] verliehen, deren Existenz lange Zeit als umstritten galt. Im Jahre 2010 wurde der Physiknobelpreis für die Synthese von *Graphene* [18] vergeben.

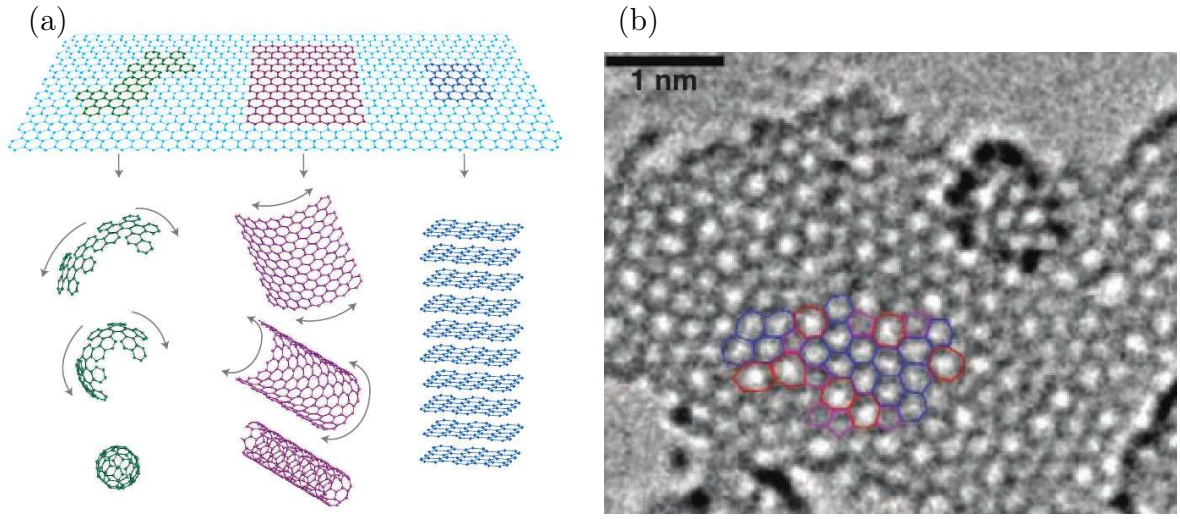


Abbildung 1.1.: Graphen als übergeordnete Struktur für *Buckyballs*, *Carbon Nanotubes* und für Graphit [20](a). TEM-Aufnahme einer Graphenschicht, die sich als zufällige Anordnung von Fünf-, Sechs- und Siebenecken darstellt [19](b).

Bei diesen speziellen Erscheinungsformen von Kohlenstoff handelt es sich, wie bei den bekannten Formen von Graphit und Diamant, um reine Kohlenstoffverbindungen. Abbildung 1.1(a) zeigt Graphen als hexagonale Grundstruktur, aus der *Carbon Nanotubes* und

Graphit geformt werden können. Um aus Graphen *Buckyballs* zu formen, sind zusätzlich 12 Fünfecke erforderlich. Eine Transmissionselektronenmikroskop-Aufnahme einer einzelnen Graphenschicht ist in Abb. 1.1(b) dargestellt, wobei die farbigen Linien zur besseren Darstellung der auftretenden Vielecke dienen.

Graphen: Material der Zukunft!

Welche Eigenschaften machen Graphen zu einem Material der Zukunft? Eine der wichtigsten Eigenschaft ist die hohe Beweglichkeit geladener Teilchen (ca. 1000 mal so groß wie für Silizium), wodurch sich zahlreiche Anwendungen in der Halbleiterindustrie eröffnen [51]. Darüber hinaus ist Graphen transparent, wodurch Anwendungen in Solarzellen, lichtemittierenden Bauteilen bis hin zu *Touchscreens* möglich sind [8]. Geim bezeichnet Graphen als Wundermaterial und beschreibt in seinem Übersichtsartikel [19] alle Eigenschaften, die es so einzigartig machen.
Bezugnehmend auf diese Arbeit stehen vor allem die mechanischen Eigenschaften von Graphen im Vordergrund. Mit einer gemessenen Bruchfestigkeit von $\approx 42N/m$ [33] erreicht Graphen die theoretische Festigkeit, und stellt somit das stärkste unter allen heute bekannten Materialien dar. Gleichzeitig besitzt eine einzelne Schicht die kleinste mögliche Ausdehnung in einer Richtung von nur einer Atomlage. Trotz dieser hohen Festigkeit ist Graphen sehr elastisch, und kann elastische Dehnungen bis zu $\epsilon = 20\%$ erreichen, mehr als alle anderen Kristalle [19]. Die Tatsache, dass die elektronischen und optischen Eigenschaften sowie die Transporteigenschaften von Graphen mit Hilfe elastischer Verformungen beeinflusst werden können [45], erklärt die Wichtigkeit der mechanischen Eigenschaften für zukünftige Anwendungen.
Mit einer dieser Fragestellungen wurde ich während meines Aufenthaltes an der *Rice University, Houston* bei Prof. Yakobson konfrontiert. Gemeinsam mit meiner Vorgängerin in der Arbeitsgruppe publizierte Prof. Yakobson ein Arbeit, die den Einfluss der Kantenenergie auf die globale Struktur von Graphenbändern zum Thema hat [7]. Darüber hinaus wurden Kantenenergien und -spannungen mit einem klassischen Vielteilchenpotential [9] berechnet. Abbildung 1.2 zeigt graphisch aufbereitet die Grundaussage der Arbeit [7], nämlich dass lange schmale Graphenbänder ohne einer Belastung von außen eine wellige Gleichgewichtslage einnehmen. Der Grund für diese nichttriviale Lage ist in der veränderten Bindungsstruktur am Rand dieser Bänder zu suchen. Die in Abb. 1.2 dargestellten Ergebnisse wurden mit Hilfe passend gewählter empirischer Potentiale im Zuge einer molekulardynamischen Simulation erzeugt.

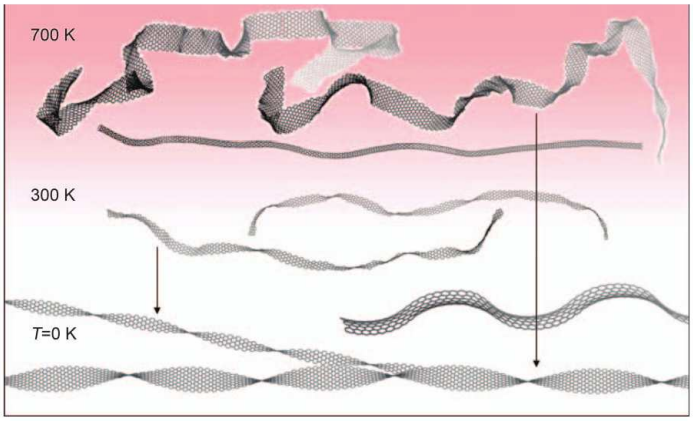


Abbildung 1.2.: Gleichgewichtslagen von Graphenbändern für verschiedene Temperaturen, berechnet mit einem Molekulardynamikprogramm [7].

Darüber hinaus haben sich auch andere Autoren [28, 39, 54] dieses Problems angenommen, wobei unterschiedliche Modellierungen Verwendung fanden. Jun berechnet mit Hilfe einer *Ab initio*-Formulierung den Einfluss der Kantengeometrie auf die Energie und die Spannungen nahe dem Rand [28]. Shenoy hingegen verwendete ein Vielteilchenpotential und eine Finite Elemente-Formulierung zur Analyse der globalen Struktur von Graphenbändern [54].
Die Verwendung verschiedener physikalischer Modelle auf unterschiedlichen Längenskalen, unter Ausnutzung der jeweiligen Vorteile, ist mit dem Begriff *Multiscale Modeling* verbunden. Im Zuge einer *Multiscale*-Analyse fließen Simulationsergebnisse, die für eine Längenskala erzielt wurden, in das Modell der nächst größeren Längenskala ein und umgekehrt [36].

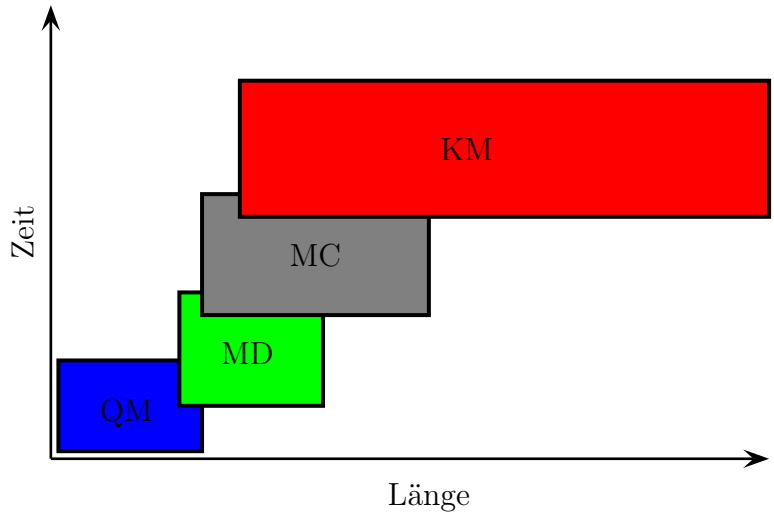


Abbildung 1.3.: Vier große Gruppen von physikalischen Theorien (**Q**uanten **M**echanik, **M**olekular **D**ynamik, **M**onte **C**arlo, **K**ontinuums-**M**echanik), aufgetragen in Abhängigkeit von der Zeit und Länge.

Abbildung 1.3 zeigt eine grobe Einteilung der verschiedenen Lösungsansätze in Abhängigkeit von der Zeit und der Länge.
Bei einer quantenmechanischen Simulation (*Ab initio*) müssen sehr wenige Grundannahmen getroffen werden. Es wird auf Ebene der Elektronenstruktur simuliert, wodurch aufgrund beschränkter Rechenkapazität die Größe der zu analysierenden Strukturen beschränkt ist. In der vorliegenden Arbeit werden lediglich publizierte Ergebnisse aus quantenmechanischen Analysen zur Verifikation der molekulardynamischen Simulationsergebnisse verwendet.
Im Zuge einer molekulardynamischen Analyse werden die Wechselwirkungen zwischen einzelnen Atomen stark vereinfacht mit Hilfe empirischer Potentiale beschrieben. Der Vorteil dieser Formulierung ist die Größe der berechenbaren Strukturen, die jene von *Ab initio*-Formulierungen um Größenordnungen übertrifft. Im Kapitel 2 werden Ergebnisse präsentiert, die mit Hilfe dieses Lösungsansatzes erzielt wurden.
Die Grundidee bei der *Monte-Carlo* Simulation ist es, mit Hilfe stochastischer Algorithmen zufällig erzeugte Konfigurationen auszuwerten und so Informationen für den nächsten Simulationsschritt zu gewinnen. Diese Simulationsmethode ist für viele Anwendungen das einzige Verfahren, das in vernünftiger Rechenzeit brauchbare Resultate liefert [1].
Die letzte Stufe der physikalischen Modelle beschreibt Konfigurationen auf makrosko-

pischer Ebene. Im Kapitel 3 wird gezeigt, wie mit Hilfe bewährter kontinuumsmechanischer Konzepte das Verhalten eines Graphenpatches beschrieben werden kann. Für die Beschreibung eines isotropen, linear elastischen Materials sind lediglich zwei Parameter notwendig. Das Ziel dieser Arbeit ist, auf Basis einer kontinuumsmechanischen Darstellung des Problems ein entsprechendes Stabilitätsproblem zu formulieren. Diese Vorgehensweise erlaubt die Berechnung kritischer Parameterwerte von der Intensität des zusätzlichen Metrikterms, für die eine triviale, d.h. nicht ausgebeulte Gleichgewichtslage instabil wird. In weiterer Folge wird das Verzweigungsverhalten an der Stabilitätsgrenze und das Nachbeulverhalten analysiert.
Einen wichtigen Aspekt dieser Arbeit bildet der Vergleich der erzielten Ergebnisse, aus molekularstatischen und kontinuumsmechanischen Formulierungen, mit publizierten Ergebnissen aus quantenmechanischen Analysen.

2. Atomistische Betrachtung

Um in einem Festkörper oder einer Flüssigkeit eine neue Oberfläche zu erzeugen, ist Energie aufzuwenden. Diese Energie ist in natürlicher Weise vom jeweiligen Material abhängig, und wird im Folgenden als Oberflächenenergie γ bezeichnet. Im Falle von Flüssigkeiten wird die Oberfläche vergrößert, wobei die Oberfläche pro Molekül konstant bleibt. In diesem Fall sind Oberflächenenergie und -spannung identisch. Beim Festkörper kommt zu diesem Anteil noch ein elastischer hinzu, der einer Vergrößerung der Oberfläche bei konstanter Anzahl von Molekülen entspricht.
Bei der Analyse von Gleichgewichtskonfigurationen von Oberflächen bei Festkörpern tritt die sogenannte *Shuttleworth*-Gleichung [55, 11] auf. In der ursprünglichen Formulierung [55] verknüpft diese die Oberflächenspannung f mit der Oberflächenenergie γ, bzw. deren Ableitung nach der elastischen Dehnung ϵ. Im Folgenden ist der unbekannte Zusammenhang zwischen der Oberflächenenergie und der Verzerrung $\gamma(\epsilon)$ von Interesse. Für kleine Verzerrungen ($\epsilon \ll 1$) kann dieser näherungsweise durch eine Taylorreihe dargestellt werden. Entwickelt man die Oberflächenenergie nach der Verzerrung und bricht nach dem linearen Glied ab, so erhält man

$$\begin{aligned} \gamma(\epsilon) &= \gamma_{(\epsilon=0)} + \left.\frac{\mathrm{d}\gamma}{\mathrm{d}\epsilon}\right|_{\epsilon=0} \epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\ &= \gamma_0 + f\epsilon. \end{aligned} \tag{2.1}$$

Gleichung (2.1) stellt einen einfachen Zusammenhang zwischen Oberflächenenergie und Oberflächenspannung unter der Voraussetzung kleiner Verzerrung in einachsiger Formulierung dar.
Betrachtet man den Vorgang der Erzeugung neuer Oberflächen auf atomarer Ebene, so müssen dort entsprechende chemische Bindungen aufgebrochen werden. Die dafür benötige Energie wird auf makroskopischer Ebene als Oberflächenenergie bezeichnet. Besonders in der Bruchmechanik ist der Begriff der Oberflächenenergie in Verbindung mit entsprechenden Bruchkriterien verbreitet [23].
Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, den Einfluss der Oberflächenenergie auf die glo-

bale Struktur von Graphen zu studieren. Es ist daher zunächst notwendig diese Energie zu berechnen. In diesem Kapitel soll eine atomistische Betrachtung in Form einer molekularstatischen Analyse dargestellt werden. Alle Ergebnisse werden zusätzlich mit jenen aus der einschlägigen Literatur verglichen und diskutiert.

2.1. Molekularstatische Simulation

Im Zuge einer molekulardynamischen Analyse werden die klassischen Bewegungsgleichungen für jedes im System vorhandene Atom numerisch gelöst. Die Interaktion zwischen den Atomen wird mit Hilfe empirischer Potentiale beschrieben. Um den Einfluss der Oberflächenenergie auf Graphen zu untersuchen, wird eine statische Analyse durchgeführt. Es werden also nur lokale Gleichgewichtslagen berechnet, ohne einen in der Realität stets vorhandenen Temperatureinfluss zu berücksichtigen. Dieser quasistatische Zugang wird auch bei Stabilitätsproblemen der Kontinuumsmechanik gewählt, der im nächsten Abschnitt im Vordergrund stehen wird.
Mit Hilfe empirischer Potentiale werden die Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Atomen beschrieben. Diese Potentiale werde als empirisch bezeichnet, weil ihrer Formulierung *ad-hoc* Näherungen zu Grunde liegen. Die dabei auftretenden freien Koeffizienten werden an experimentelle Ergebnisse oder quantenmechanische Rechnungen angepasst [32]. Für die Beschreibung von Kohlenstoffverbindungen eignet sich besonders das REBO-Potential [9, 10] bzw. das AIREBO-Potential [57]. Beide Potentiale sind im Molekulardynamikprogramm LAMMPS [46] implementiert, das für die Simulation zur Anwendung gekommen ist. Die Form der verwendeten Potentiale ist im Anhang C genauer diskutiert. Bevor die eigentliche Berechnung der Energien erfolgt, ist der Grundzustand, also der Zustand niedrigster Energie für Graphen zu bestimmen.

2.1.1. Grundzustand der primitiven Elementarzelle

Abbildung 2.1(b) zeigt die primitive Elementarzelle, also jene Zelle mit der geringsten Anzahl von Atomen, die mit periodischen Randbedingungen ein unendlich ausgedehntes *Graphene-sheet* Abb. 2.1(c) repräsentiert.[1] Aufgrund der hexagonalen Struktur des Gitters ergibt sich die in Abb. 2.1(b) dargestellte Form der primitiven Elementarzelle. Der entscheidende Parameter, der die Abmessung dieser Zelle bestimmt, ist der Abstand

[1] Die Darstellung atomarer Strukturen mittels Kugeln und Stäbe ist eine häufige und wird in dieser Arbeit durchgängig verwendet. Gelegentlich werden zu Gunsten der Übersichtlichkeit nur die Bindungen repräsentierenden Stäbe gezeichnet.

zwischen den beiden Kohlenstoffatomen a_{CC}. Die Position der beiden Kohlenstoffatome innerhalb dieser Zelle ist beliebig, da diese Zelle ohnehin periodisch fortgesetzt wird.

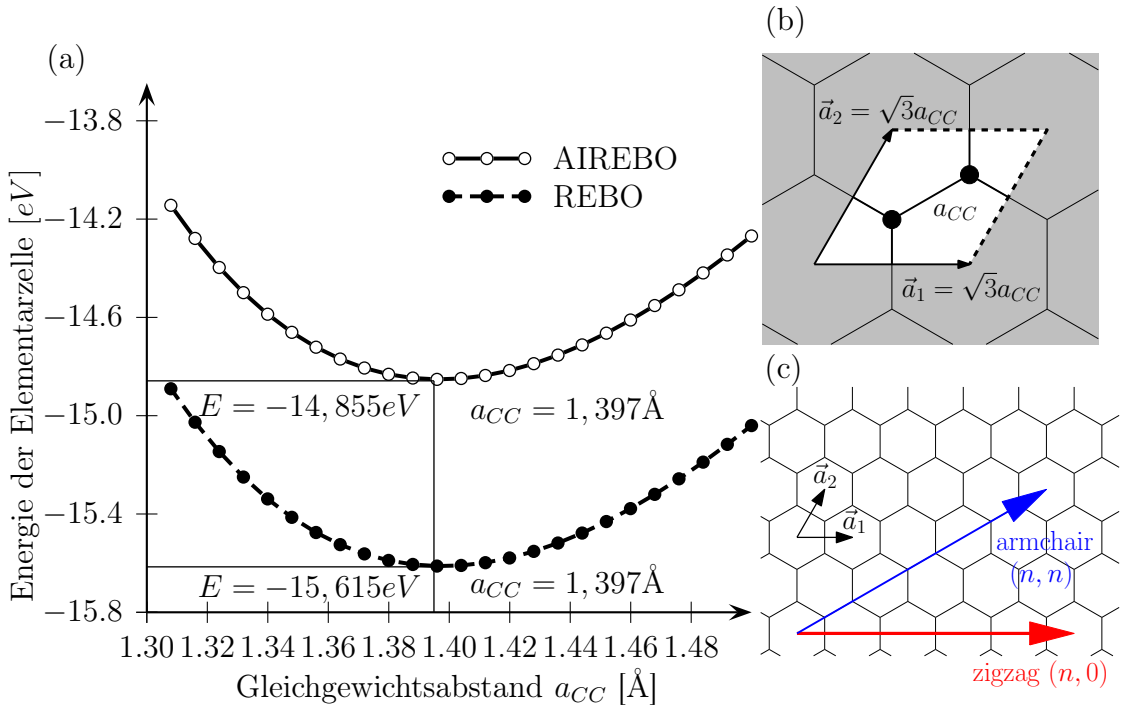


Abbildung 2.1.: Gesamtenergie der primitiven Elementarzelle in Abhängigkeit vom Gleichgewichtsabstand (a). Primitive Elementarzelle von den beiden Vektoren $\vec{a}_1$ und $\vec{a}_2$ aufgespannt (b). Hexagonales Gitter mit *armchair*-Richtung (n,n) und *zigzag*-Richtung $(n,0)$ (c).

Gesucht ist nun jener Wert für a_{CC}, bei dem die Gesamtenergie einen minimalen Wert erreicht. Abbildung 2.1(a) zeigt die Gesamtenergie der primitiven Elementarzelle in Abhängigkeit vom Abstand a_{CC}. Beide Potentiale (AIREBO & REBO) liefern denselben Gleichgewichtsabstand $a_{CC} = 1,397$Å[2], aber verschiedene Energien. Weil im AIREBO-Potential im Vergleich zum REBO-Potential zwei zusätzliche Energieterme berücksichtigt werden, ergibt sich ein Unterschied von $0,76eV$[3]. Einerseits wird ein Torsionspotential formuliert, das von der Lage von jeweils 4 Atomen abhängt. Der zweite zusätzliche Beitrag im AIREBO-Potential beschreibt die *Van der Waals*-Wechselwirkung in der Form des *Lennard-Jones*-Potentials. Für eine genau Darstellung der einzelnen Potentiale sei auf den Anhang C verwiesen.

[2] 1Å $= 10^{-10}m$
[3] $1eV = 1,60217\ 10^{-19}J$

2.1.2. Kantenenergie und -spannung

Aufgrund der einfachen zweidimensionalen Geometrie von Graphen können durch Aufbrechen einzelner kovalenter Bindungen zwischen Kohlenstoffatomen keine Oberflächen, sondern nur neue Kanten gebildet werden. Aus diesem Grund wird im Folgenden von Kantenenergie (*edge energy*) und Kantenspannung (*edge stress*) anstatt von Oberflächenenergie und Oberflächenspannung die Rede sein [28]. Diese zusätzliche Energie ist stark am neuen Rand konzentriert, aufgrund der dort aufgebrochenen Bindungen. Abhängig von der Form des Randes können diese nicht abgesättigten Bindungen rekombinieren oder bleiben ungesättigt. Kommt es zu keiner Schließung des Randes, bzw. zu einer Absättigung, verursacht die geänderte Bindungskonfiguration einen vergrößerten Gleichgewichtsabstand zwischen den Randatomen. Der Rand "will" seine ursprüngliche Länge verändern, wird aber durch weiter innenliegende Bereiche unveränderter Bindungsstruktur dabei behindert. Je nachdem, ob sich der Rand verlängern oder verkürzen "will", bewirkt diese Wechselwirkung eine negative bzw. positive Kantenspannung, die eine Veränderung der globalen Struktur zur Folge haben kann.
Zunächst ist die Kantenenergie bzw. die -spannung für Graphen zu bestimmen. Es gibt unendlich viele Möglichkeiten aus einem ausgedehnten hexagonalen Gitter eine Kante, durch Aufbrechen von Bindungen, zu erzeugen. Allerdings ist jeder beliebige Kantenverlauf in einem hexagonalen Gitter eine Kombination aus *armchair*- und *zigzag*-Teilen. Diese Tatsache kann durch rein geometrische Überlegungen in Abb.2.1(c) überprüft werden. Nicht so offensichtlich ist die Tatsache, dass sich die Kantenenergie einer allgemeinen Kante als Linearkombination aus den jeweiligen Energieanteilen von *armchair*- und *zigzag*-Kante darstellen lässt [37]. Die Berechnung der entsprechenden Energien beschränkt sich daher auf diese beiden Fälle der Kantengeometrie.

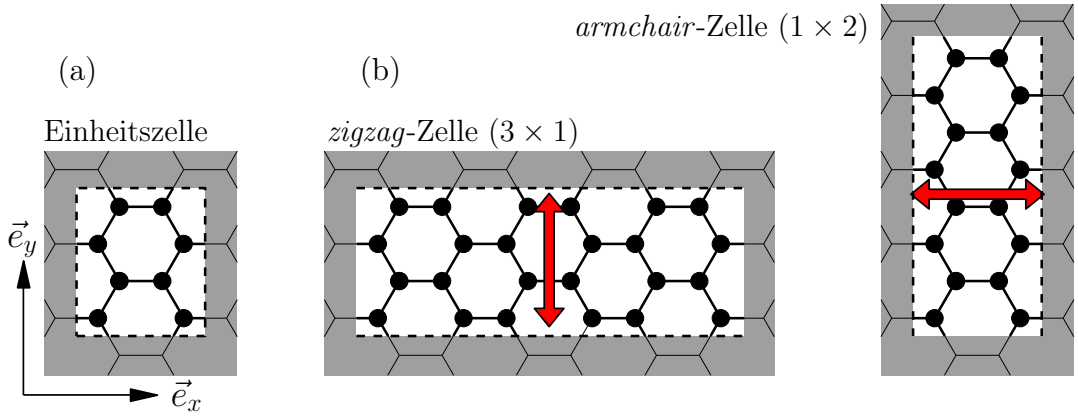


Abbildung 2.2.: Die Einheitszelle (a) und zwei Beispiele größerer Zellen (b) für die Bestimmung der Kantenenergie/-spannung.

Ausgangspunkt der Berechnungen ist die in Abb. 2.2(a) dargestellte Einheitszelle, bestehend aus 8 Atomen. Die beiden anderen in Abb. 2.2(b) dargestellten Zellen entstehen durch mehrmaliges Kopieren der Einheitszelle in $\vec{e}_x$- bzw. $\vec{e}_y$-Richtung. Werden die jeweiligen Zellen in Richtung des roten Pfeils gemäß Abb. 2.2(b) periodisch fortgesetzt betrachtet, so entstehen freie Ränder mit entsprechender *zigzag*- bzw. *armchair*-Geometrie. Das Molekulardynamikprogramm LAMMPS [46] bietet die Möglichkeit für eine vorgegebene Zelle anzugeben in welche Richtung diese periodisch fortgesetzt oder als eine "echte" Kante in Rechnung zu stellen ist. Eine statische Rechnung sucht das Minimum der Gesamtenergie und liefert den entsprechenden numerischen Wert. Es wird die energieminimale Lage der Atome in der jeweiligen Zelle gesucht, ohne die Abmessungen der Zelle zu verändern. Um nun den Einfluss einer Kante zu berechnen, sind stets zwei Rechnungen durchzuführen. Zunächst wird die Energie $E_{\text{periodisch}}$ aus der in $\vec{e}_x$- und $\vec{e}_y$-Richtung periodisch fortgesetzten Zelle Abb. 2.3(a) berechnet. In einem zweiten Schritt wird die Energie E_{kante} derselben Zelle mit periodischen Randbedingungen in $\vec{e}_x$ Richtung (roter Pfeil in Abb. 2.3(b)) ermittelt. Die gesuchte Kantenenergie ergibt sich somit aus der Differenz beider Energien bezogen auf die doppelte Länge der "echten" Kante, gemäß

$$\gamma(\epsilon) = \frac{1}{2L(\epsilon)} \left(E_{\text{periodisch}} - E_{\text{kante}} \right). \tag{2.2}$$

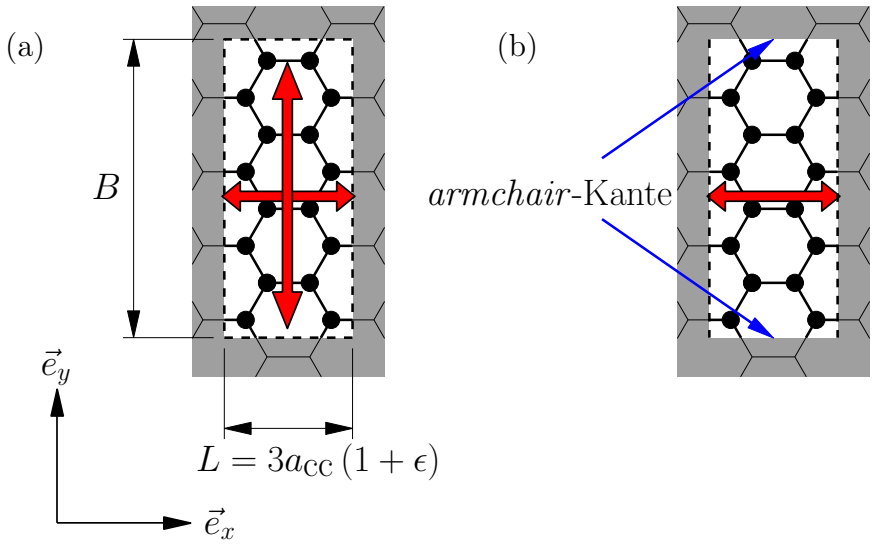


Abbildung 2.3.: 1×2 *armchair*-Zelle mit periodischen Randbedingungen in $\vec{e}_x$- und $\vec{e}_y$-Richtung (a), bzw. periodisch fortgesetzt nur in $\vec{e}_x$-Richtung (b).

Die doppelte Länge ist deshalb zu verwenden, weil jeweils zwei freie Kanten der Länge L entstehen, wenn in der Richtung normal auf die freie Kante keine periodische Randbedingung verwendet wird.
Um zu überprüfen ob die auf diese Weise berechnete Kantenenergie von der Breite der jeweiligen Zelle unabhängig ist, wurden für *armchair*- und *zigzag*-Kanten jeweils 10 verschiedene Zellen unterschiedlicher Breite (B in Abb. 2.3(a)) in Rechnung gestellt.

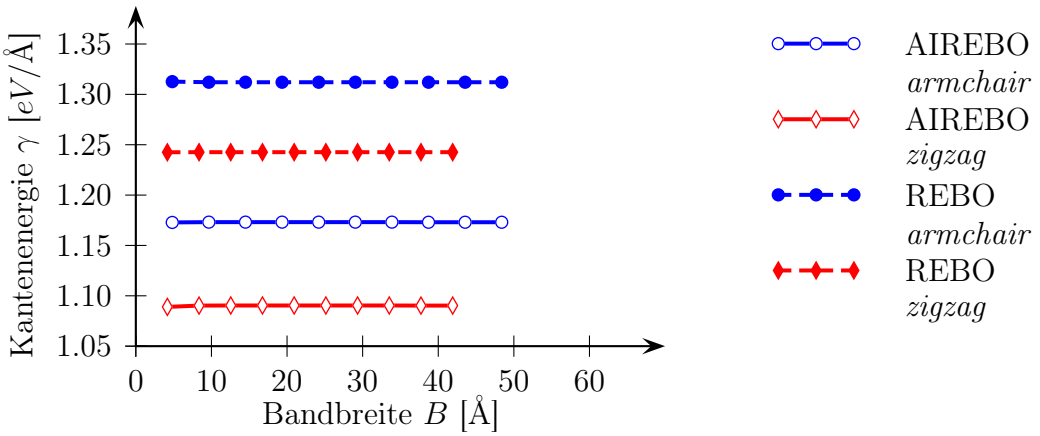


Abbildung 2.4.: Berechnete Kantenenergie in Abhängigkeit von der Bandbreite.

Abbildung 2.4 zeigt die Kantenenergien in Abhängigkeit von der Bandbreite B, wobei für ausreichend großes B praktisch keine Abhängigkeit von der Größe der Zelle, sondern nur vom verwendeten Potential und der Kantengeometrie erkennbar ist.

Die Bestimmung der Kantenspannung für kleine Verzerrungen ($\epsilon \ll 1$) erfolgt mit Hilfe von (2.1). Zu diesem Zweck ist die Kantenenergie für verschiedene Werte der Verzerrung zu berechnen. Abbildung 2.3 zeigt, dass die Abmessung der Zelle in jene Richtung verändert werden muss, die periodisch fortgesetzt wird. In Abb. 2.5(b) sind die berechneten Energien E_{kante} für eine (1×4) *armchair*- bzw. für eine (4×1) *zigzag*-Zelle in Abhängigkeit von der aufgebrachten Verzerrung dargestellt. Die jeweiligen Energieverläufe sind allerdings in den Ursprung des Koordinatensystems verschoben, weil in weiterer Folge nur die Steigungen von Interesse sind. Abbildung 2.5(a) zeigt die mit (2.2) berechnete Kantenenergie, wobei die Abhängigkeit von der Verzerrung in der Länge $L(\epsilon)$ berücksichtigt wird. Um die Kantenenergie in Abhängigkeit von der Verzerrung ϵ zu berechnen, sind wiederum für ein und dieselbe Zelle zwei Rechnungen mit verschiedenen Randbedingungen durchzuführen, um mit den berechneten Energien gemäß (2.2) die Kantenenergie zu ermitteln.

Diskussion der Ergebnisse und Vergleich mit quantenmechanischer Rechnung

Die oben skizzierte Vorgehensweise wurde bereits im Zuge einer quantenmechanischen Analyse [28] angewendet, und wie oben dargestellt für eine molekularstatische Simulation mit LAMMPS adaptiert. Die Wahl der untersuchten Einheitszellen ist ebenfalls der Arbeit [28] entnommen, was den direkten Vergleich der Ergebnisse zweier grundlegend unterschiedlicher atomistischer Modelle erlaubt. Die graphische Darstellung der Resultate einer quantenmechanischen Analyse sind der Arbeit [28] entnommen und in Abb. 2.6 angegeben. Die Gestaltung der Abb. 2.5 wurde eben dieser Darstellung angepasst, um einen direkten Vergleich der jeweiligen Ergebnisse zu erleichtern.

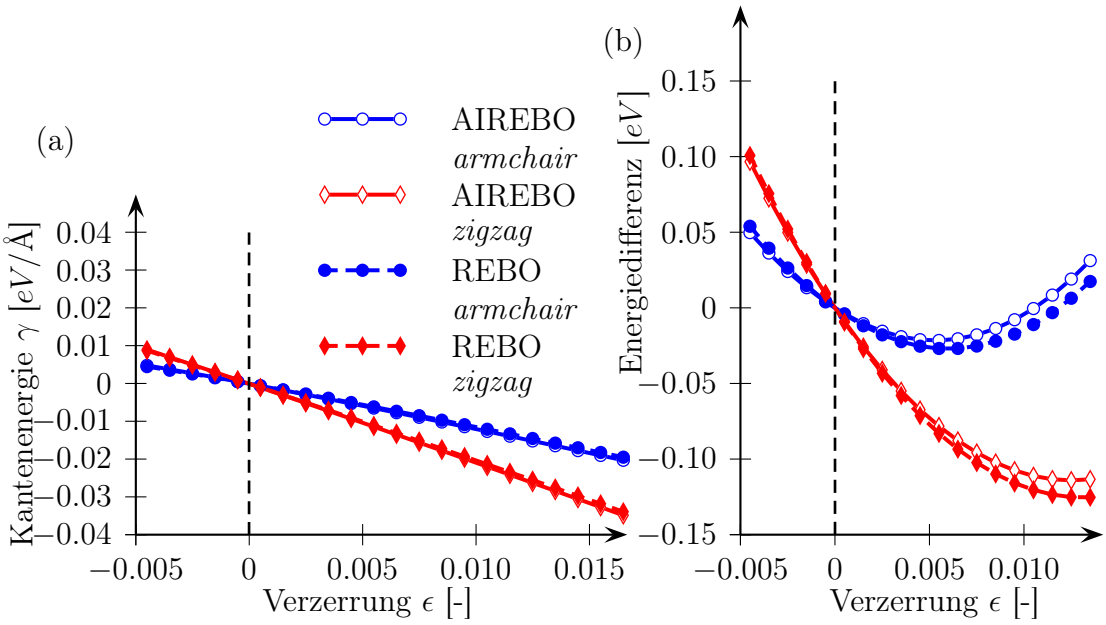


Abbildung 2.5.: Energieverläufe für 1×4 *armchair*- bzw. 4×1 *zigzag*-Zelle. Die Steigung der Kantenenergie repräsentiert entsprechend (2.1) die Kantenspannung (a). Energiedifferenz (2.2) in den Ursprung verschoben (b).

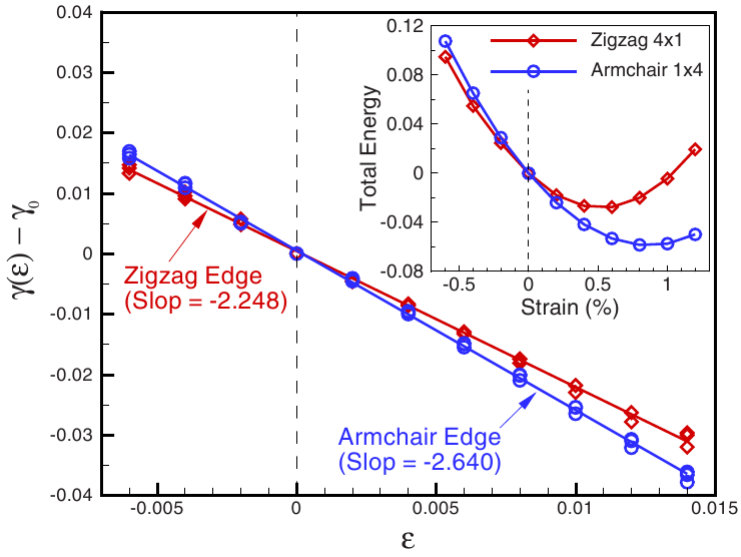


Abbildung 2.6.: Kantenenergie in eV/Å, bzw. Gesamtenergie in eV (Insert) einer 1×4- bzw. 4×1-Zelle in Abhängigkeit von der Verzerrung aus einer *Ab initio*-Rechnung [28].

Zusätzlich zu den beiden Abbildungen sind die entsprechenden Zahlenwerte in Tab. 2.1 zusammengefasst.

Tabelle 2.1.: Vergleich der Ergebnisse aus quantenmechanischer [28] und molekularstatischer Rechnung.

	Kantenenergie γ in $eV/Å$		Kantenspannung f in $eV/Å$		Abstand a_{CC} in Å	Abstand a_{CC}^{kante} in Å
	armchair	*zigzag*	*armchair*	*zigzag*	*armchair*	*armchair*
DFT [28]	1,243	1,533	-2,64	-2,248	1,420	1,24
MM REBO	1,317	1,247	-1,061	-1,971	1,397	1,37
MM AIREBO	1,178	1,094	-1,128	-2,035	1,397	1,37

Bevor die Ergebnisse diskutiert und verglichen werden, sei folgende grundlegende Überlegung vorausgeschickt.

Betrachtet man eine *armchair*-Kante, so fällt auf, dass Kohlenstoffbindungen parallel zur Kante verlaufen, vgl. Abb. 2.3(b). Beide Bindungspartner haben jeweils einen ungesättigten Bindungsteil aufgrund der getrennten Bindungen, der die erhöhte Energie am Rand verursacht. Diese freien Bindungsteile werden zwischen diesen beiden Kohlenstoffatomen eine stärkere kovalente Dreifachbindung (sp^1) bilden, was mit einer niedrigeren Energie verbunden ist. Diese stärkere Dreifachbindung zieht die beiden Bindungspartner näher zueinander, wodurch der Bindungsabstand gegenüber dem Gleichgewichtsabstand a_{CC} einen geringeren Wert annehmen wird. Trotz dieses verringerten Abstandes nimmt die Periodenlänge am Rand zu. Derselbe Vorgang der Sättigung von Bindungsteilen ist im Falle einer *zigzag*-Kante Abb. 2.2(b) nicht möglich, weil die entsprechenden Atome zu weit voneinander entfernt sind. Es besteht daher keine Möglichkeit die Energie zu verringern. Aufgrund dieser Überlegung muss einerseits die Kantenenergie einer *armchair*-Kante tendenziell geringer sein als die einer *zigzag*-Kante, und andererseits ist eine messbare Veränderung des Abstandes zweier Kohlenstoffatome am Rand im Falle einer *armchair*-Kante zu erwarten.

Die Ergebnisse aus der quantenmechanischen Analyse, Abb. 2.6 bzw. Tab. 2.1, zeigen sowohl die höhere Kantenenergie für eine *zigzag*-Kante im Vergleich zu einer *armchair*-Kanten, als auch den kleineren Bindungsabstand ($a_{CC}^{kante} < a_{CC}$) für *armchair*-Bindungen nahe der Kante. Die Ergebnisse der molekularstatischen Rechnung zeigen ebenfalls den verminderten Atomabstand nahe der Kante im Falle der *armchair*-Kante. Die Berechnung der Kantenenergie allerdings liefert den größeren Wert für eine *armchair*-Kante, entgegen obiger Überlegung und dem Ergebnis der DFT-Analyse. Ein weiterer Unterschied ist bei der Kantenspannung zu bemerken. Die *Ab initio* Rechnung liefert für die *zigzag*-Kante die größere Kantenspannung, wohingegen die klassische Rechnung der *armchair*-Kante den größeren Wert zuordnet. Die unterschiedlichen Ergebnisse sind deutlich

beim Vergleich der Abb. 2.5 mit Abb. 2.6 erkennbar.
Als eine mögliche Erklärung der hier offensichtlich auftretenden Unterschiede kann die vereinfachende Modellierung chemischer Bindungen durch entsprechende nichtlineare Federn angeführt werden. Umso interessanter ist die Tatsache, dass auch verschiedene DFT-Analysen aufgrund unterschiedlicher Funktionale nicht dieselben Kantenenergien bzw. -spannungen liefern. Eine Zusammenstellung unterschiedlicher Ergebnisse findet man bei [39]. Bei den in dieser Arbeit verwendeten empirischen Potentialen muss man sich immer der Zielsetzung der Entwickler bewusst sein. Es wurden verschiedene Einzelterme mit entsprechenden Konstanten zu einem Vielteilchenpotential zusammengebaut. Die Vielzahl der im Potential auftretenden Konstanten wurde so gewählt, dass quantenmechanische oder experimentelle Ergebnisse reproduziert werden können. Es ist daher nicht zu erwarten, dass die auf diese Weise gefundenen Potentiale alle chemischen und physikalischen Eigenschaften hinreichend genau wiedergeben können.
Obwohl die quantitativen Ergebnisse der klassischen Analyse offensichtlich nur in Bezug auf die Größenordnung mit quantenmechanischen Rechnungen übereinstimmen, wird der qualitative Einfluss der Kante doch richtig erfasst. Das negative Vorzeichen der Kantenspannung zeigt eine am Rand wirkende Druckspannung an. Mit anderen Worten wird die Ausdehnung des Randes durch weiter innen liegende Bereiche behindert, was mechanisch durch die auftretende Druckspannung ausgedrückt wird. Ob und wie sich dieser lokale Effekt am Rand auf die globale Struktur auswirkt, soll Gegenstand der weiteren Ausführung sein.
In diesem Abschnitt wurde gezeigt, wie mit kleinen Zellen der Einfluss einer Kante berechnet werden kann. Für die weitere Darstellung ist festzuhalten, eine Kante in einem *Graphene-sheet* bewirkt eine am Rand konzentrierte Oberflächenenergie und eine daraus resultierende negative Kantenspannung, unabhängig von der Geometrie der betrachteten Kante.
Um in weiterer Folge einen Vergleich mit einer kontinuumsmechanischen Analyse zu ermöglichen, sind die elastischen Eigenschaften von Graphen von Interesse. Mit den bereits verwendeten Zellen können diese sehr einfach bestimmt werden.

2.1.3. Elastische Eigenschaften von Graphen

Die für die Ermittlung der Kantenenergie bzw. -spannung verwendeten Zellen werden nun für die Berechnung weiterer Eigenschaften von Graphen benutzt. Im vorigen Abschnitt wurde mit dem REBO- und dem AIREBO-Potential die Kantenenergie bzw. die daraus resultierende Kantenspannung berechnet. Die ermittelten Unterschiede zu quan-

tenmechanischen Rechnungen erscheinen in Anbetracht der eigentlichen Zielsetzung einer empirischen Formulierung von Kraftfeldern vernachlässigbar. Stehen die mechanischen Eigenschaften einer Struktur im Vordergrund, so muss das empirische Potential die elastischen Eigenschaften hinreichend genau abbilden können. Im Folgenden geht es um die Berechnung entsprechender Steifigkeiten, und deren Vergleich mit Ergebnissen einer *Ab initio* Formulierung [30].

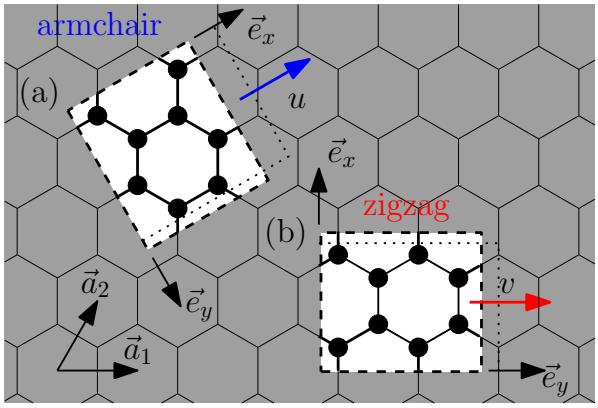


Abbildung 2.7.: Einheitszellen zur Bestimmung der Dehnsteifigkeit in *armchair*-Richtung (a) bzw. *zigzag*-Richtung (b).

Zur Bestimmung der Dehnsteifigkeit werden Zugversuche an einer Zelle mit periodischen Randbedingungen auf numerischen Weg durchgeführt. Abbildung 2.7 zeigt die schon bei der Berechnung der Kantenenergie verwendeten Einheitszelle. In beide Richtungen werden periodische Randbedingungen berücksichtigt. Es stellt sich die Frage in welche Richtung die Zelle belastet werden soll, wobei für kleine Verzerrungen eine hexagonale Struktur als isotrop vorausgesetzt werden darf [31]. Die Zelle wird sowohl in *armchair*- als auch in *zigzag*-Richtung belastet, wobei ein isotropes Verhalten für kleine Verzerrungen als Verifikation der Simulationsergebnisse dient. Das Aufbringen eines linearen Verschiebungsfeldes u gemäß Abb.2.7(a) bewirkt eine Belastung in *armchair*-Richtung. Die Zelle wird schrittweise in $\vec{e}_x$-Richtung vergrößert, wobei aufgrund des *Poisson*-Effekts eine Verschiebung in negativer $\vec{e}_y$-Richtung aufzubringen ist. Bei gegebener Verschiebung u wird also jene Verschiebung senkrecht dazu ermittelt, die die niedrigste Gesamtenergie liefert. Auf diese Weise kann mit periodischen Randbedingungen in beiden Richtungen ein Zugversuch in *armchair*-Richtung realisiert werden. Mit einer entsprechenden Vorgehensweise an der Zelle Abb. 2.7(b) wird ein Zugversuch in *zigzag*-Richtung durchgeführt.

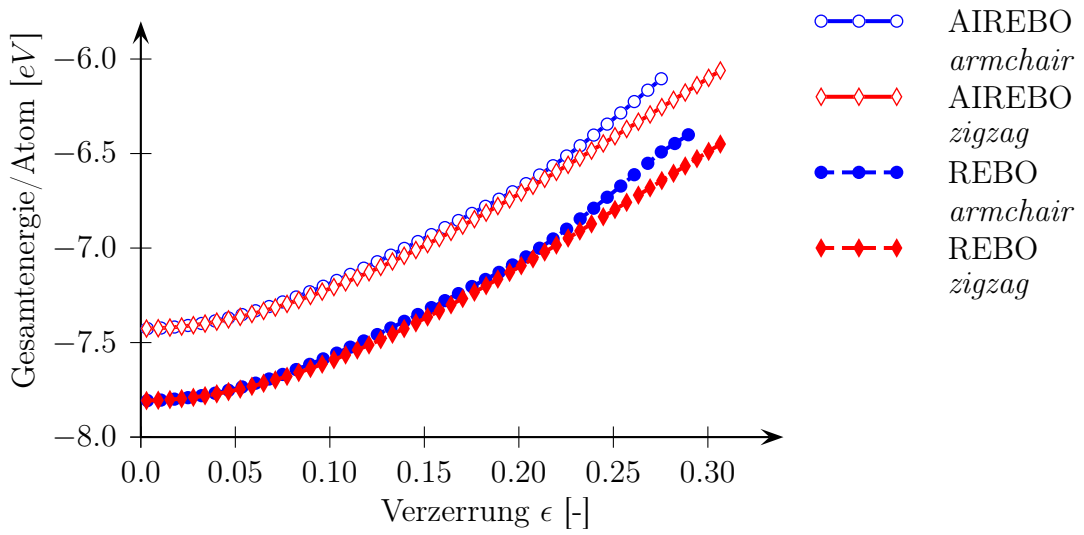


Abbildung 2.8.: Gesamtenergie pro Atom für Zugversuche gemäß Abb. 2.7 in *armchair*- bzw. *zigzag*-Richtung unter Verwendung des REBO und des AIREBO-Potentials.

Abbildung 2.8 zeigt den zu erwartenden quadratischen Zusammenhang zwischen Verzerrung und Energie im Bereich geringer Verzerrungen. Bei gleichem Potential ist der Unterschied zwischen *armchair* und *zigzag* erst für größere Verzerrungen signifikant. Eine Untersuchung dieses anisotropen nichtlinearen Verhaltens in Bezug auf die mechanischen Eigenschaften ist bei [38] zu finden. Für die vorliegende Simulation ist die Richtungsunabhängigkeit der erzielten Ergebnisse für kleine Verzerrungen eine Bestätigung der korrekten Aufbereitung der Problemstellung für LAMMPS [46]. Der Unterschied zwischen REBO und AIREBO wurde bereits bei der Untersuchung der kleinsten Elementarzelle im vorigen Abschnitt diskutiert. Die Steigung der jeweiligen Energieverläufe ist proportional der mechanischen Spannung. Der verwendete Proportionalitätsfaktor und die damit verbundenen Abweichungen für die Werte der Festigkeiten bzw. Elastizitätsmodule sind in der Literatur ausführlich diskutiert (*Yakobson'sches Paradoxon* [25]). Die Problematik ist jedoch offensichtlich in der nicht eindeutig definierbaren Dicke einer Graphenschicht begründet. Wenn Graphen als elastische Platte in einer kontinuumsmechanischen Analyse modelliert werden soll, so sind die entsprechenden Dehn- und Biegesteifigkeiten an einen endlichen Wert der Plattendicke geknüpft. Aber wie dick ist eine Schicht bestehend aus hexagonal, eben angeordneten Kohlenstoffatomen?
Eine häufig anzutreffende Definition der Schichtdicke ist der Abstand zweier Graphenschichten in Graphit (Abb. 1.1(a)) $h = 3,35\text{Å}$ [50]. Dieser Wert wird für die folgenden, in Tab. 2.2 dargestellten, Vergleiche unreflektiert verwendet.

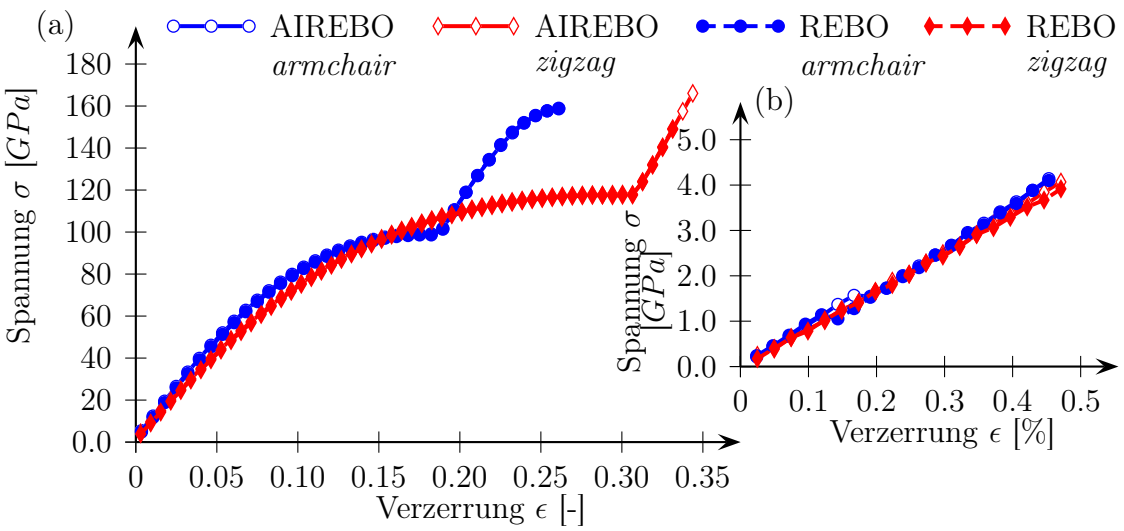


Abbildung 2.9.: Spannungen in Abhängigkeit von der in *armchair*- und *zigzag*-Richtung aufgebrachten Verzerrungen (a). Der Spannungsverlauf für sehr kleine Dehnungen (b).

Aus dem bekannten Verlauf der Verzerrungsenergiedichte der Einheitszelle bestimmt sich die Spannung aus

$$\sigma_i = \frac{\partial}{\partial \epsilon_i}\frac{U}{A^0 h} = \frac{1}{A^0 h}\frac{\partial U}{\partial \epsilon_i}. \tag{2.3}$$

Die Fläche der jeweiligen Einheitszelle ist mit Hilfe des Gleichgewichtsabstandes zweier Kohlenstoffatome einfach darstellbar, und beträgt für die in Abb. 2.7 dargestellte Zelle $A^0 = 6\sqrt{3}a_{\mathrm{CC}}^2 \approx 20,3\text{Å}^2$. Aus dem bekannten Verlauf der Energie (Abb. 2.8) berechnet sich, unter Berücksichtigung der Definition der Spannung (2.3), die Spannungs-Dehnungskurve des einachsigen Zugversuches, die in Abb. 2.9(a) dargestellt ist. Bemerkenswert ist die Tatsache, dass die beiden verwendeten Potentiale für kleine Verzerrungen sehr ähnliche Kurven liefern. Für größere Werte der Verzerrung sind die Kurven für Belastungen in *armchair*- bzw. *zigzag*-Richtung deutlich verschieden. Für kleine Verzerrungen ist in Abb. 2.9(b) der Zusammenhang zwischen Spannung und Verzerrungen noch einmal dargestellt. Die Steigung dieser Geraden durch den Ursprung stellt den E-Modul dar, der sich mit

$$E = \frac{1}{A^0 h}\frac{\partial^2 U}{\partial \epsilon^2}\bigg|_{\epsilon=0} \tag{2.4}$$

berechnen lässt. Der Grund für die stark streuenden Ergebnisse der publizierten Werte für die mechanischen Eigenschaften (eine Zusammenstellung ist bei [25] zu finden) liegt in erster Linie an der Wahl der in Rechnung gestellten Schichtdicken. Eine Größe die bei Scheibenproblemen häufig auftritt, ist die Dehnsteifigkeit $D = \frac{Eh}{1-\mu^2}$. Diese Grö-

ße kann ohne der Definition einer Plattendicke direkt aus dem Energieverlauf Abb. 2.8 mit (2.4) berechnet werden. Für die berechneten Punkte in Abb. 2.8 liefert eine entsprechende Regressionsparabel die Grundlage für die Berechnung des E-Moduls gemäß (2.4). Wird ein größerer Bereich für die Dehnung betrachtet, so ist ein Unterschied zwischen *armchair*- und *zigzag*-Richtung zu bemerken. Für größere Dehnungen zeigt die *armchair*-Richtung eine größere Steifigkeit ($D = 310N/m$) als für eine Belastung in *zigzag*-Richtung ($D = 272N/m$). Dieses richtungsabhängige Verhalten ist qualitativ bereits anhand der unterschiedlichen Steigungen in Abb. 2.9 zu erkennen. Dieser Effekt wird bei [25] genauer analysiert, spielt aber für kleine Werte ($\epsilon \to 0$) keine Rolle, und wird im Folgenden nicht weiter berücksichtigt.
Eine weitere wichtige Größe kann aus den bis jetzt erzielten Resultaten abgeleitet werden. Bei vorgegebener Verschiebung in einer Richtung, wurde auf die dazu normal stehende Richtung jene Verschiebung für die geringste Gesamtenergie gesucht. Dieser Zusammenhang liefert beispielsweise für den Zugversuch in *armchair*-Richtung die *Poisson*-Zahl

$$\mu = -\frac{\epsilon_x}{\epsilon_y}.$$

Bevor diese Ergebnisse in Bezug auf bekannte Resultate diskutiert werden, sei noch eine weitere wichtige Größe berechnet. Wird eine elastische Platte aus der Ebene herausgebogen, so leistet sie dieser Verformung einen Widerstand, der in der Biegesteifigkeit zum Ausdruck kommt.

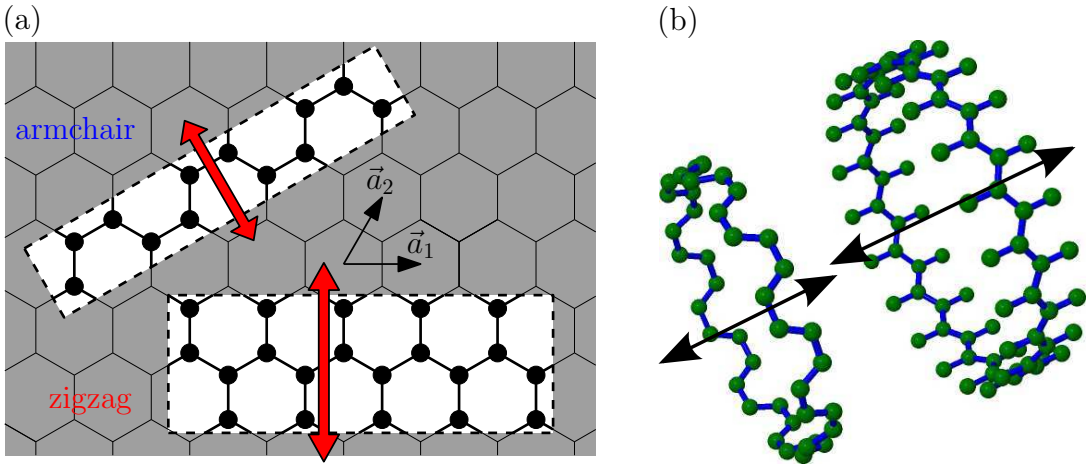


Abbildung 2.10.: Beispiele zweier Einheitszellen zur Bestimmung der Biegesteifigkeit in *armchair*- und *zigzag*-Richtung (a). (10,10) *armchair*- bzw. (20,0) *zigzag*-Zellen deren Gesamtenergie mit periodischen Randbedingungen in axialer Richtung berechnet wird (b).

Aufgrund der Symmetrie einer hexagonalen Struktur sollte für kleine Verzerrungen keine Richtungsabhängigkeit beobachtet werden. Für die Berechnung der Biegesteifigkeit ist ein gegebener Graphenstreifen zu einer Fläche bekannter Krümmung zu verformen. Es liegt daher nahe Kreiszylinder zu formen, deren Krümmung sich aus dem Kehrwert des Radius bestimmt. Um die Geometrie der auftretenden Zellen einfach zu gestalten werden nur *armchair*- und *zigzag*-Richtungen berücksichtigt. Abbildung 2.10(a) zeigt zwei Beispiele solcher Zellen. Werden nun *armchair*- bzw. *zigzag*-Zellen zu Kreiszylindern entsprechender Abmessung gebogen, so entstehen Strukturen, wie sie in Abb. 2.10(b)[4] dargestellt sind, die in axialer Richtung periodisch fortgesetzt Kohlenstoffnanoröhren ergeben (vgl. Abb. 1.1(a)). Abbildung 2.10(b) zeigt somit die kleinste Zelle einer (10,10) *armchair*- bzw. einer (20,0) *zigzag*-Nanoröhre. Für länger werdende Streifen steigen der Umfang und der Radius bei kleiner werdender Krümmung. Der Grenzfall eines unendlich großen Streifens entspricht dem unverformten geraden Grundzustand. Die Berechnung des Gleichgewichtszustandes erfolgt bei periodischen Randbedingungen in axialer Richtung, wobei die Abmessung der Zelle in dieser Richtung variiert wird. Der Zuwachs der Verzerrungsenergiedichte aufgetragen über der Krümmung ist in Abb. 2.11 dargestellt.

[4]Für alle räumlichen Darstellungen von Kohlenstoffverbindungen in dieser Arbeit, wurde das Darstellungsprogramm für chemische Verbindungen JMOL [26] verwendet.

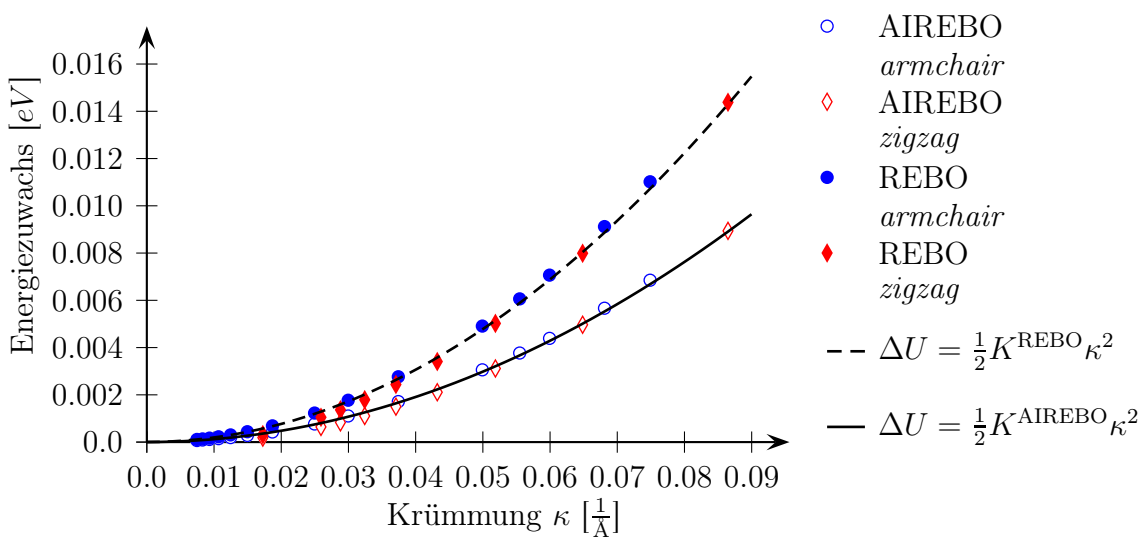


Abbildung 2.11.: Zuwachs der Verzerrungsenergiedichte in Abhängigkeit von der Krümmung für *armchair*- bzw. *zigzag*-Richtung unter Verwendung des REBO und des AIREBO-Potentials.

Ähnlich der Berechnung der Dehnsteifigkeit aus (2.4) liefert

$$K = \left.\frac{\partial^2 \Delta U}{\partial \kappa^2}\right|_{\kappa=0} \tag{2.5}$$

die Biegesteifigkeit von Graphen, ohne der Wahl einer Schichtdicke. Gleichung (2.5) drückt also die Steifigkeit als zweite Ableitung des Zuwachses der Verzerrungsenergiedichte nach der Krümmung aus, wobei mit Multiplikation der entsprechenden Fläche der betrachteten Einheitszelle die in Tab. 2.2 angegebene Dimension erzielt wird. Die in Abb. 2.11 dargestellten Ergebnisse zeigen sehr schön die Richtungsunabhängigkeit der Biegesteifigkeit. Der signifikante Unterschied zwischen den beiden Potentialen ist auf die beiden zusätzlichen Terme im AIREBO-Potential, vgl. Anhang C, zurückzuführen. Eine genauere Analyse des AIREBO-Potentials zeigt, dass das *Lennard-Jones*-Potential die Biegesteifigkeit praktisch nicht beeinflusst, wohingegen der zusätzliche Torsionsanteil diese verringert. Abbildung 2.11 zeigt zusätzlich zu den berechneten Werten zwei Regressionsparabeln, die eine Bestimmung der jeweiligen Biegesteifigkeiten gemäß (2.5) erlauben.

Tabelle 2.2.: Vergleich der linear elastischen Materialkennwerte auf Basis einer molekularmechanischen Rechnung mit Ergebnissen quantenmechanischer Rechnungen [30].

	E-Modul[a] E in TPa	Dehnsteifigkeit D in N/m	*Poisson*-Zahl μ	Biegesteifigkeit K in $nNnm$
DFT [30]	-	345	0,149	0,238
REBO	0,897	304	0,11	0,24
AIREBO	0,911	310	0,13	0,15

[a]Für die Berechnung gemäß (2.4) wurde wie eingangs erwähnt $h = 3,35$Å [50] verwendet.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass die beiden empirischen Potentiale die Kantenenergie bzw. -spannung sowie die elastischen Eigenschaften von Graphen richtig abbilden. Der Unterschied in den quantitativen Werten für Kantenenergie bzw. - spannung für die beiden untersuchten Kantengeometrien ist beachtenswert, aber für die weitere Darstellung ist lediglich die Druckspannung am Rand für den Einfluss auf die globale Struktur entscheidend. Ein Vergleich der besprochenen Eigenschaften mit entsprechenden *Ab initio* Analysen ist in den beiden Tabellen (Tab. 2.1, Tab. 2.2) angeführt.

2.2. Einfluss der Kantenenergie auf die globale Struktur von Graphen

Im vorigen Abschnitt wurden stets Energien für Zellen mit einigen wenigen Atomen berechnet, um den Einfluss einer Kante quantitativ zu beschreiben. Die unterschiedlichen Resultate führen unweigerlich zur Frage: Wozu mit klassischen Kraftfeldern Strukturen auf atomarer Ebene untersuchen? Die Antwort auf diese Frage liegt in der Größe der berechenbaren Strukturen mit empirischen Potentialen begründet. *Ab initio*-Rechnungen liefern zwar sehr genaue Werte für die Kantenenergie und -spannung, aber wie sich diese auf größere Strukturen auswirken, kann aufgrund numerischer Einschränkungen nicht berechnet werden.

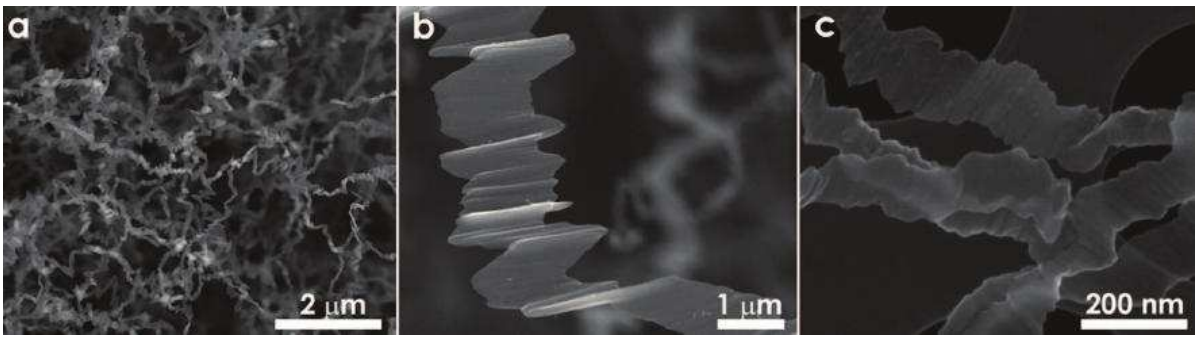


Abbildung 2.12.: Rasterelektronenmikroskop-Aufnahmen von Graphenbändern mit unterschiedlicher Vergrößerung [12].

Abbildung 2.12 zeigt, dass sich Graphen unter Laborbedingungen keineswegs als flache Struktur darstellt. In natürlicher Weise ist eine Vielzahl von Effekten für diese globale Form von Graphenbändern verantwortlich. Darüber hinaus ist es experimentell sehr schwierig zu verhindern, dass sich die ungesättigten Bindungen mit Bestandteilen der umgebenden Atmosphäre verbinden und so die Kantenspannung reduzieren. Ob und wie sich allerdings die im vorigen Abschnitt berechnete Kantenspannung auf Graphen auswirkt, soll die nun folgende molekularmechanische Analyse zeigen. Im Speziellen soll eine kreisförmige Graphenschicht untersucht werden. Im Gegensatz zu Graphenbändern, die von YAKOBSON [7] und anderen [54, 63] bereits analysiert wurden, ist die Kante einer nahezu kreisrunden Graphenschicht eine Kombination aus *armchair*- und *zigzag*-Anteilen. Im molekularmechanischen Modell wird zusätzlich ein Substrat berücksichtigt, das über das *Lennard-Jones*-Potential auf das Graphen einwirkt und als eine nichtlineare Bettung aufgefasst werden kann. Darüber hinaus wird für alle folgenden Simulationen nur mehr vom AIREBO-Potential Gebrauch gemacht.

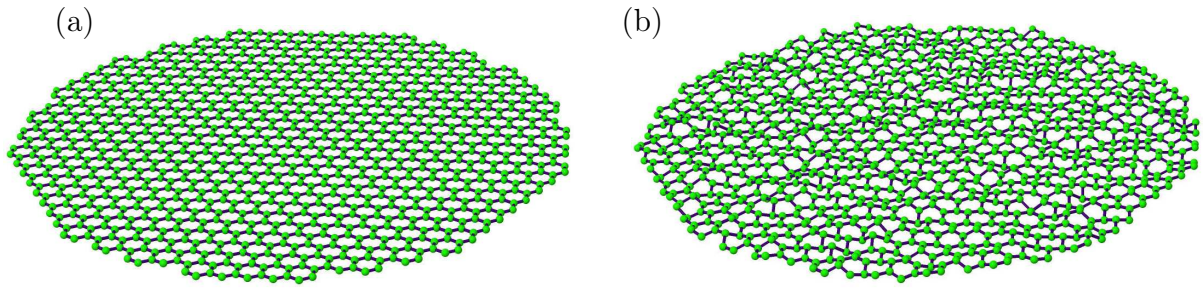


Abbildung 2.13.: Zwei verschiedene Startkonfigurationen (1090 Kohlenstoffatome) für die Minimierung des Gesamtpotentials. Rein geometrisch konstruiertes Patch (a), dasselbe Graphenpatch mit zufällig verteilter Verschiebung einzelner Atome in transversaler Richtung (b).

Abbildung 2.13(a) zeigt ein Graphenpatch bestehend aus 1090 Kohlenstoffatomen, mit einem Radius von $R \approx 3nm$. Aus geometrischen Gründen ist es nicht möglich, aus einem hexagonalen Gitter einen perfekten Kreis zu schneiden. Die bestmögliche Näherung eines Kreises dieser Abmessung ergibt das in Abb. 2.13(a) dargestellte Patch, dessen Kante sich eindeutig aus *armchair*- und *zigzag*-Anteilen zusammensetzt. Mit der Energie eines Atoms im Grundzustand Abb. 2.1(a), der mittleren Kantenenergie aus Tab. 2.1 und der Abmessung des Patchs kann die zu erwartende Gesamtenergie mit

$$\begin{aligned} E_{\text{Patch}} &= E_{\text{Atom}} N_{\text{Atom}} + \gamma 2R\pi \\ &= -7,4275 \frac{eV}{\text{Atom}} 1090 + 1,2 \frac{eV}{\text{Å}}\ 60\text{Å}\ \pi \approx -7869eV \end{aligned} \tag{2.6}$$

abgeschätzt werden. Für die tatsächliche statische Energieminimierung des Patchs ist das in LAMMPS implementierte nichtlineare konjugierte Gradientenverfahren (nach *Polak-Ribiere* [46]) zur Anwendung gekommen. Die Startkonfiguration Abb. 2.13(a) wurde aus einer größeren Graphenschicht herausgeschnitten, und liefert vor der Minimierung eine Energie von $E = -7865,06eV$. Dieses Ergebnis berücksichtigt also nur den Grundzustand der Atome und den Einfluss der Kante, ohne eine Verschiebung der Atome. Diese Gesamtenergie ist sehr nahe der Abschätzung (2.6), in der keine Verformung berücksichtigt ist. Die Suche des Minimums liefert eine geringere Energie von

$$E_{\text{min}} \approx -7882,4eV, \tag{2.7}$$

wobei die Struktur ihren nicht ausgebeulten Charakter behält. Bei genauerer Analyse der gefundenen Gleichgewichtslage ist der größere Abstand zwischen einzelnen Randatomen zu erkennen. Durch eine Verschiebung einzelner Atome in der Ebene, hat sich die Gesamtenergie verringert. Es stellt sich aber die Frage ob diese Gleichgewichtslage dem globalen Minimum dieser Struktur entspricht. Formal ist das Minimum auf einer $3 \times 1090 = 3270$ dimensionalen Energiefläche zu berechnen, von einem Startpunkt aus, der möglicherweise weit von diesem gesuchten Punkt entfernt ist. Im Gegensatz zu einer quasistatischen Analyse wird durch das Auftrennen der entsprechenden Bindungen am Rand die "Last" unmittelbar auf die nicht ausgebeulte Struktur aufgebracht. Es besteht also die Gefahr, dass die Minimierung des Gesamtpotentials nur ein lokales Minimum liefert, welches sich in der Nähe der Startkonfiguration befindet. Um sich von dieser Einschränkung zu befreien, besteht die Möglichkeit, verschiedene Ausgangszustände, also Positionen auf der Energiefläche, zu probieren und die berechneten Energiewerte zu vergleichen. Abbildung 2.13(b) zeigt eine derartige Möglichkeit mit zufällig verteilten

Verschiebungen, einzelner Atome aus der Ebene heraus, eine alternative Startkonfiguration für die Suche des globalen Minimums. Abbildung 2.14(a) zeigt das Resultat der Energieminimierung, mit einer Gesamtenergie von $E = -7885,73eV$. Diese Energie ist kleiner als die Lösung bei der nur Verschiebung in der Ebene auftraten (2.7).

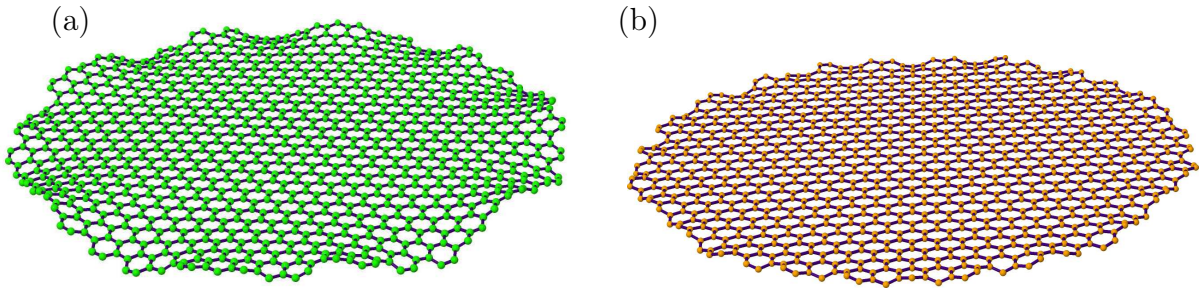


Abbildung 2.14.: Energieminimale Konfigurationen ohne Bettung (a), bzw. mit einer Bettung (b).

Eine weitere Möglichkeit, sogenannte Energiebarrieren zu überwinden, besteht darin, dem System kinetische Energie in Form von Temperatur zur Verfügung zu stellen. Im vorliegenden Fall wurde die Graphenschicht auf $700K$ 1000-Zeitschritte lang gehalten, und anschließend innerhalb von 10000-Zeitschritten auf $0K$ abgekühlt, wobei ein Zeitschritt $1fs = 10^{-15}s$ entspricht. Diese molekulardynamische Analyse, die als simulierte Abkühlung (*simulated annealing*) [6] bezeichnet wird, wurde mit einem kanonischen Ensemble [41] realisiert. Am Ende der dynamischen Analyse wurde zusätzlich eine statische Minimierung der potentiellen Energie durchgeführt. Das auf diese Weise erzielte Ergebnis ist dem auf molekularstatischem Weg erzielten sehr ähnlich.
Um den Einfluss eines Substrates zu studieren, wurde dieselbe Analyse unter Berücksichtigung einer zusätzlichen Graphenschicht durchgeführt. Alle Freiheitsgrade dieses größeren Patchs wurden gesperrt, wodurch zusätzlich die Wirkung der *Van der Waals*-Kräfte in die Minimierung des Gesamtpotentials des kreisförmigen Patchs eingehen. In Abb. 2.14(b) ist die energieminimale Konfiguration des Graphenpatches unter der Wirkung eines Substrates, dieses ist in Abb. 2.14(b) nicht eingezeichnet, dargestellt. Beim Vergleich beider Gleichgewichtslagen in Abb. 2.14 ist deutlich erkennbar, dass eine Bettung die Amplitude der transversalen Verschiebung erwartungsgemäß reduziert, bei gleichzeitiger Erhöhung der Welligkeit in Umfangsrichtung.
Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass mit Hilfe des empirischen Potentials AIREBO sowohl die Kantenenergie bzw. -spannung als auch die elastischen Eigenschaften bestimmt werden können. Ein Vergleich mit entsprechenden Ergebnissen aus quantenmechanischen Analysen zeigt die Qualität dieses Potentials, wodurch eine Ver-

wendung für die Simulation größerer Strukturen gerechtfertigt ist. In diesem Abschnitt wurde für einen kreisförmigen Graphenpatch der Einfluss der Kantenenergie auf die globale Form diskutiert. Die geänderte Bindungsstruktur am Rand bewirkt eine stark am Rand lokalisierte Druckspannung, die eine Verformung des Randes aus der Ebene heraus bewirkt. Im nächsten Abschnitt geht es um eine Beschreibung dieses Problems im Rahmen der Kontinuumsmechanik, mit dem Ziel, ein passendes Stabilitätsproblem zu formulieren. Die Qualität der kontinuumsmechanischen Formulierung ist in Bezug auf die soeben angegebenen Resultate zu messen.

3. Kontinuumsmechanische Betrachtung

In der Kontinuumsmechanik versucht man das Verhalten eines deformierbaren Körpers auf analytische oder numerische Weise zu beschreiben, ohne dabei die atomare Struktur explizit zu betrachten. Bei klassischen Fragestellungen werden Belastungen in Form von Kräften bzw. Verschiebungen aufgebracht, und das Verschiebungs- bzw. Spannungsfeld, das den entsprechenden Randbedingungen genügt, berechnet. Soll mit dieser Vorgehensweise das Verhalten eines endlich großen *Graphene-sheets* beschrieben werden, ist man mit dem Problem konfrontiert, dass keine äußere Belastung im herkömmlichen Sinn auftritt! Auffällig ist weiters, dass gerade ein unbelasteter Rand Ausgangspunkt einer veränderten Gleichgewichtslage ist.
Viele physikalische Effekte führen zu einer Randinstabilität, ähnlich der im Kapitel 2.2 beschriebenen, ohne einer augenscheinlichen äußeren Belastung. Ursachen dafür können plastische Verformungen [14, 16, 49], Phasentransformationen, Temperaturbelastungen sowie Schwellen des Materials [24, 42, 66] sein. Darüber hinaus gibt es auch Berührungspunkte mit der Biologie, wenn es um die Beschreibung der unterschiedlichsten Blattformen mit welligen Rändern als Ursache eines inhomogenen Wachstumsprozesses geht [34, 35].
Elastische Verzweigungsprobleme von trivialen Gleichgewichtslagen von Balken, Platten und Schalen sind vor allem für Ingenieure von großer Bedeutung. Die Modellierung von Graphen, aber auch von *Carbon Nanotubes*, als isotrope Platten bzw. Schalen wurde in der Vergangenheit erfolgreich durchgeführt [2, 65] und soll auch hier die grundlegende Herangehensweise sein. Die oben aufgelisteten möglichen Quellen einer Randinstabilität können auf kontinuumsmechanischer Ebene als Eigenspannungszustand oder als Eigenverzerrungszustand beschrieben werden. Ein Eigenspannungszustand erfüllt die Gleichgewichtsbedingungen, tritt aber nicht zufolge äußerer Belastung, sondern aufgrund anderer Effekte, auf. Rammerstorfer [16, 49] hat mit passend gewählten Eigenspannungszuständen das Beulverhalten von Blechstreifen analysiert, das bei Kaltwalzvorgän-

gen aufgrund inhomogener Reduktion der Blechdicke, also durch plastische Verformung, beobachtet werden kann. Die Strategie, das Verzerrungsfeld passend zu modifizieren ist eine allgemeinere, weil nur auf Ebene der Kinematik Veränderungen gemacht werden. Der Begriff der Verzerrung sowie die Aufgabe, Abstände auf Flächen zu messen, ist untrennbar mit dem Begriff der Metrik verbunden. Wenn in der weiteren Darstellung von nicht-*Euklidischer* Metrik die Rede sein wird, so ist damit eine für unsere Bedürfnisse geeignete Modifikation der entsprechenden Metrik der Platte gemeint. Stellvertretend für die Vielzahl von Arbeiten auf diesem Gebiet sei auf [4, 40, 53] verwiesen. Vor diesem Hintergrund werden im nächsten Abschnitt die notwendigen Plattengleichungen hergeleitet.

3.1. Herleitung der *Föppl von Kármán'schen* Plattengleichungen mit nicht-*Euklidischer* Metrik

Mit der Zielsetzung, das Verhalten von endlich großen *Graphene-sheets* als Stabilitätsproblem zu formulieren, sind die nichtlinearen *Föppl von Kármán'schen* (FvK) Plattengleichungen in Polarkoordinaten gesucht. Die Herleitung kann prinzipiell auf zwei Arten erfolgen. Die synthetische Methode der Herleitung geht in drei Schritten vor, um die Belastungen mit den Verschiebungen in Verbindung zu bringen. Im Gegensatz dazu wird bei der analytischen Vorgehensweise die Verzerrungsenergie der Platte nach den Verschiebungen variiert. Diese Methode ist zwar mathematisch ein wenig aufwendiger, liefert aber zusätzlich zu den gesuchten partiellen Differentialgleichungen die Randbedingungen des Problems. Nachfolgend werden beide Methoden angeführt, wobei der analytischen Methode mehr Raum gewidmet ist. Der Grund dafür liegt in der Schwierigkeit der richtigen Formulierung der Randbedingungen für eine Platte mit veränderter Metrik begründet.

Annahmen für die Herleitung der Plattengleichungen endlich großer Durchbiegung

Unabhängig von der verwendeten Methode sind die folgenden Annahmen für die weitere Herleitung notwendig:

(I) Die Plattendicke h ist viel kleiner als der Radius R ($h \ll R$).

(II) Der Betrag der transversalen Verschiebung ist von gleicher oder kleinerer Größenordnung wie die Plattendicke $|w| \leq \mathcal{O}(h)$, aber kleiner als die Abmessung der Platte $|w| \ll R$.

(III) Der Betrag der Ableitungen ist klein $|\frac{\partial w}{\partial r}| \ll 1$, $|\frac{\partial w}{\partial \varphi}| \ll 1$.

(IV) In den Verschiebungs-Verzerrungs-Beziehungen werden nur jene nichtlinearen Terme berücksichtigt, die von $\frac{\partial w}{\partial r}$ und $\frac{\partial w}{\partial \varphi}$ abhängen. Alle anderen nichtlinearen Terme werden vernachlässigt.

(V) Alle Verzerrungskomponenten sind klein, somit kann lineares Materialverhalten vorausgesetzt, und das *Hooke'sche* Gesetz angewendet werden.

(VI) *Kirchhoff'sche* Hypothese: Spannungen, die Flächen zugeordnet sind, die parallel zur Mittelfläche liegen, werden vernachlässigt $\sigma_{3i} = \sigma_{i3} = 0$ (= ebener Spannungszustand). Die Verzerrungen sind über die Plattendicke linear veränderlich.

Eine streng mathematische Rechtfertigung dieser erstmals von v. Kármán [61] getroffenen Annahmen ist bei Audoly [5] bzw. [13] zu finden.
Die FvK-Gleichungen in Polarkoordinaten mit den entsprechenden Randbedingungen werden unter Verwendung dieser Vereinfachungen abgeleitet.

3.1.1. Die synthetische Herleitung

Prinzipiell ist diese Vorgehensweise jene, die in klassischen Lehrbüchern über Flächentragwerke wie jenes von Girkmann [21] oder Timoshenko [59], aber auch in moderner Darstellung von Audoly [5] nachzulesen ist. Sehr oft reduziert sich die Herleitung auf die Verwendung kartesischer Koordinaten, wodurch entsprechender Rechenaufwand für das Transformieren der auftretenden Operatoren in andere Koordinatensysteme zu leisten ist. Durch die Verwendung der Tensorrechnung können die Grundgleichungen in einer vom verwendeten Koordinatensystem unabhängigen Form dargestellt werden, was den mathematischen Mehraufwand rechtfertigt. Ein weiterer Vorteil dieser Herangehensweise liegt in der anschaulichen Interpretation des modifizierten Metrikterms. Die Monographien von Green & Zerna [22], Fung [17] und Klingbeil [29] sind besonders den Bedürfnissen des Ingenieurs angepasst, und im Folgenden wird der dort vorgezeichnete Weg verfolgt.

Die Formänderung in krummlinigen Koordinaten[1]

Im ersten Schritt wird der Zusammenhang zwischen dem Verschiebungsfeld und dem Verzerrungstensor mit Hilfe der Tensoranalysis abgeleitet.

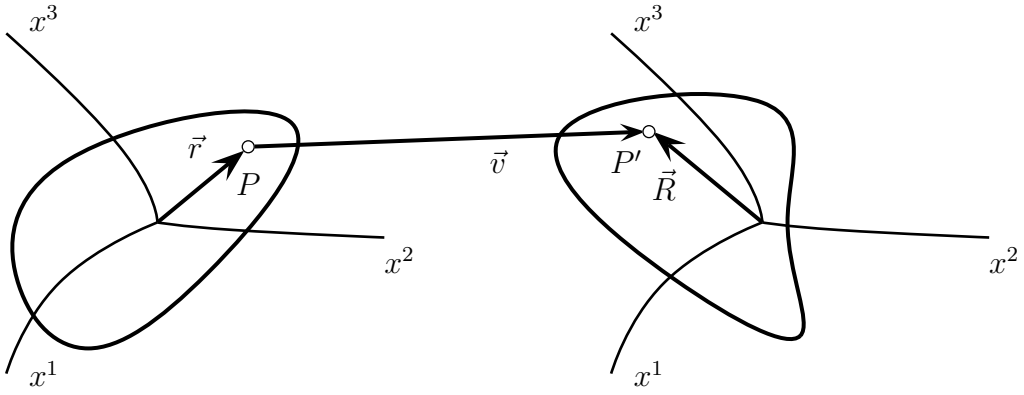


Abbildung 3.1.: Der Zusammenhang zwischen unverformten und verformten Zustand, dargestellt in körperfesten Koordinaten x^i.

Abbildung 3.1 zeigt einen Körper im unverformten bzw. im verformten Zustand, wobei alle Größen auf körperfeste Koordinaten des unverformten Ausgangszustandes (x^1, x^2, x^3) bezogen werden. Ein beliebiger Punkt P mit dem Ortsvektor $\vec{r}$ erleidet eine Verschiebung $\vec{v}$ und hat im verformten Zustand die neue Lage $\vec{R}$, wobei alle Vektoren im körperfesten Koordinatensystem x^i dargestellt werden. Für eine übersichtliche Darstellung wurden die beiden Zustände in Abb. 3.1 getrennt voneinander dargestellt. Es ist somit klar, dass die Verschiebung $\vec{v}$ keine Starrkörperverschiebung beinhaltet. Wird nun der Zusammenhang

$$\vec{R}(x^1, x^2, x^3) = \vec{r}(x^1, x^2, x^3) + \vec{v}(x^1, x^2, x^3)$$

partiell differenziert[2], so erhält man mit der Definition der kovarianten Basisvektoren im unverformten $g_i = \frac{\partial r}{\partial x^i}$, bzw. im verformten Zustand $G_i = \frac{\partial R}{\partial x^i}$

$$G_i = g_i + \vec{v}_{,i}\,.$$

Mit den nun bekannten kovarianten Basisvektoren kann der kovariante Metriktensor für

[1] An einigen Stellen dieses Abschnitts wird von der Summationskonvention Gebrauch gemacht.

[2] Um die Darstellung übersichtlich zu gestalten, werden partielle Ableitungen wie z.B. $\frac{\partial r}{\partial x}$ mit $r_{,x}$ abgekürzt.

den unverformten g_{ij} sowie den verformten Zustand G_{ij} mit

$$g_{ij} = g_i \cdot g_j \qquad\qquad G_{ij} = G_i \cdot G_j = g_{ij} + g_i\ \vec{v}_{,j} + g_j\ \vec{v}_{,i} + \vec{v}_{,i}\ \ \vec{v}_{,j}$$

berechnet werden. Die Metriktensoren haben eine sehr anschauliche Eigenschaft: Sie bestimmen die Größe des Quadrates des jeweiligen infinitesimalen Bogenstücks gemäß

$$\mathrm{d}s^2 = g_{ij}\mathrm{d}x^i\mathrm{d}x^j \qquad\qquad \mathrm{d}S^2 = G_{ij}\mathrm{d}x^i\mathrm{d}x^j, \tag{3.1}$$

im unverformten bzw. verformten Zustand. Die Differenz der Quadrate der jeweiligen infinitesimalen Bogenlängen vor bzw. nach der Verformung

$$\mathrm{d}S^2 - \mathrm{d}s^2 = 2e_{ij}\mathrm{d}x^i\mathrm{d}x^j$$

dient als Definition des Verzerrungstensors

$$e_{ij} = \frac{1}{2}\left(G_{ij} - g_{ij}\right) = \frac{1}{2}\left(g_i\ \vec{v}_{,j} + g_j\ \vec{v}_{,i} + \vec{v}_{,i}\ \ \vec{v}_{,j}\right). \tag{3.2}$$

Werden nun im obigen Ausdruck die Verschiebungen mit (A.1) bzw. deren partielle Ableitungen mit (A.2) auf die kontravariante Basis bezogen, so ergibt sich der *Green'sche*-Verzerrungstensor[3] zu

$$e_{ij} = \frac{1}{2}\left(v_i|_j + v_j|_i + v_k|_i\ v^k|_j\right). \tag{3.3}$$

Im Verzerrungstensor (3.3) treten kovariante Ableitungen auf, die gemäß der Ableitungsregel für Tensoren (A.4) von den jeweiligen *Christoffel*-Symbolen (A.3) abhängen. Die Spezialisierung auf ein bestimmtes Koordinatensystem spiegelt sich daher in den entsprechenden *Christoffel*-Symbolen wieder, wodurch die Definition des Verzerrungstensors (3.3) unabhängig von der Wahl des Koordinatensystems ist. Für das vorliegende Problem werden die Verzerrungen in Zylinderkoordinaten benötigt.

[3]Der senkrechte Strich symbolisiert die kovariante Ableitung bezogen auf die Basis des unverformten Körpers g^k. Bezieht man sich auf den verformten Körper, ist die kovariante Ableitung in der Basis G^k zu bestimmen, was auf den *Almansi'schen*-Verzerrungstensor führt.

Die Formänderung in Zylinderkoordinaten

Mit den körperfesten Koordinaten $x^1 = r$, $x^2 = \varphi$ und $x^3 = z$ ergeben sich die Metriktensoren zu

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad g^{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r^2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{3.4}$$

und daraus die *Christoffel*-Symbole (A.3) zu

$$\Gamma^1_{22} = -r \qquad \Gamma^2_{12} = \Gamma^2_{21} = \frac{1}{r}.$$

Für die Spezialisierung des Verzerrungstensors (3.3) wird von der Annahme (IV) sowie von der Umrechnung des Verzerrungstensors auf physikalische Komponenten (A.5) Gebrauch gemacht, was auf

$$\begin{aligned} \epsilon_{rr} &= u_{,r} + \frac{1}{2} w_{,r}^2 & 2\epsilon_{r\varphi} &= \gamma_{r\varphi} = \frac{1}{r}\left(u_{,\varphi} + r v_{,r} - v + w_{,r}\, w_{,\varphi}\right) \\ \epsilon_{\varphi\varphi} &= \frac{u}{r} + v_{,\varphi}\,\frac{1}{r} + \frac{1}{2r^2} w_{,\varphi}^2 & 2\epsilon_{rz} &= \gamma_{rz} = u_{,z} + w_{,r} + w_{,\varphi}\, w_{,z} \\ \epsilon_{zz} &= w_{,z} + \frac{1}{2} w_{,z}^2 & 2\epsilon_{\varphi z} &= \gamma_{\varphi z} = r v_{,z} + w_{,\varphi} + w_{,\varphi}\, w_{,z} \end{aligned}$$

führt. Unter der Annahme kleiner Plattendicke (Annahme (I)) kann die z-Abhängigkeit der transversalen Verschiebung vernachlässigt werden ($w(r, \varphi, z) = w(r, \varphi)$), wodurch in obigen Ausdrücken $w_{,z} = 0$ zu berücksichtigen ist. Darüber hinaus liefert die Verwendung der *Kirchhoff'schen*-Hypothese (Annahme (VI)), aufgrund der Proportionalität zwischen Schubspannung und Schubverzerrung (3.12),

$$\begin{aligned} \epsilon_{\varphi z} = 0 &= r v_{,z} + w_{,\varphi} & &\Rightarrow v = v_0 - z\frac{w_{,\varphi}}{r} \\ \epsilon_{rz} = 0 &= u_{,z} + w_{,r} & &\Rightarrow u = u_0 - z w_{,r}\,. \end{aligned} \tag{3.5}$$

Da die Normalspannung (σ_{zz}) und die beiden Schubspannungen ($\sigma_{rz} = \sigma_{zr}$ bzw. $\sigma_{z\varphi} = \sigma_{\varphi z}$) aufgrund der Annahme (VI) Null sind, ergeben sich die Verschiebungen in der Plattenebene als Summe der Verschiebungen der Mittelfläche (Index 0), sowie einem in z linearen Anteil zufolge der transversalen Verschiebung (3.5). Mit den Zusammenhän-

gen (3.5) ergeben sich die Verschiebungs-Verzerrungs-Beziehungen

$$\epsilon_{rr} = u_{0,r} + \frac{1}{2} w_{,r}^2 - z w_{,rr} \tag{3.6a}$$

$$\epsilon_{\varphi\varphi} = \frac{1}{r} u_0 + \frac{1}{r} v_{0,\varphi} + \frac{1}{2r^2} w_{,\varphi}^2 - z \left(\frac{1}{r} w_{,r} + \frac{1}{r^2} w_{,\varphi\varphi} \right) \tag{3.6b}$$

$$\epsilon_{r\varphi} = \frac{1}{2r} \left(u_{0,\varphi} + r v_{0,r} - v_0 + w_{,r}\, w_{,\varphi} \right) - z \left(\frac{1}{r} w_{,r\varphi} - \frac{1}{r^2} w_{,\varphi} \right). \tag{3.6c}$$

Modifikation des Verzerrungstensors

Wie eingangs erwähnt, soll die kontinuumsmechanische Formulierung des Beulproblems mittels verändertem Verzerrungstensor erfolgen. Nachdem die Verzerrungen gemäß (3.2) von der Differenz der Metriken im verformten bzw. im unverformten Zustand berechnet werden, liegt es nahe, den Verzerrungstensor mittels der Metrik im unverformten Zustand zu verändern. Aufgrund der Annahme (IV) werden die z-Komponenten der auftretenden Tensoren unterdrückt. Definiert man den veränderten Metriktensor als Summe des Metriktensors (3.4) und eines zusätzlichen Metriktensors mit

$$\tilde{g}_{\alpha\beta} = g_{\alpha\beta} + \hat{g}_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & r^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \hat{\epsilon}_{rr} & \hat{\epsilon}_{r\varphi} \\ \hat{\epsilon}_{r\varphi} & \hat{\epsilon}_{\varphi\varphi} \end{pmatrix}, \tag{3.7}$$

so kann daraus das Quadrat der Länge eines infinitesimalen Bogenstückes gemäß (3.1)

$$\mathrm{d}s^2 = (1 + \hat{\epsilon}_{rr})\, \mathrm{d}r^2 + 2\hat{\epsilon}_{r\varphi} \mathrm{d}r\mathrm{d}\varphi + (1 + \hat{\epsilon}_{\varphi\varphi})\, r^2 \mathrm{d}\varphi^2 \tag{3.8}$$

bestimmt werden. Noch anschaulicher wird der Einfluss der veränderten Metrik, wenn man ein Bogenstück in Umfangsrichtung ($r = \text{const}$, $\mathrm{d}r = 0$)

$$\mathrm{d}s = \sqrt{1 + \hat{\epsilon}_{\varphi\varphi}(r)} r \mathrm{d}\varphi$$

betrachtet, und daraus den Umfang

$$U = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}s = 2r\pi \sqrt{1 + \hat{\epsilon}_{\varphi\varphi}(r)} \tag{3.9}$$

berechnet. Mit $\hat{\epsilon}_{\varphi\varphi}(r) > 0$ kann also eine Vergrößerung des Umfangs in Abhängigkeit vom jeweiligen Radius bewirkt werden. Wenn man sich vor Augen hält, dass die Metrik der unverformten Platte der zweidimensionalen Formulierung der ungedehnten Feder-

länge einer eindimensionalen Feder entspricht, so vergrößert der positive Term $\hat{\epsilon}$ den Gleichgewichtsabstand in Abhängigkeit von der radialen Koordinate. In weiterer Folge wird ein vom Rand der Kreisplatte sehr rasch abklingender Term ($\hat{\epsilon}_{\varphi\varphi}$) in Rechnung gestellt, um die beim *Graphene-sheet* beobachtete, am Rand lokalisierte Dehnung, in Umfangsrichtung zu berücksichtigen. Betrachtet man nun diese zusätzliche Metrik $\hat{g}_{ij}$ gemäß (3.7) als kleine Störung der Metrik der unverformten Platte, und bezieht die Verzerrungen auf die unverformte Platte, ergeben sich (der Index 0 wird hier unterdrückt) folgende Verzerrungen

$$\epsilon_{rr} = u_{,r} + \frac{1}{2} w_{,r}^2 - z w_{,rr} - \hat{\epsilon}_{rr} \tag{3.10a}$$

$$\epsilon_{\varphi\varphi} = \frac{1}{r} u + \frac{1}{r} v_{,\varphi} + \frac{1}{2r^2} w_{,\varphi}^2 - z \left(\frac{1}{r} w_{,r} + \frac{1}{r^2} w_{,\varphi\varphi} \right) - \hat{\epsilon}_{\varphi\varphi} \tag{3.10b}$$

$$\epsilon_{r\varphi} = \frac{1}{2r} \left(u_{,\varphi} + r v_{,r} - v + w_{,r}\, w_{,\varphi} \right) - z \left(\frac{1}{r} w_{,r\varphi} - \frac{1}{r^2} w_{,\varphi} \right) - \hat{\epsilon}_{r\varphi}. \tag{3.10c}$$

In weiterer Folge ist die Tatsache, dass die Verzerrungen nicht unabhängig voneinander sind, von entscheidender Wichtigkeit. Zweimaliges Differenzieren der Verzerrung (3.3) führt, unter Vernachlässigung der quadratischen Terme, auf $e_{ij}|_{kl} = \frac{1}{2}(v_i|_{jkl} + v_j|_{ikl})$. Die Kompatibilitätsbedingungen in krummlinigen Koordinaten ergeben sich durch Vertauschen von Indices und entsprechender Summation zu

$$e_{ij}|_{kl} + e_{kl}|_{ij} - e_{ik}|_{jl} - e_{jl}|_{ik} = 0.$$

Die 81 Gleichungen, die obiger Ausdruck darstellt, reduzieren sich im vorliegenden Fall auf nur eine einzige, in nicht trivialer Weise zu erfüllende Gleichung

$$r\, \gamma^S_{r\varphi,r\varphi} + \gamma^S_{r\varphi,\varphi} = \epsilon^S_{rr,\varphi\varphi} + r^2 \epsilon^S_{\varphi\varphi,rr} - r\, \epsilon^S_{rr,r} + 2r\, \epsilon^S_{\varphi\varphi,r}\,. \tag{3.11}$$

Die Bedingung (3.11) verknüpft nur die Verzerrungen des entsprechenden Scheibenproblems, was durch den Index S angezeigt wird.

Das Materialgesetz

Unterstellt man linear elastisches Materialverhalten gemäß Annahme (V), so liefert das *Hooke'sche* Gesetz den Zusammenhang zwischen Spannungen und Verzerrungen

$$S_{\alpha\beta} = 2G e_{\alpha\beta} + \delta_{\alpha\beta} \lambda e_{kk}. \tag{3.12}$$

Für den ebenen Spannungszustand, entsprechend der Annahme (VI), ergibt sich

$$\sigma_{rr} = \frac{E}{1-\mu^2}\left(\epsilon_{rr} + \mu\epsilon_{\varphi\varphi}\right) \quad \sigma_{\varphi\varphi} = \frac{E}{1-\mu^2}\left(\epsilon_{\varphi\varphi} + \mu\epsilon_{rr}\right) \quad \sigma_{r\varphi} = \frac{E}{1+\mu}\epsilon_{r\varphi} = G\gamma_{r\varphi}. \tag{3.13}$$

Aufgrund der gegenüber dem Radius als klein vorausgesetzten Plattendicke h (Annahme (I)), ist es in der Plattentheorie üblich, die Spannungen über die z-Abmessung zu integrieren, und so Kräfte bzw. Momente pro Längeneinheit zu definieren

$$N_{\alpha\beta} = \int_{-h/2}^{h/2} \sigma_{\alpha\beta}\mathrm{d}z \qquad\qquad M_{\alpha\beta} = \int_{-h/2}^{h/2} z\sigma_{\alpha\beta}\mathrm{d}z. \tag{3.14}$$

Die Gleichgewichtsbeziehungen

Das Plattenbeulen soll als ein statisches Problem behandelt werden, wodurch die Gleichgewichtsbeziehungen anstelle der Bewegungsgleichung den Zusammenhang zwischen Belastung und Spannung liefert. In *Lagrange'scher* Beschreibung sind die Gleichgewichtsbeziehungen in krummlinigen Koordinaten

$$\frac{\partial}{\partial a_j}\left[S_{jk}\left(\delta_{ik} + \frac{\partial u_i}{\partial a_k}\right)\right] = 0 \tag{3.15}$$

zu erfüllen. Berücksichtigt man nur lineare Terme, so erhält man in radialer Richtung

$$\sigma_{rr} + r\sigma_{rr,r} + \sigma_{r\varphi,\varphi} - \sigma_{\varphi\varphi} = 0, \tag{3.16}$$

bzw. in tangentialer Richtung

$$\sigma_{\varphi\varphi,\varphi} + 2\sigma_{r\varphi} + r\sigma_{r\varphi,r} = 0. \tag{3.17}$$

Aufgrund der Annahme (VI) ergeben sich in den Gleichgewichtsbeziehungen in transversaler Richtung keine linearen Anteile, allerdings führt die Berücksichtigung der führenden quadratischen Terme zu

$$\begin{aligned}\sigma_{rr}\left(\frac{1}{r}w_{,r} + w_{,rr}\right) + \sigma_{rr,r}\, w_{,r} + \sigma_{r\varphi}\frac{2}{r}w_{,r\varphi} + \sigma_{r\varphi,r}\,\frac{1}{r}w_{,\varphi} + \sigma_{r\varphi,\varphi}\,\frac{1}{r}w,r \\ + \sigma_{\varphi\varphi}\frac{1}{r^2}w_{,\varphi\varphi} + \sigma_{\varphi\varphi,\varphi}\,\frac{1}{r^2}w_{,\varphi} = 0.\end{aligned} \tag{3.18}$$

Mit etwas Rechenaufwand führt der synthetische Weg zu den gewünschten FvK-Plattengleichungen. Aufwendiger ist die Formulierung der richtigen Randbedingungen, vor allem

wenn es sich, wie im vorliegenden Fall, um einen freien Rand handelt. Im nächsten Abschnitt wird daher die analytische Vorgehensweise verwendet, um die Plattengleichungen und die entsprechenden Randbedingungen herzuleiten.

3.1.2. Die analytische Herleitung

Im Folgenden wird keine sprachliche Unterscheidung zwischen Verzerrungs- und Ergänzungsenergie getroffen, weil linear elastisches Materialverhalten (Annahme(V)) vorausgesetzt wird.

Das Variationsprinzip

Die gesuchten FvK-Gleichungen beschreiben den Gleichgewichtszustand der Kreisplatte, daher können sie aus der Forderung nach Stationarität des Gesamtpotentials

$$\delta\,\mathcal{U} = 0 \tag{3.19}$$

gewonnen werden. Aufgrund der gewählten Formulierung des Problems tritt hier kein Potential zufolge einer richtungstreuen, äußeren Belastung auf, wie bei klassischen Beulproblemen üblich. Es soll aber in weiterer Folge eine nichtlineare Bettung berücksichtigt werden, wodurch sich das Gesamtpotential als Summe aus der Verzerrungsenergie der Platte und jener der Bettung zusammensetzt, die es nun zu diskutieren gilt.

Verzerrungsenergie der Kreisplatte

Für den ebenen Spannungszustand (Annahme (VI)) ergibt sich die Verzerrungsenergie pro Volumeneinheit in Polarkoordinaten

$$\frac{\mathrm{d}\,\mathcal{U}}{\mathrm{d}V} = \frac{1}{2}\sigma_{\alpha\beta}\epsilon_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\left(\sigma_{rr}\epsilon_{rr} + \sigma_{\varphi\varphi}\epsilon_{\varphi\varphi} + 2\sigma_{r\varphi}\epsilon_{r\varphi}\right).$$

Mit Hilfe der Beziehungen (3.12) können die Spannungen durch die Verzerrungen ausgedrückt werden, was auf

$$\frac{\mathrm{d}\,\mathcal{U}}{\mathrm{d}V} = \frac{E}{2(1-\mu^2)}\left(\left(\epsilon_{rr}+\epsilon_{\varphi\varphi}\right)^2 - 2(1-\mu)\left(\epsilon_{rr}\epsilon_{\varphi\varphi} - \epsilon_{r\varphi}^2\right)\right) \tag{3.20}$$

führt. Annahme (I) legt nahe, die Verzerrungsenergiedichte über die als konstant vorausgesetzte Dicke h in z-Richtung zu integrieren. Dieses Vorgehen wird zunächst formal durchgeführt. Es sei eine quadratische Form Q definiert, die auf den Vektor $\underset{\sim}{\epsilon} =$

$(\epsilon_{rr}, \epsilon_{\varphi\varphi}, \epsilon_{r\varphi})$ gemäß $Q : \underset{\sim}{\epsilon} \to (\underset{\sim}{\epsilon} \,.\, Q \,.\, \underset{\sim}{\epsilon})$ wirkt.

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & \mu & 0 \\ \mu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2\,(1-\mu) \end{pmatrix}$$

Die so definierte Matrix Q ist symmetrisch, und stellt eine Abbildung des mathematischen Vektors der Verzerrungen $\underset{\sim}{\epsilon}$ auf die skalare Verzerrungsenergiedichte gemäß (3.20) dar. Die bereits berechneten Verzerrungen (3.10) werden in eine Verzerrung der Mittelebene $\underset{\sim}{\epsilon}^0$

$$\epsilon^0_{rr} = u_{,r} + \frac{1}{2} w_{,r}^2 - \hat{\epsilon}_{rr} \tag{3.21a}$$

$$\epsilon^0_{\varphi\varphi} = \frac{1}{r} u + \frac{1}{r} v_{,\varphi} + \frac{1}{2r^2} w_{,\varphi}^2 - \hat{\epsilon}_{\varphi\varphi} \tag{3.21b}$$

$$\epsilon^0_{r\varphi} = \frac{1}{2r} \left(u_{,\varphi} + r v_{,r} - v + w_{,r}\, w_{,\varphi} \right) - \hat{\epsilon}_{r\varphi}, \tag{3.21c}$$

und einen mit z multiplizierten Anteil $\underset{\sim}{\epsilon}^1$ gemäß

$$\underset{\sim}{\epsilon}(z) = \underset{\sim}{\epsilon}^0 + z\, \underset{\sim}{\epsilon}^1 = (\epsilon^0_{rr}, \epsilon^0_{\varphi\varphi}, \epsilon^0_{r\varphi})_{z=0} + z \left(-w_{,rr}\,, -\frac{1}{r} w_{,r} - \frac{1}{r^2} w_{,\varphi\varphi}\,, \frac{1}{r^2} w_{,\varphi} - \frac{1}{r} w_{,r\varphi} \right) \tag{3.22}$$

aufgespalten. Der Anteil $\underset{\sim}{\epsilon}^0$ repräsentiert die Dehnung der Mittelfläche, und $\underset{\sim}{\epsilon}^1$ eine von z abhängige Dehnung zufolge der räumlichen Krümmung der Platte. Wird nun die Verzerrungsenergiedichte über die konstante Plattendicke integriert, so ergibt sich unter Verwendung von (3.22)

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\,\mathcal{U}}{\mathrm{d}A} &= \frac{E}{2(1-\mu^2)} \int_{-h/2}^{h/2} \underset{\sim}{\epsilon}(z) \,.Q.\, \underset{\sim}{\epsilon}(z)\, \mathrm{d}z = \frac{E}{2(1-\mu^2)} \int_{-h/2}^{h/2} (\underset{\sim}{\epsilon}^0 + z\, \underset{\sim}{\epsilon}^1) \,.Q.\, (\underset{\sim}{\epsilon}^0 + z\, \underset{\sim}{\epsilon}^1)\, \mathrm{d}z \\ &= \frac{Eh}{(1-\mu^2)} \frac{1}{2} \underset{\sim}{\epsilon}^0 \,.Q.\, \underset{\sim}{\epsilon}^0 + \frac{Eh^3}{12(1-\mu^2)} \frac{1}{2} \underset{\sim}{\epsilon}^1 \,.Q.\, \underset{\sim}{\epsilon}^1 \\ &= \frac{D}{2} \underset{\sim}{\epsilon}^0 \,.Q.\, \underset{\sim}{\epsilon}^0 + \underset{\sim}{\epsilon}^1 \,.Q.\, \underset{\sim}{\epsilon}^1 \frac{K}{2}. \end{aligned}$$

Wie obiger Ausdruck zeigt, ist es gelungen, die Verzerrungsenergie aufzuspalten in einen Term, der nur die Verzerrungen in der Ebene, und einen, der nur die linearen Verschiebungen aus dieser Ebene heraus beinhaltet. Diese Zwischenrechnung ist für kartesische Koordinaten bei Audoly [5] zu finden. Darüber hinaus ist zu bemerken, dass aufgrund der Annahme (IV) quadratische Terme auftreten, die eine vollständige Aufspaltung der

Verzerrungsenergie zufolge Verschiebungen in bzw. aus der Plattenebene heraus verhindern. Der erste Term berücksichtigt, mit Ausnahme der zusätzlichen quadratischen Terme, nur Verformungen, die bei Scheibenproblemen auftreten, wohingegen der zweite für die Beschreibung von Platten maßgebend ist. Eine besonders kompakte Darstellung beider Anteile der Verzerrungsenergie

$$\mathcal{U}_{\text{Scheibe}} = \frac{D}{2} \int_A \left(\epsilon^0_{rr} + \epsilon^0_{\varphi\varphi}\right)^2 - 2(1-\mu)\left(\epsilon^0_{rr}\epsilon^0_{\varphi\varphi} - \epsilon^{0^2}_{r\varphi}\right) \mathrm{d}A \tag{3.23}$$

$$\mathcal{U}_{\text{Platte}} = \frac{K}{2} \int_A (\Delta w)^2 - (1-\mu)\,[w,w]\,\mathrm{d}A \tag{3.24}$$

ergibt sich mit der Definition der Dehnsteifigkeit $D = \frac{Eh}{1-\mu^2}$ und der Biegesteifigkeit $K = \frac{Eh^3}{12(1-\mu^2)}$, sowie dem *Laplace*-Operator

$$\Delta a = a_{,rr} + \frac{1}{r} a_{,r} + \frac{1}{r^2} a_{,\varphi\varphi} \tag{3.25}$$

bzw. dem sogenannten *Monge-Ampére*-Operator

$$\begin{aligned}[a,b] = b_{,rr}\left(\frac{1}{r}a_{,r} + \frac{1}{r^2}a_{,\varphi\varphi}\right) + a_{,rr}\left(\frac{1}{r}b_{,r} + \frac{1}{r^2}b_{,\varphi\varphi}\right) \\ - 2\left(\frac{1}{r}b_{,r\varphi} - \frac{1}{r^2}b_{,\varphi}\right)\left(\frac{1}{r}a_{,r\varphi} - \frac{1}{r^2}a_{,\varphi}\right)\end{aligned} \tag{3.26}$$

jeweils in Polarkoordinaten.

Verzerrungsenergie der nichtlinearen Bettung

Als Lagerung der Platte wird eine nichtlineare Bettung vorgesehen. Die Modellierung der Bettung ist dem Potential der *Van der Waals*kräfte nachempfunden. Im molekularstatischen Modell wird diese nicht gebundene Wechselwirkung zwischen Atomen des Substrats und jenen der Graphenschicht mit dem *Lennard-Jones*-Potential (C.5)

$$E^{\text{LJ}}(s) = 4\epsilon\left[\left(\frac{\sigma}{s}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{s}\right)^{6}\right] \tag{3.27}$$

beschrieben. Abbildung C.4 zeigt das Potential sowie die Kraft als Funktion des Abstandes. Diese Wechselwirkung in Form einer Kraft muss auf eine Kraft pro Fläche, also einen Druck umgerechnet werden, um als nichtlineare Bettung in der Plattengleichung berücksichtigt zu werden. Abbildung 3.2(b) zeigt, dass zwei Kohlenstoffatome eine Fläche von

$\Delta A = a_{\mathrm{CC}}^2 \frac{3\sqrt{3}}{2}$ einnehmen, somit einer Dichte von

$$\rho = \frac{2}{\Delta A} = \frac{2.2}{a_{\mathrm{CC}}^2 3\sqrt{3}} = 39,44 \frac{\mathrm{Atome}}{nm^2} \tag{3.28}$$

entsprechen. Als nichtlineare Bettung soll die Wechselwirkung zweier Graphenschichten verwendet werden.

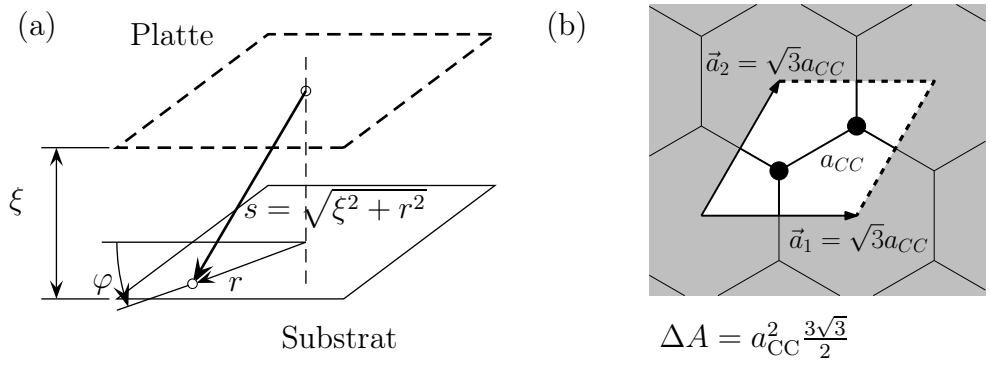


Abbildung 3.2.: Mechanisches Modell zur Berechnung der nichtlinearen Bettung aus der *Van der Waals*-Wechselwirkung (a). Abmessung der kleinsten Elementarzelle (b).

Um nun die Wirkung aller Atome in der unteren Schicht auf eine einzige Stelle der oberen Schicht zu berechnen, ist über alle Kräfte zu integrieren. Die geometrischen Zusammenhänge sind in Abb. 3.2(a) skizziert. Das dabei auftretende uneigentliche Integral mit unbeschränktem Integrationsintervall

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{\mathrm{Bettung}}(\xi) &= \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \rho E^{\mathrm{LJ}}(\sqrt{\xi^2 + r^2}) r \mathrm{d}r \mathrm{d}\varphi \\ &= \pi\rho\epsilon \left(\frac{\sigma^{12}}{5\xi^{10}} - \frac{\sigma^6}{2\xi^4} \right) \end{aligned} \tag{3.29}$$

konvergiert aufgrund des endlichen Grenzwertes der Stammfunktion. Auf diese Weise wird die Wirkung der gesamten unteren Graphenschicht, dem Substrat, auf einen Punkt der oberen Schicht berechnet, wobei dem diskreten Aufbau durch die Dichte (3.28) im verschmierten Potential Rechnung getragen wird. Aus der Ableitung nach dem Abstand beider Schichten

$$q(\xi) = \rho \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial \xi} = 2\pi\rho^2\epsilon \left(\frac{\sigma^6}{\xi^5} - \frac{\sigma^{12}}{\xi^{11}} \right) \tag{3.30}$$

errechnet sich die gesuchte Formulierung der nichtlinearen Bettung [64, 47]. Offensichtlich ist der Gleichgewichtsabstand der beiden Schichten $\xi_0 = \sigma = 3,4$Å kleiner als jener

von zwei einzelnen Atomen $r_0 = \sqrt[6]{2}\sigma \approx 3,816\text{Å}$. Grund dafür ist die Wirkung der benachbarten Atome in den Graphenschichten, wobei entsprechende Kraftkomponenten, die in der Ebene auftreten, sich gegenseitig aufheben. Für die kontinuumsmechanische Formulierung ist nur die transversale Verschiebung aus der Gleichgewichtslage von Interesse, daher wird die Bettung in Abhängigkeit von der Verschiebung aus der Gleichgewichtslage heraus

$$\begin{aligned} q(w) &= 2\pi\rho^2\epsilon\left(\frac{\sigma^6}{(\sigma+w)^5} - \frac{\sigma^{12}}{(\sigma+w)^{11}}\right) \approx 2\pi\rho^2\epsilon\left(6w - \frac{51}{\sigma}w^2 + \frac{251}{\sigma^2}w^3 \pm \dots\right) \\ &\approx k\left(w - \frac{51}{6\sigma}w^2 + \frac{251}{6\sigma^2}w^3 \pm \dots\right) \end{aligned} \tag{3.31}$$

berücksichtigt.
Mit der soeben formulierten nichtlinearen Bettung ergibt sich das Gesamtpotential aus den beiden Verzerrungsenergien der Platte (3.23), (3.24) sowie jener der Bettung (3.29) zu

$$\mathcal{U} = \mathcal{U}_{\text{Scheibe}} + \mathcal{U}_{\text{Platte}} + \mathcal{U}_{\text{Bettung}}. \tag{3.32}$$

Im Gegensatz zu klassischen Beulproblemen tritt im vorliegenden Fall vordergründig keine explizite äußere Belastung auf ($\mathcal{W} = 0$), es sind somit alle Energieausdrücke formuliert.

Die Variation der Verzerrungsenergie

Die Anwendung des Variationsprinzips (3.19) auf die Gesamtenergie (3.32) liefert

$$\delta\mathcal{U} = \delta\mathcal{U}_S + \delta\mathcal{U}_P + \delta\mathcal{U}_B = 0, \tag{3.33}$$

woraus die das Beulproblem beschreibenden, nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen zu gewinnen sind. Im integralen Ausdruck der einzelnen Verzerrungsenergien (3.23) (3.24) und (3.29) sind die Verschiebungen u, v und w, bzw. die auftretenden Ableitungen nach den Koordinaten zu variieren.
Die Verschiebungen in der Plattenebene, radiale bzw. tangentiale, treten nur in der Verzerrungsenergie der Scheibe (3.23) auf. Die Variation von (3.23) kann zunächst mit (3.13) und (3.14) als

$$\delta\mathcal{U}_S = \int_A N_{rr}\delta\epsilon_{rr} + N_{\varphi\varphi}\delta\epsilon_{\varphi\varphi} + 2N_{r\varphi}\delta\epsilon_{r\varphi}\,\mathrm{d}A$$

dargestellt werden. Betrachtet man nur die Variation der Verschiebungen in der Plattenebene (u, v), so erhält man mit (3.10)

$$\delta\mathcal{U}_S = \int_A N_{rr}\delta u_{,r} + N_{\varphi\varphi}(\frac{1}{r}\delta u + \frac{1}{r}\delta v_{,\varphi}) + N_{r\varphi}\frac{1}{r}(\delta u_{,\varphi} + r\delta v_{,r} - \delta v)\,\mathrm{d}A.$$

Mittels partieller Integration und dem Flächenelement in Polarkoordinaten $\mathrm{d}A = r\,\mathrm{d}r\mathrm{d}\varphi$ vereinfacht sich der Integrand zu

$$\iint (N_{rr} + rN_{rr,r} + N_{r\varphi,\varphi} - N_{\varphi\varphi})\,\delta u + (N_{\varphi\varphi,\varphi} + 2N_{r\varphi} + rN_{r\varphi,r})\,\delta v\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi = 0. \quad (3.34)$$

Die bei der partiellen Integration auftretenden Randterme werden gesondert im nächsten Abschnitt diskutiert. Aufgrund der Beliebigkeit der Variationen δu bzw. δv müssen die beiden Klammerausdrücke in (3.34) unabhängig voneinander erfüllt werden. Es handelt sich dabei um die bereits hergeleiteten Gleichgewichtsbedingungen in r- (3.16) bzw. φ-Richtung (3.17). Beide Bedingungen können auf die Lösung einer einzigen Gleichung zurückgeführt werden, wenn eine Spannungsfunktion $\Phi(r, \varphi)$ mit folgender Definition

$$N_{rr} = \frac{1}{r}\Phi_{,r} + \frac{1}{r^2}\Phi_{,\varphi\varphi} \qquad N_{\varphi\varphi} = \Phi_{,rr} \qquad N_{r\varphi} = \frac{1}{r^2}\Phi_{,\varphi} - \frac{1}{r}\Phi_{,r\varphi} \quad (3.35)$$

eingeführt wird [58]. Das Scheibenproblem reduziert sich daher auf die Berechnung der Spannungsfunktion Φ. Die Bestimmungsgleichung für die Spannungsfunktion erhält man unter Zuhilfenahme der Kompatibilitätsbeziehung (3.11), die einen Zusammenhang zwischen den Verzerrungen in der Plattenebene darstellt. Die Verzerrungsanteile zufolge tangentialer und radialer Verschiebungen, die bei klassischen Scheibenproblemen auftreten, gewinnt man aus den Verzerrungen in der Mittelebene der Platte (3.21) gemäß

$$\begin{aligned}
\epsilon^S_{rr} &= u_{,r} &&= \epsilon^0_{rr} - \frac{1}{2}w_{,r}^2 + \hat{\epsilon}_{rr} &&= \frac{1}{E}(\sigma_{rr} - \mu\sigma_{\varphi\varphi}) - \frac{1}{2}w_{,r}^2 + \hat{\epsilon}_{rr} \\
\epsilon^S_{\varphi\varphi} &= \frac{1}{r}(u + v_{,\varphi}) &&= \epsilon^0_{\varphi\varphi} - \frac{1}{2r^2}w_{,\varphi}^2 + \hat{\epsilon}_{\varphi\varphi} &&= \frac{1}{E}(\sigma_{\varphi\varphi} - \mu\sigma_{rr}) - \frac{1}{2r^2}w_{,\varphi}^2 + \hat{\epsilon}_{\varphi\varphi} \\
\gamma^S_{r\varphi} &= \frac{1}{r}(u_\varphi + rv_{,r} - v) &&= 2\epsilon^0_{r\varphi} - \frac{1}{r}w_{,r}\,w_{,\varphi} + 2\hat{\epsilon}_{r\varphi} &&= \frac{1}{G}\sigma_{r\varphi} - \frac{1}{r}w_{,r}\,w_{,\varphi} + 2\hat{\epsilon}_{r\varphi}.
\end{aligned} \quad (3.36)$$

Im obigen Ausdruck wurde vom *Hooke'schen* Gesetz (3.12) Gebrauch gemacht, das die Verzerrungen der Mittelebene mit den Spannungen verknüpft. Werden diese Ausdrücke, unter der Verwendung von (3.14) und (3.35), in die Kompatibilitätsbeziehung (3.11) ein-

gesetzt, erhält man die nichtlineare partielle Differentialgleichung

$$\Delta^2\Phi + Eh\left(\frac{1}{2}[w,w] + \hat{\lambda}\right) = 0, \tag{3.37a}$$

mit dem zusätzlichen Metrikterm

$$\hat{\lambda} = \frac{1}{r^2}\hat{\epsilon}_{rr,\varphi\varphi} - \frac{1}{r}\hat{\epsilon}_{rr,r} - \frac{2}{r}\hat{\epsilon}_{r\varphi,r\varphi} - \frac{2}{r^2}\hat{\epsilon}_{r\varphi,\varphi} + \hat{\epsilon}_{\varphi\varphi,rr} + \frac{2}{r}\hat{\epsilon}_{\varphi\varphi,r}\,. \tag{3.37b}$$

Die übersichtliche Form der Differentialgleichung (3.37) wird durch die Verwendung des biharmonischen Operators

$$\Delta^2 a = \Delta\Delta a \tag{3.38}$$

(vgl. (3.25)) und des *Monge-Ampére*-Operators (3.26) erzielt.
Der Unterschied zur klassischen FvK-Plattengleichung in Polarkoordinaten besteht im Ausdruck für den zusätzlichen Metrikterm (3.37b). Ein wichtiges Resultat der obigen Herleitung aus dem Variationsprinzip ist die genaue Form der drei Metrikterme, mit der sie in der nichtlinearen Differentialgleichung berücksichtigt werden müssen.
Bis jetzt wurden nur Variationen der Verschiebungen u und v betrachtet, wobei diese ausschließlich in der Verzerrungsenergie der Scheibe (3.23) auftreten. Im nächsten Schritt sind die transversale Verschiebung w und deren auftretende Ableitungen nach den entsprechenden Koordinaten zu variieren. Terme dieser Art treten in allen drei Energieausdrücken (3.23), (3.24) und (3.29) auf, die zusammen die Gesamtenergie (3.32) darstellen. Der Ausdruck für die Variation der Gesamtenergie nach der transversalen Verschiebung

$$\begin{aligned}
\delta\mathcal{U} &= \delta\mathcal{U}_S + \delta\mathcal{U}_P + \delta\mathcal{U}_B \\
&= \int_A \left(N_{rr}w_{,r} + N_{r\varphi}\frac{1}{r}w_{,\varphi}\right)\delta w_{,r} + \left(N_{\varphi\varphi}\frac{1}{r^2}w_{,\varphi} + N_{r\varphi}r w_{,r}\right)\delta w_{,\varphi}\,\mathrm{d}A \\
&\quad + \frac{K}{2}\int_A 2\Delta w\delta(\Delta w) - (1-\mu)\delta([w,w])\mathrm{d}A \\
&\quad + k\int_A \left(w - \frac{51}{6\sigma}w^2 + \frac{251}{6\sigma^2}w^3 \pm \dots\right)\delta w\mathrm{d}A
\end{aligned} \tag{3.39}$$

liefert nach ein- bzw. zweimaliger partieller Integration die gesuchte Differentialgleichung. Mit Hilfe der beiden Operatoren (3.38) bzw. (3.26) ergibt sich die zweite FvK-Plattengleichung zu

$$K\Delta^2 w - [\Phi, w] + q(w) = 0 \tag{3.40a}$$

mit dem Ausdruck für die nichtlineare Bettung

$$q(w) = k\left(w - \frac{51}{6\sigma}w^2 + \frac{251}{6\sigma^2}w^3 \pm \dots\right). \tag{3.40b}$$

Die beiden nichtlinearen, partiellen Differentialgleichungen (3.37) und (3.40) stellen die gesuchten FvK-Plattengleichungen für eine Kreisplatte mit nicht-*Euklidischer* Metrik mit einer nichtlinearen Bettung dar.

Die Randbedingungen

Die Herleitung der FvK-Gleichungen aus dem Variationsprinzip heraus hat es notwendig gemacht, einige Terme partiell zu integrieren. Die dabei auftretenden Randterme müssen identisch verschwinden. Randterme, die an den Integrationsgrenzen in Umfangsrichtung auszuwerten sind

$$(N_{r\varphi})\,\delta u\Big|_0^{2\pi} = 0 \qquad (N_{\varphi\varphi})\,\delta v\Big|_0^{2\pi} = 0$$

$$\left(\mu w_{,rr} + \frac{1}{r}w_{,r} + \frac{1}{r^2}w_{,\varphi\varphi}\right)\delta w_{,\varphi}\Big|_0^{2\pi} = 0 \qquad \left(w_{,r\varphi} - \frac{1}{r}w_{,\varphi}\right)\delta w_{,r}\Big|_0^{2\pi} = 0$$

$$\left(-\frac{1}{r^2}w_{,\varphi\varphi\varphi} - \mu w_{,rr\varphi} + (2\mu-3)\frac{1}{r}w_{,r\varphi} - 2(1-\mu)\frac{1}{r^2}w_{,\varphi} + N_{\varphi\varphi}w_{,\varphi} + rN_{r\varphi}w_{,r}\right)\delta w\Big|_0^{2\pi} = 0,$$

werden aufgrund der geforderten Stetigkeit der Verschiebungen bzw. deren Ableitungen in Umfangsrichtung identisch erfüllt.
Den Randbedingungen an den Integrationsgrenzen in radialer Richtung muss erhöhte Aufmerksamkeit geschenkt werden. Wie sich später zeigen wird, sind diese Randbedingungen für das in radialer Richtung zu formulierende Randwertproblem notwendig. Die Variation der tangentialen Verschiebungen in der Plattenebene und die damit verbundene partielle Integration führen auf Randterme der Form

$$(N_{rr}\,r)\,\delta u\Big|_0^{R} = 0 \qquad (N_{r\varphi}\,r)\,\delta v\Big|_0^{R} = 0,$$

die im Zentrum der Platte in trivialer Weise erfüllt sind. Für den zu behandelnden Fall des freien Randes ($r = R$) sind die Verschiebungen beliebig und somit müssen die entsprechenden Kräfte verschwinden. Mit der Definition der Spannungsfunktion (3.35) ergeben sich aus den beiden obigen Bedingungen die Randbedingungen für die Differen-

tialgleichung der Spannungsfunktion (3.37) am freien Rand zu

$$\Phi_{,r} + \frac{1}{R}\Phi_{,\varphi\varphi}\Big|_{r=R} = 0 \tag{3.41a}$$

$$\frac{1}{R}\Phi_{,\varphi} - \Phi_{,r\varphi}\Big|_{r=R} = 0. \tag{3.41b}$$

Die Variation der transversalen Verschiebung (3.39), bzw. die in weiterer Folge durchgeführte partielle Integration führt zu Randtermen der Form

$$\left(w_{,rr} + \mu\left(\frac{1}{r}w_{,r} + \frac{1}{r^2}w_{,\varphi\varphi}\right)\right)\delta w_{,r}\Big|_0^R = 0 \tag{3.42a}$$

$$\left(\left(\Delta w\right)_{,r} + \frac{1-\mu}{r}\left(\frac{1}{r}w_{,\varphi}\right)_{,r\varphi} - N_{rr}w_{,r} - \frac{1}{r}N_{r\varphi}w_{,\varphi}\right)\delta w\Big|_0^R = 0. \tag{3.42b}$$

Am freien Rand ist die transversale Verschiebung w und deren Ableitung $w_{,r}$ beliebig, wodurch die entsprechenden Kozustandsvariablen, die Querkraft bzw. das Biegemoment, Null sein müssen. Aus dem ersten Randterm (3.42a) folgt somit die Bedingung für verschwindendes Biegemoment

$$M_{rr} \propto w_{,rr} + \mu\left(\frac{1}{r}w_{,r} + \frac{1}{r^2}w_{,\varphi\varphi}\right)\Big|_{r=R} = 0, \tag{3.43a}$$

bzw. aus dem zweiten Term (3.42b) die Bedingung für die Querkraft

$$V_r = Q_r + \frac{1}{r}M_{r\varphi,\varphi} \propto \left(\Delta w\right)_{,r} + \frac{1-\mu}{r}\left(\frac{1}{r}w_{,\varphi}\right)_{,r\varphi}\Big|_{r=R} = 0. \tag{3.43b}$$

Beim Klammerausdruck in (3.42b) handelt es sich um die "*Kirchhoff'sche* Ersatzquerkraft" V_r [15], die sich aus einer effektiven Querkraft und der Projektion der richtungstreuen in der unverformten Plattenebene befindlichen Kräfte ergibt. Im vorliegenden Problem sind diese Kräfte aufgrund der fehlenden äußeren Belastung Null, wodurch sich die Randbedingung auf (3.43b) reduziert.
An dieser Stelle sei auf den Vorteil der analytischen Herleitung mittels Variationsrechnung hingewiesen, die als Nebenprodukt die beiden komplizierten Randbedingungen für den freien Rand (3.43) liefert. Ungleich schwieriger ist es, diese Randbedingungen auf synthetischen Weg zu finden.

Die Regularitätsbedingungen

Neben den soeben formulierten Randbedingungen (3.41) und (3.43), die sich aus der Herleitung der FvK-Gleichungen ergaben, sind weiter sogenannte Regularitätsbedingungen anzugeben, um die Stetigkeit der jeweiligen Lösung zu garantieren. Mit anderen Worten fehlen noch vier Bedingungen, da es sich bei den FvK-Plattengleichungen um zwei Differentialgleichungen vierter Ordnung handelt und erst vier Randbedingungen formuliert wurden.
Formal sind die beiden FvK-Gleichungen (3.37) und (3.40) der Form

$$\Delta^2 G = F(r, \varphi).$$

Aufgrund der unterstellten Form der $\varphi-$Abhängigkeit der auftretenden Lösungen(vergleiche Ansatz (3.69)) reduziert sich obige partielle Differentialgleichung auf ein Randwertproblem der Form

$$\mathcal{L}^2 g = f(r)$$

mit dem linearen Operator $\mathcal{L}^2 a = \mathcal{L}\mathcal{L}a$

$$\mathcal{L}a = a'' + \frac{1}{r}a' - \frac{m^2}{r^2}a \qquad m \in \mathbb{N}. \tag{3.44}$$

Bei der Lösung dieser Differentialgleichung ist es vorteilhaft, den Operator aufzuteilen, wodurch formal ein gekoppeltes System der Form

$$\mathcal{L}g_1 = g_2 \tag{3.45a}$$
$$\mathcal{L}g_2 = f(r) \tag{3.45b}$$

zu betrachten ist. Wenn die Inhomogenität $f(r)$ der Gleichung (3.45b) im Definitionsbereich $(0 \leq r \leq R)$ stetig ist, kann sie für die Herleitung der Regularitätsbedingungen ignoriert werden. Es stellt sich also die Frage, welche Bedingungen zu erfüllen sind, dass die Lösung der Differentialgleichung

$$\mathcal{L}g_2 = 0 \tag{3.46}$$

keine Singularität im Definitionsbereich $(0 \leq r \leq R)$ aufweist. Wie sich später zeigen wird, weisen die Lösungen eine Singularität für $r \to 0$ auf, die es mit passenden Bedingungen zu eleminieren gilt. Zur Klärung dieser Frage ist eine Fallunterscheidung

notwendig.

- $m = 0$
  In diesem Fall ergibt sich die Lösung von (3.46) zu

  $$g_2 = \mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2 \log r.$$

  Die Forderung nach Stetigkeit der Lösung kann somit durch die Randbedingung $g_2'(r = 0) = 0 \rightarrow \mathcal{C}_2 = 0$ erfüllt werden.

- $m \neq 0$
  Für nicht verschwindendes m ist die Formulierung der Randbedingung ein wenig aufwendiger. Multiplikation von (3.46) mit r^2 liefert einer *Euler'sche* Differentialgleichung [56]

  $$g_2'' r^2 + g_2' r - g_2 m^2 = 0,$$

  die mit der Koordinatentransformation

  $$r = \mathrm{e}^t \qquad\qquad -\infty \leq t \leq \ln R \tag{3.47}$$

  und der neuen Variable $u = g_2(\mathrm{e}^t)$ auf eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung der Form

  $$u'' - u m^2 = 0$$

  umgeformt werden kann. Diese Gleichung mit $\boldsymbol{u} = (u_1, u_2)^{\mathrm{T}}$ als gekoppeltes System erster Ordnung geschrieben ergibt

  $$\boldsymbol{u}' = A\boldsymbol{u} \qquad \text{mit} \quad A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ m^2 & 0 \end{bmatrix}. \tag{3.48}$$

  Die den Eigenwerten der Matrix A ($\lambda_{1,2} = \pm m$) zugeordneten Eigenvektoren spannen die Matrix P gemäß

  $$P = \left[\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2\right] = \begin{bmatrix} -\frac{1}{m} & \frac{1}{m} \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

  auf. Mit dieser Matrix kann das gekoppelte System (3.48) in ein entkoppeltes System

  $$\boldsymbol{y}' = P^{-1} A P \boldsymbol{y} \qquad \text{mit} \quad P^{-1} A P = \begin{bmatrix} -m & 0 \\ 0 & m \end{bmatrix}$$

übergeführt werden, das die Lösung

$$\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} \mathcal{C}_1 \mathrm{e}^{-mt} \\ \mathcal{C}_2 \mathrm{e}^{mt} \end{pmatrix}$$

besitzt. Aufgrund der Koordinatentransformation (3.47) hat sich der ursprüngliche Definitionsbereich auf $(-\infty \leq t \leq \ln R)$ geändert, wodurch der Lösungsanteil y_1 für $t \to -\infty$ über alle Grenzen wächst und daher unterdrückt werden muss. Die Bedingung des verschwindenden Lösungsanteiles y_1 am linken Rand des Definitionsbereiches ergibt mit der Rücktransformation

$$\begin{gathered} \boldsymbol{y} = P^{-1}\boldsymbol{u} \\ \begin{bmatrix} y_1 = 0 \\ y_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -m & 1 \\ m & 1 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} \end{gathered}$$

die Bedingung für $t \to -\infty$

$$\frac{1}{2}\left(u_2 - m u_1\right) = 0 \quad \to \quad u' - mu = 0.$$

Wird jetzt auch noch die erste Koordinatentransformation (3.47) rückgängig gemacht, so ergibt sich die gesuchte Randbedingung für $r \to 0$

$$g_2' r - g_2 m = 0 \quad \text{also} \quad g_2 = 0.$$

Zusammengefasst ergeben sich für Differentialgleichungen der Form (3.45), sofern Lösungen entsprechend dem Ansatz (3.69) gesucht werden, folgende Regularitätsbedingungen an der Stelle $r = 0$

$$m = 0: \quad g_1' = 0 \qquad g_2' = 0 \tag{3.49a}$$

$$m \neq 0: \quad g_1 = 0 \qquad g_2 = 0. \tag{3.49b}$$

Mit den Bedingungen (3.49) und den vier Randbedingungen (3.41) und (3.43) stehen die notwendigen acht Bedingungen für die Lösung der FvK-Plattengleichungen zur Verfügung.

3.2. Die qualitative Bestimmung der Stabilitätsgrenze für den Metrikkoeffizienten

Bevor auf die Lösung der FvK-Plattengleichungen eingegangen wird, soll eine Abschätzung der einzelnen Energieausdrücke den qualitativen Charakter der Stabilitätsgrenze vorwegnehmen. Im Kapitel 2.2 wurde gezeigt, dass die Kantenenergie die globale Form eines kreisförmigen *Graphene-sheets* verändert. Darüber hinaus ist eine Vergrößerung der Abstände zwischen den Atomen in Umfangsrichtung erkennbar. Wie soll dieses Phänomen in einer kontinuumsmechanischen Formulierung des Problems erfasst werden? Die Antwort darauf wurde zum Teil schon in der Herleitung im vorigen Abschnitt geliefert, wo zusätzliche Metrikterme $\hat{\epsilon}_{\alpha\beta}$ in den Verschiebungs-Verzerrungs-Beziehungen (3.10) berücksichtigt wurden. Die drei verschiedenen zusätzlichen Metrikterme, einer in radialer $\hat{\epsilon}_{rr}$ und einer in tangentialer Richtung $\hat{\epsilon}_{\varphi\varphi}$, sowie ein gemischter Term $\hat{\epsilon}_{r\varphi}$, beeinflussen das Quadrat der Länge eines infinitesimalen Bogenstückes (3.8). Welcher dieser Terme berücksichtigt wird und wie er formuliert wird, hängt vom zu modellierenden Phänomen ab. Die atomistische Rechnung hat gezeigt, dass die Kantenenergie bzw. -spannung am Rand konzentriert ist, und in radialer Richtung schnell abklingt. Im Speziellen leistet der Term $\hat{\epsilon}_{\varphi\varphi}(r)$ gemäß (3.9) eine Veränderung des Umfanges in Abhängigkeit vom Radius, was mit den Beobachtungen aus dem Kapitel 2.2 in Einklang gebracht werden kann. Für das kontinuierliche Modell wird daher nur ein zusätzlicher Metrikterm der Form

$$\hat{\epsilon}_{\varphi\varphi} = \beta \left(\frac{r}{R}\right)^n \quad n \in \mathbb{N} \tag{3.50}$$

berücksichtigt. An dieser Stelle muss betont werden, dass diese Wahl des zusätzlichen Metrikterms vollkommen willkürlich ist. Es wird sich im Zuge der analytischen Lösung der Scheibengleichung zeigen, dass aufgrund der Ortsabhängigkeit dieses Metrikterms ein Eigenspannungszustand auftritt. Mit entsprechend hohen, ganzzahligen Werten von n wird sich eine rasch vom Rand ($r = R$) nach innen hin abklingende Umfangsdruckspannung einstellen. Der Metrikterm (3.50) stellt somit die Belastung der Kreisplatte dar.

Im nächsten Schritt geht es um eine qualitative Abschätzung der Energieterme (3.23), (3.24) und (3.29), wobei die Abhängigkeit von den jeweiligen Steifigkeiten, dem Radius der Kreisplatte und der Amplitude des zusätzlichen Metriktermes im Vordergrund steht. Im Ausdruck der Verzerrungsenergie der Scheibe (3.23) tritt der Metrikterm über die Definition der Verzerrung (3.21b) auf. In erster Näherung kann die Verzerrungsenergie

in Abhängigkeit von der Amplitude des zusätzlichen Metriktermes abgeschätzt werden, und liefert

$$U_{\text{Scheibe}} \sim D\beta^2 R^2 \frac{\pi}{2n+2}. \tag{3.51}$$

Diese Abschätzung vernachlässigt das noch unbekannte Verschiebungsfeld und berücksichtigt nur den führenden Term in Abhängigkeit von β.

Für geringe Kantenenergien ist eine Dehnung der Platte in der Ebene zu erwarten, ohne eine transversale Verschiebung. Wird ein kritischer Wert der Kantenenergie, also der Amplitude des Metrikterms (3.50), erreicht, so ist es energetisch günstiger auch Verschiebungen in transversaler Richtung auszubilden. Mit anderen Worten tritt eine nichttriviale Gleichgewichtslage dann auf, wenn diese eine geringere Verzerrungsenergie als die triviale Lage besitzt. Direkt an der Stabilitätsgrenze sind die Energien beider Lagen identisch, was für die nun folgende qualitative Bestimmung der Stabilitätsgrenze ausgenutzt wird. Um die Verzerrungsenergie zufolge einer transversalen Verschiebung abzuschätzen, steht man vor dem Problem, dieses Verschiebungsfeld nicht zu kennen. Mit der Annahme für die transversale Verschiebung $w(r,\varphi) = \xi \left(\frac{r}{R}\right)^2 \cos m\varphi$ kann aus der Verzerrungsenergie der Platte (3.24) der dominierende Term in Abhängigkeit von m bestimmt werden

$$U_{\text{Platte}} \sim \frac{K\xi^2 m^4}{R^2} \frac{\pi}{4}. \tag{3.52}$$

Mit ξ wird die Amplitude der transversalen Verschiebung am Rand bezeichnet. In Abbildung 3.3(a) ist in grüner Farbe eine mögliche nichttriviale Lage mit der Wellenzahl $m = 5$ skizziert. Abbildung 3.3(b) zeigt schematisch die Verformung des Plattenrandes mit der Amplitude ξ. Mit derselben vereinfachten Form des unbekannten Verschiebungsfeldes kann der Energieterm der nichtlinearen Bettung (3.29) mit

$$U_{\text{Bettung}} \sim k\xi^2 R^2 \frac{\pi}{12} \tag{3.53}$$

angenähert werden, wobei lediglich der führende lineare Term der transversalen Verschiebung berücksichtigt wird. Für eine qualitative Abschätzung der Stabilitätsgrenze ist ein Zusammenhang zwischen der transversaler Verschiebung am Rand ξ und der Amplitude des zusätzlichen Metrikterms β zu formulieren. Um diese beiden Größen in Verbindung zu bringen, werden geometrische Zusammenhänge formuliert, die die Verschiebungen als klein gegenüber der Plattenabmessung voraussetzen. Der Winkel im Dreieck Abb. 3.3(b)

bestimmt sich aus

$$\alpha = \arccos\left(\frac{R_\varphi - \xi}{R_\varphi}\right) \approx \sqrt{\frac{2\xi}{R_\varphi}} + \mathcal{O}\left(\left(\frac{\xi}{R_\varphi}\right)^{3/2}\right), \tag{3.54}$$

und die Seiten des rechtwinkeligen Dreiecks erfüllen

$$R_\varphi^2 = (R_\varphi - \xi)^2 + \left(\frac{R\pi}{2m}\right)^2. \tag{3.55}$$

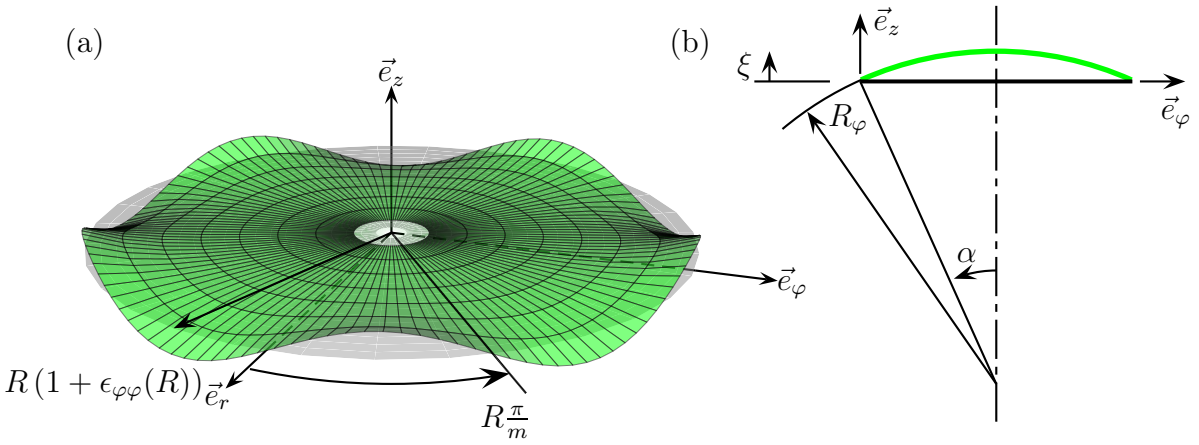


Abbildung 3.3.: Skizze der trivialen (grau) und der ausgebeulten Lage (grün) einer Kreisplatte (a). Ansicht des Kreissektors ($\frac{\pi}{m}$) entlang der $\vec{e}_r$-Richtung (b).

Der Zusammenhang (3.55) unterstellt, dass die kürzere der beiden Katheten einen Teil des unverformten Plattenrandes darstellt. Ein weiterer Zusammenhang kann über zwei verschiedene Darstellungen der Länge des Kreisbogens Abb 3.3(a) gewonnen werden

$$R_\varphi 2\alpha = R\,(1 + \epsilon_{\varphi\varphi})\,\frac{\pi}{m}. \tag{3.56}$$

Die beiden Ausdrücke (3.54) und (3.56) in (3.55) eingesetzt, ergibt nach kurzer Rechnung den wichtigen Zusammenhang

$$\xi^2 \sim \epsilon_{\varphi\varphi}\frac{R^2}{m^2} \sim \beta\frac{R^2}{m^2}, \tag{3.57}$$

der die transversale Verschiebung am Plattenrand in Abhängigkeit von der Amplitude des zusätzlichen Metriktermes darstellt.
Die gesuchte Stabilitätsgrenze zeichnet sich durch die Koexistenz der trivialen und nicht-

trivialen Gleichgewichtslage aus. Mit anderen Worten sind die entsprechenden Verzerrungsenergien beider Lagen direkt an der Stabilitätsgrenze gleich

$$U_{\text{Scheibe}} = U_{\text{Platte}} + U_{\text{Bettung}}.$$

Mit Hilfe der später verwendeten dimensionsbehafteten Größen (3.66) und dem Zusammenhang (3.57) liefert obige Beziehung den einfache Zusammenhang[4] in dimensionsloser Form

$$\bar{\beta} = \sqrt{\frac{n+1}{6}\left(3m^2 + \frac{\bar{\gamma}^4}{m^2}\right)}, \tag{3.58}$$

der die Stabilitätsgrenze für den Metrikkoeffizienten in der Parameterebene charakterisiert.

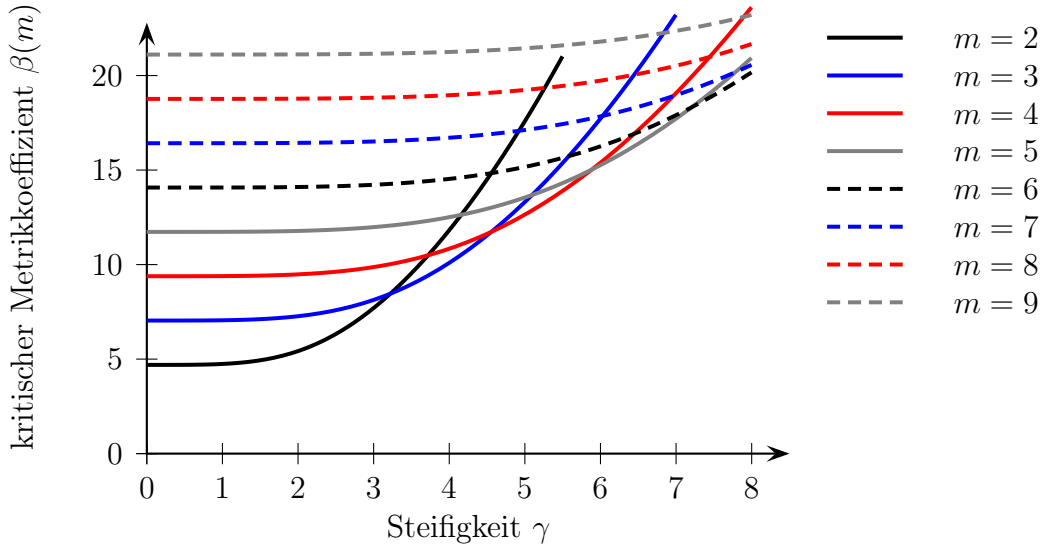


Abbildung 3.4.: Der kritische Metrikkoeffizient, aufgetragen über der dimensionslosen Steifigkeit der Bettung für verschiedene Wellenzahlen, sowie für $n = 10$.

Abbildung 3.4 zeigt den Zusammenhang (3.58) für $n = 10$, wobei die Einhüllende die Stabilitätsgrenze in der Parameterebene darstellt. Das Fehlen der beiden Moden ($m = 0$ bzw. $m = 1$) in obiger Darstellung wird im nächsten Kapitel diskutiert. Für den Exponenten im zusätzlichen Metrikterm (3.50) wurde $n = 10$ gewählt, um die Vergleichbarkeit mit den numerischen Resultaten des folgenden Abschnittes zu garantieren. Ohne die Lösung der FvK-Plattengleichungen bestimmt zu haben, ist es durch einfaches Abschätzen von entsprechenden Energieausdrücken gelungen vorab die Lösung des linearen Stabilitätsproblems qualitativ zu bestimmen. Als Ergebnis kann festgehalten werden, dass

[4] Für eine bessere Darstellung der Stabilitätsgrenze wird $\bar{\beta}$ quadratisch und $\bar{\gamma}$ zur vierten Potenz in Rechnung gestellt [62].

mit größer werdender Steifigkeit der Bettung eine größere Amplitude des zusätzlichen Metrikterms notwendig ist, um die Stabilitätsgrenze zu erreichen. Darüber hinaus stellt sich eine größere Wellenzahl in Umfangsrichtung bei der auftretenden nichttrivialen Lage ein. Wie gut diese Abschätzung ist, wird im Kapitel 3.3.2 diskutiert.

3.3. Lösung der *Föppl von Kármán'schen* Plattengleichungen

Für die genaue Bestimmung der Stabilitätsgrenze ist die Lösung der FvK-Plattengleichung (3.37) und (3.40) notwendig. Mit der im vorigen Kapitel getroffenen Wahl des zusätzlichen Metriktermes (3.50) ist die Lösung von

$$\Delta^2\Phi + Eh\left(\frac{1}{2}\left[w,w\right] + \beta\left(\frac{r^{n-2}}{R^2}\right)n(n+1)\right) = 0 \tag{3.59a}$$

$$K\Delta^2 w - \left[\Phi, w\right] + q(w) = 0, \tag{3.59b}$$

unter Berücksichtigung der nichtlinearen Bettung

$$q(w) = k\left(w - \frac{51}{6\sigma}w^2 + \frac{251}{6\sigma^2}w^3 \pm \dots\right) \tag{3.59c}$$

gesucht. Beim Plattenbeulen geht man im Allgemeinen davon aus, dass für unterkritische Werte der Belastung die triviale, nicht ausgebeulte Lage der Platte eine stabile Gleichgewichtslage darstellt. Mit der Zielsetzung, die kritische Last, also jene Last bei der diese triviale Lage ihre Stabilität verliert, berechnen zu können, ist zunächst die Lösung des Scheibenproblems notwendig.

3.3.1. Die inhomogene Scheibengleichung

Im Gegensatz zum vorliegenden Problem wird bei klassischen statischen Scheibenproblemen die Belastung über die entsprechende Randbedingung berücksichtigt. Aus diesem Grund ist bei [58] das homogene Scheibenproblem dargestellt.
Mit $w(r,\varphi) = 0$ vereinfachen sich die FvK-Plattengleichung (3.59) zur inhomogenen Scheibengleichung

$$\Delta^2\Phi = -Eh\beta\frac{r^{n-2}}{R^n}n\left(n+1\right). \tag{3.60}$$

Sowohl die Geometrie als auch die Belastung, im vorliegenden Fall die gewählte ortsabhängige Metrik, weisen Rotationssymmetrie auf. Aus diesem Grund kann die gesuchte Spannungsfunktion ebenfalls als rotationssymmetrisch vorausgesetzt werden. Wenn die Spannungsfunktion von φ unabhängig ist, vereinfacht sich der biharmonische Operator (3.38), und aus (3.60) wird

$$\Phi_{,rrrr} + \frac{2}{r}\Phi_{,rrr} - \frac{1}{r^2}\Phi_{,rr} + \frac{1}{r^3}\Phi_{,r} = -Eh\beta\frac{r^{n-2}}{R^n}n\left(n+1\right).$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung lässt sich in geschlossener Form

$$\Phi(r) = -Eh\beta\frac{r^{n+2}}{R^n}\frac{(1+n)}{n\left(2+n\right)^2} + \mathcal{C}_1\log r + \mathcal{C}_2 r^2\log r + \mathcal{C}_3 r^2 + \mathcal{C}_4$$

angeben, wobei die Integrationskonstanten ($\mathcal{C}_1$ bis $\mathcal{C}_4$) noch zu bestimmen sind. Zunächst werden die Kräfte und Verschiebungen, die der gefundenen Spannungsfunktion entsprechen, angeschrieben. Aus der Definition der Spannungsfunktion (3.35) berechnen sich die jeweiligen Kräfte pro Längeneinheit

$$N_{rr} = -Eh\beta\left(\frac{r}{R}\right)^n\frac{(1+n)}{n\left(2+n\right)} + \mathcal{C}_1\frac{1}{r^2} + \mathcal{C}_2\left(2\log r + 1\right) + 2\mathcal{C}_3 \tag{3.61a}$$

$$N_{\varphi\varphi} = -Eh\beta\left(\frac{r}{R}\right)^n\frac{(1+n)^2}{n\left(2+n\right)} - \mathcal{C}_1\frac{1}{r^2} + \mathcal{C}_2\left(2\log r + 3\right) + 2\mathcal{C}_3 \tag{3.61b}$$

$$N_{r\varphi} = 0. \tag{3.61c}$$

Der Zusammenhang zwischen Verzerrungen und Spannungen (3.13), die Definition der Schnittkräfte pro Längeneinheit (3.14) und die Beziehung zwischen Verzerrungen und Verschiebungen (3.36) liefern das Verschiebungsfeld der Scheibe

$$\begin{aligned} u = \frac{1}{Eh}\Bigg\{&-Eh\beta\frac{r^{n+1}}{R^n}\frac{1-\mu\left(1+n\right)}{n\left(2+n\right)} - \mathcal{C}_1\frac{1+\mu}{r} + \mathcal{C}_2\left[2\left(1-\mu\right)r\log r - r\left(1+\mu\right)\right] \\ &+\mathcal{C}_3 2r\left(1-\mu\right)\Bigg\} + \mathcal{C}_5\sin\varphi + \mathcal{C}_6\cos\varphi \end{aligned} \tag{3.62a}$$

$$v = \mathcal{C}_2\frac{4r\varphi}{Eh} + \mathcal{C}_5\cos\varphi - \mathcal{C}_6\sin\varphi + \mathcal{C}_7 r. \tag{3.62b}$$

Mit den Ausdrücken (3.61) und (3.62) ist die allgemeine Lösung des inhomogenen Scheibenproblems (3.60) gefunden, die jetzt an die Randbedingungen angepasst wird.
Zunächst soll die Lösung für eine Vollscheibe Gültigkeit haben. Somit dürfen die Schnittkräfte (3.61a) und (3.61b) für $r \to 0$ nicht über alle Grenzen wachsen, was $\mathcal{C}_1 = \mathcal{C}_2 = 0$

bedingt. Aufgrund der Definition der Spannungsfunktion (3.35) kann die additive Konstante $\mathcal{C}_4$ Null gesetzt werden. Die Scheibe wird mit keiner äußeren Kraft belastet, daher ist am freien Rand keine radiale Kraft (3.61a) $N_{rr}(R) = 0$ zu erwarten. Diese Bedingung liefert die fehlende Konstante

$$\mathcal{C}_3 = \frac{1}{2} Eh\beta \frac{(1+n)}{n\,(2+n)}.$$

Die an die Randbedingung angepasste Spannungsfunktion und die entsprechenden Kräfte in der Scheibe ergeben sich zu

$$\begin{aligned} \Phi^{\mathrm{S}} &= Eh\beta \frac{(1+n)}{n\,(2+n)} \left[\frac{r^2}{2} - \frac{r^{n+2}}{(n+2)R^n} \right] \qquad N^{\mathrm{S}}_{rr} = Eh\beta \frac{(1+n)}{n\,(2+n)} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^n \right] \\ N^{\mathrm{S}}_{\varphi\varphi} &= Eh\beta \frac{(1+n)}{n\,(2+n)} \left[1 - (1+n) \left(\frac{r}{R} \right)^n \right] \quad N^{\mathrm{S}}_{r\varphi} = 0. \end{aligned} \tag{3.63}$$

Die soeben berechneten inneren Kräfte erfüllen einerseits das Kräftegleichgewicht in r-(3.16) und φ-Richtung (3.17), und zudem auch die Randbedingungen (3.41). Aufgrund der Rotationssymmetrie der auftretenden Kräfte ist zu erwarten, dass die sich einstellenden Verschiebungen, solange keine transversalen Verschiebungen auftreten, unabhängig von φ sind, wodurch sich in (3.62) $\mathcal{C}_5 = \mathcal{C}_6 = 0$ ergibt. Die letzte Integrationskonstante ergibt sich zu $\mathcal{C}_7 = 0$, weil die Verschiebung in tangentialer Richtung (3.62b) aufgrund der fehlenden Schubspannung ($\sigma_{r\varphi} = N_{r\varphi}/h = 0$) Null sein muss. Unter Berücksichtigung aller Randbedingungen ergeben sich die Verschiebungen in der Scheibe zu

$$u^{\mathrm{S}} = r \frac{\beta}{n(2+n)} \left[(1+n)(1-\mu) + \left(\frac{r}{R} \right)^n (1 - \mu(1+n)) \right] \quad v^{\mathrm{S}} = 0 \quad w^{\mathrm{S}} = 0, \tag{3.64}$$

bzw. unter Verwendung von (3.36) die Verzerrungen zu

$$\begin{aligned} \epsilon^{\mathrm{S}}_{rr} &= \frac{\beta}{n(2+n)} \left[(1+n)(1-\mu) + \left(\frac{r}{R} \right)^n \left((1+n) - \mu(1+n)^2 \right) \right] \\ \epsilon^{\mathrm{S}}_{\varphi\varphi} &= \frac{\beta}{n(2+n)} \left[(1+n)(1-\mu) + \left(\frac{r}{R} \right)^n (1 - \mu(1+n)) \right]. \end{aligned} \tag{3.65}$$

An dieser Stelle sein darauf hingewiesen, dass der oben angegebene Lösungsweg der Darstellung des homogenen Scheibenproblems bei [58] folgt. Die Lösung des inhomogenen Scheibenproblems (3.60) wird mit einem Index S gekennzeichnet und ist mit der Spannungsfunktion sowie den Kräften (3.63) und den Verschiebungen (3.64) gegeben.

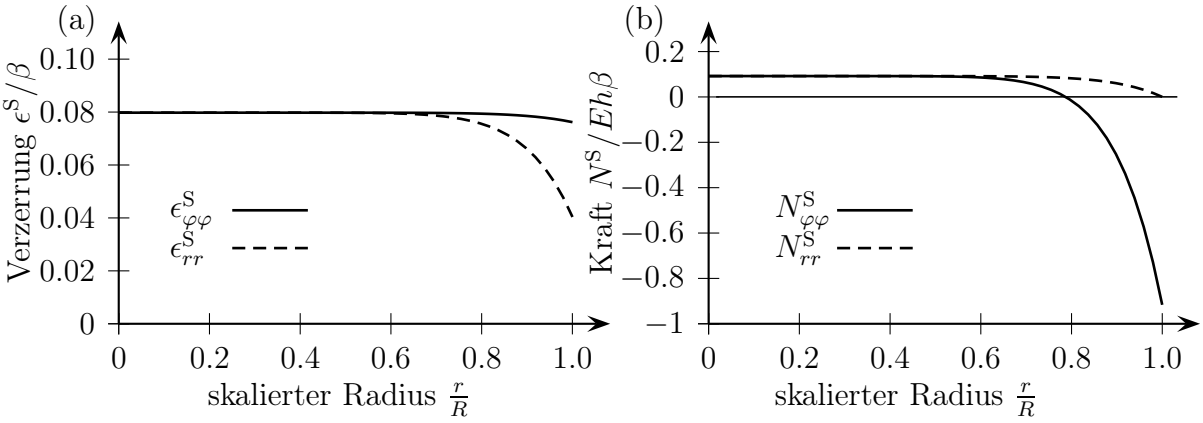


Abbildung 3.5.: Die Verzerrungen (3.65) für $\mu = 0,13$ bzw. die Schnittgrößen (3.63) aufgetragen über dem skalierten Radius.

Für den Exponenten im Ausdruck des zusätzlichen Metrikterms (3.50) wird $n = 10$ für die weitere Betrachtung gewählt. Diese Wahl ist vollkommen willkürlich und wird anhand der erzielten Ergebnisse zu verifizieren sein. Darüber hinaus wird für die weitere Analyse die *Poisson*-Zahl mit $\mu = 0,13$, gemäß der molekularstatischen Analyse (Tab. 2.2), in Rechnung gestellt.

Abbildung 3.5(a) zeigt die Verzerrungen (3.65) in radialer bzw. tangentialer Richtung zufolge der Lösung des Scheibenproblems. Die tatsächlich auftretende Verzerrung in tangentialer Richtung am Plattenrand ist zwar positiv, aber um eine Größenordnung kleiner im Vergleich zum zusätzlichen Metrikterm (3.50). Bereiche, die vom Rand weiter entfernt liegen, behindern eine Dehnung in Umfangsrichtung. Dieser Widerstand macht sich in Form einer Umfangsdruckspannung bemerkbar, wie sie in Abb. 3.5(b) dargestellt ist. Die Radialspannung ist gemäß der Randbedingung am Rand Null und überall in der Platte positiv. Dieser Eigenspannungszustand ist eine Folge des ortsabhängigen Metrikterms, der die Belastung der Scheibe darstellt. Die im äußeren Bereich der Scheibe auftretende Druckspannung in Umfangsrichtung ist für das Instabilwerden der trivialen, nicht ausgebeulten Lage verantwortlich. Um den kritischen Wert dieser Druckspannung, also des Koeffizienten des Metrikterms β, zu bestimmen, ist die Lösung der linearen Plattengleichung zu berechnen.

3.3.2. Die lineare Plattengleichung

Die analytische Lösung der Scheibengleichung (3.63) verknüpft die Spannungen mit dem Koeffizienten des zusätzlichen Metrikterms in eindeutiger Weise. Die Druckspannung nahe dem Rand der Scheibe kann die triviale, nicht ausgebeulte Gleichgewichtslage instabil

werden lassen. Die Frage nach dem kritischen Wert für den Metrikterm β wird mit einer linearen Stabilitätsanalyse beantwortet. Zu diesem Zweck wird eine Koordinatentransformation durchgeführt. Die Lösung des Scheibenproblems stellt die Referenzkonfiguration dar, um die die Differentialgleichung (3.59b) linearisiert wird. Zusätzlich werden die einzelnen Terme der Gleichung dimensionslos gemacht. Alle auftretenden Größen werden als Summe der Lösung des Scheibenproblems (a^{S}) und einem Produkt einer dimensionslosen ($\bar{a}$) bzw. einer dimensionsbehafteten Größe ($a^{\star}$) dargestellt. Diese Vorgehensweise führt bei der transversalen Verschiebung ($w^{\mathrm{S}} = 0$), der Spannungsfunktion und den Koeffizienten des zusätzlichen Metrikterms auf

$$w(r,\varphi) = w^{\star}\bar{w}(\bar{r},\varphi) \qquad \Phi(r,\varphi) = \Phi^{\mathrm{S}}(r,\varphi) + \Phi^{\star}\bar{\Phi}(\bar{r},\varphi) \qquad \beta = \epsilon^{\star}\bar{\beta}.$$

Die dimensionsbehafteten Größen $a^{\star}$ sind grundsätzlich beliebig, jedoch ist jene Wahl zu favorisieren, bei der verschiedene Parameter möglichst gleiche Größenordnungen im betrachteten Parameterbereich aufweisen. Mit den dimensionsbehafteten Ausdrücken

$$r^{\star} = R \qquad \Phi^{\star} = K \qquad w^{\star} = \sqrt{\frac{K}{Eh}} \qquad \epsilon^{\star} = \frac{K}{EhR^2}, \tag{3.66}$$

und der partiellen Ableitung $a_{,r} = \frac{1}{r^{\star}} a_{,\bar{r}}$ ergibt sich aus (3.59b) die dimensionslose Plattengleichung zu

$$\Delta^2\bar{w} = \left[\bar{\Phi},\bar{w}\right] + \bar{\beta}\frac{1+n}{n(2+n)}\left[\Delta\bar{w}(1-\bar{r}^n) - \left(\frac{1}{\bar{r}}\bar{w}_{,\bar{r}} + \frac{1}{\bar{r}^2}\bar{w}_{,\varphi\varphi}\right) n\bar{r}^n\right] - \frac{r^{\star 4}}{\Phi^{\star}w^{\star}} q(w^{\star}\bar{w}). \tag{3.67}$$

Für kleine Werte des Metrikkoeffizienten $\bar{\beta} < \bar{\beta}_{\mathrm{krit}}$ stellt die oben berechnete Lösung des Scheibenproblems mit $w^{\mathrm{S}} = 0$ das Verhalten der nicht-*Euklidischen* Platte dar. Mit steigender Belastung in Form des Metrikkoeffizienten ist eine Verzweigung der Lösung zu erwarten. Wird exakt der kritische Wert $\bar{\beta}_{\mathrm{krit}}$ erreicht, existieren sowohl die nicht ausgebeulte, als auch eine ausgebeulte Lösung mit verschwindend kleiner Amplitude. Diese Koexistenz erlaubt die Berechnung des kritischen Koeffizienten mittels Analyse der um die Lösung des Scheibenproblems linearisierten Differentialgleichung. Der *Monge-Ampére*-Operator in der Differentialgleichung (3.67) beschreibt die Änderung des Spannungszustandes für ein Ausbeulen aus der triviale Lage. Da im Verzweigungspunkt die triviale und die nicht-triviale Lösung koexistieren, kann mit dem Spannungszustand der nicht ausgebeulten Lage, also der Lösung des Scheibenproblems, gerechnet werden ($\bar{\Phi} = 0$). Eine weitere Vereinfachung wird erzielt, wenn der Ausdruck für die nichtlineare

Bettung um die nicht ausgebeulte Lage ($w^{\mathrm{S}} = 0$) linearisiert wird. Unter Vernachlässigung der Querstriche und der Verwendung der Steifigkeit der jetzt linearen Bettung $\gamma = k\frac{R^4}{K}$ ergibt sich die lineare Differentialgleichung

$$\Delta^2 w = \beta^2 \frac{1+n}{n(2+n)} \left[\Delta w (1 - r^n) - \left(\frac{1}{r} w_{,r} + \frac{1}{r^2} w_{,\varphi\varphi} \right) n r^n \right] - \gamma^4 w. \tag{3.68}$$

Um den interessanten Parameterbereich besser auflösen zu können, wird der Metrikkoeffizient β quadratisch, und die Steifigkeit der linearen Bettung γ zur vierten Potenz berücksichtigt. Dieses Skalieren der beiden Parameter ist auch bei klassischen Beulproblemen, wie sie etwa bei Wang [62] dargestellt sind, zielführend.

Lösung der linearen Plattengleichung

Betrachtet man die Ergebnisse der atomistischen Rechnung (Abb. 2.14), so fällt die Periodizität der transversalen Verschiebung in Umfangsrichtung auf. Mit dieser Beobachtung scheint es sinnvoll, auch der Lösung des Plattenproblems einer derartige Periodizität zu unterstellen. Die Verwendung des Produktansatzes

$$w(r, \varphi) = g(r) \, \cos m\varphi \qquad m \in \mathbb{N} \tag{3.69}$$

für die gesuchte Verschiebung ist daher gerechtfertigt. Der Ansatz (3.69) in (3.68) eingesetzt liefert

$$\mathcal{L}^2 g = \beta^2 \frac{1+n}{n(2+n)} \left[\mathcal{L} g (1 - r^n) - \left(\frac{1}{r} g' - \frac{m^2}{r^2} g \right) n r^n \right] - \gamma^4 g, \tag{3.70}$$

mit dem bereits definierten linearen Operator (3.44). Mit dem speziellen Ansatz (3.69) reduziert sich die partielle Differentialgleichung auf ein Randwertproblem für die transversale Verschiebung in Abhängigkeit von der radialen Richtung. Zwei Randbedingungen (3.43), die im Zuge der Herleitung aufgetreten sind, wurden bis jetzt noch nicht diskutiert. Der Ansatz (3.69) in diese beiden Randbedingungen für das Biegemoment und die Querkraft eingesetzt, liefert

$$\left(g'' + \mu \left(\frac{1}{r} g' - \frac{m^2}{r^2} g \right) \right) \delta g' \Big|_0^R = 0 \tag{3.71a}$$

$$\left((\mathcal{L} g)_{,r} + \frac{1-\mu}{r^2} m^2 \left(\frac{1}{r} g - g' \right) \right) \delta g \Big|_0^R = 0. \tag{3.71b}$$

Die lineare Stabilitätsanalyse reduziert sich auf die Lösung eines Randwertproblems vierter Ordnung (3.70) mit den zu erfüllenden kinetischen Randbedingungen (3.71) und den beiden Regularitätsbedingungen (3.49).
WANG [62] diskutiert das Beulverhalten einer Kreisplatte mit radialer äußerer Druckbelastung die auf einer *Winkler*bettung gelagert ist. Die dort angegebene analytische Vorgehensweise führt auf Besselfunktionen, deren Nullstellen nur numerisch angebbar sind. In der vorliegenden Arbeit wird von vornherein eine Lösung auf numerischen Weg angestrebt. Mit Hilfe des Randwertlösers COLSYS [3], der in ein Homotopieverfahren eingebettet ist, wird das Differentialgleichungssystem numerisch gelöst.
Das Aufspalten der Differentialgleichung vierter Ordnung (3.70) in zwei Differentialgleichungen zweiter Ordnung

$$\begin{aligned}\mathcal{L}g_1 &= g_2\\ \mathcal{L}g_2 &= \beta^2\frac{1+n}{n(2+n)}\left[g_2(1-r^n)-\left(\frac{1}{r}g_1'-\frac{m^2}{r^2}g_1\right)nr^n\right]-\gamma^4 g_1\end{aligned}$$

ist aus numerischer Sicht vorteilhaft, obwohl COLSYS [3] grundsätzlich auch mit Differentialgleichungen bis vierter Ordnung zurechtkommt. Bei der Formulierung der Regularitätsbedingungen (3.49) wurde ebenfalls diese Aufspaltung verwendet. Weil am zu berechnenden Verzweigungspunkt die triviale Lösung und die nicht-triviale Lösung mit verschwindender Amplitude koexistieren, muss eine zusätzliche Skalierungsnebenbedingung vorgeschrieben werden. Diese als zusätzliche Differentialgleichung (3.72a) formulierte Nebenbedingung skaliert den zum kritischen Wert des Metrikkoeffizienten zugeordneten Eigenmode. Aufgrund der Koexistenz mit der nicht ausgebeulten Lage ist diese Nebenbedingung notwendig, weil ansonsten nur diese bestimmt werden würde. Die Bedingung (3.72a) mit den entsprechenden Randbedingungen (Tabelle 3.1) ist so formuliert, dass kein Eigenmode von vornherein ausgeschlossen ist. Die für die numerische Lösung aufbereiteten Differentialgleichungen

$$e' = r\,(g_1-1)^2 \tag{3.72a}$$

$$g_1'' = \frac{m^2}{r^2}g_1-\frac{1}{r}g_1'+g_2 \tag{3.72b}$$

$$g_2'' = \frac{m^2}{r^2}g_2-\frac{1}{r}g_2'+\beta^2\frac{1+n}{n(2+n)}\left[g_2(1-r^n)-\left(\frac{1}{r}g_1'-\frac{m^2}{r^2}g_1\right)nr^n\right]-\gamma^4 g_1 \tag{3.72c}$$

beinhalten acht unbekannte Größen $z=(e,g_1,g_1',g_2,g_2',\beta,\gamma,m)$, wodurch ebenso viele Randbedingungen zu formulieren sind. Tabelle 3.1 stellt alle zu erfüllenden Bedingungen

übersichtlich zusammen.

Tabelle 3.1.: Rand- und Regularitätsbedingungen für das Differentialgleichungssystem (3.72)

Randbedingungen innen $r = 0$	Randbedingungen außen $r = 1$
• Skalierung des Eigenmodes (3.72a) $e = 0$	• Skalierung des Eigenmodes (3.72a) $e = \frac{1}{2}$
• Beschränktheit der Lösung von (3.72b) (Bedingung (3.49)) $m = 0$: $g_1' = 0$ $m > 0$: $g_1 = 0$	• Biegemoment (3.71a) $g_2 + g_1'(\mu - 1) + g_1 m^2(1 - \mu) = 0$
• Beschränktheit der Lösung von (3.72c) (Bedingung (3.49)) $m = 0$: $g_2' = 0$ $m > 0$: $g_2 = 0$	• Querkraft (3.71b) $g_2' + (1 - \mu)m^2(g_1 - g_1') = 0$
• Homotopieparameter $\beta^{i+1} = \beta^i + \Delta\beta$	
• Wellenzahl in Umfangsrichtung (3.69) $m \in \mathbb{N}$	

Die numerische Lösung gliedert sich in zwei Schritte. Zunächst wird für eine gewählte Wellenzahl m und eine beliebig gewählte Bettungsziffer γ der zugehörige kritische Metrikkoeffizient β berechnet. Als Startlösung ist ein einfacher Verlauf der zu berechnenden Größen zur Verfügung zu stellen. Dieser erste Iterationsschritt liefert somit einen Punkt auf der Lösungskurve im Parameterraum. Im zweiten Schritt wird die Belastung als Homotopieparameter interpretiert, und in Abhängigkeit von einer passend gewählten Schrittweite werden weitere Punkte auf der Lösungskurve berechnet. Als Startlösung wird immer der Lösungsvektor des vorherigen Durchlaufes verwendet. Beide Schritte sind für verschiedene Wellenzahlen zu wiederholen und liefern entsprechende Verläufe, wie sie die Kurvenschar in Abb. 3.6(a) in der Parameterebene darstellt.

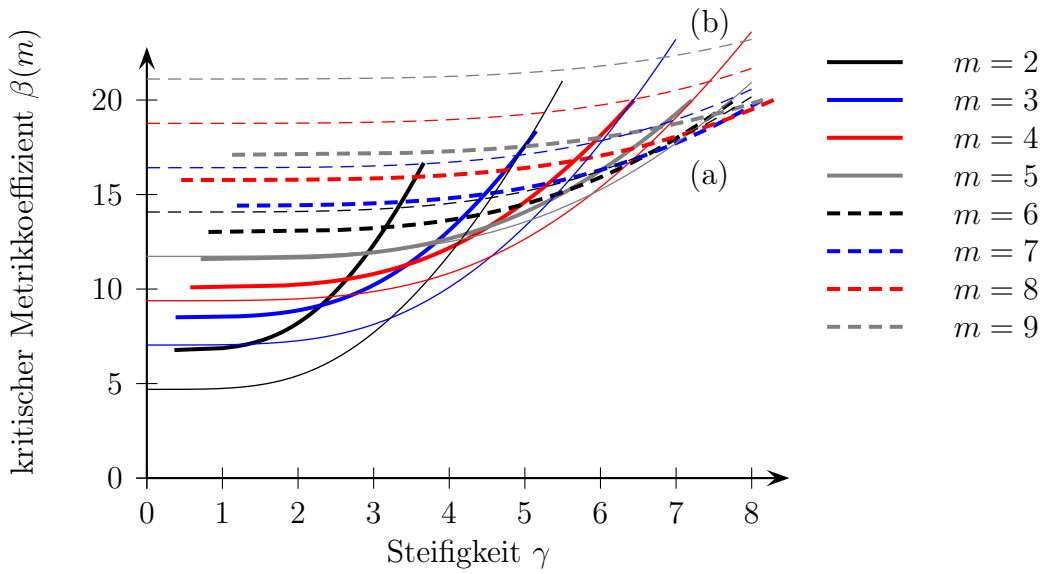


Abbildung 3.6.: Der kritische Metrikkoeffizient aufgetragen über der dimensionslosen Steifigkeit der linearen Bettung. Die Einhüllende der Kurven für unterschiedliche Wellenzahlen m stellt die Stabilitätsgrenze für β im linearen Modell dar. Das Ergebnis der numerischen Analyse ist durch die Kurvenschar (a) repräsentiert, zusätzlich ist das Ergebnis der bereits diskutierten qualitativen Analyse (b) dargestellt.

Abbildung 3.6(a) bzw. (b) zeigt den Zusammenhang zwischen der Steifigkeit der Bettung γ und dem kritischen Koeffizienten der Metrik β. Die Einhüllende dieser Kurven stellt die Stabilitätsgrenze dar. Für jeden Wert von m, mit Ausnahme von 0 und 1, ergibt sich eine entsprechende Grenze zum instabilen Bereich. Der Fall $m = 1$ tritt deswegen nicht auf, weil er einem Kippen der Platte, also einem Starrkörpermode, gleichkommt. Dieser Mode trägt daher nicht zur Verzerrungsenergie der Platte zufolge einer transversalen Verschiebung bei. Bei klassischen Beulproblemen, wie sie etwa bei [62] nachzulesen sind, tritt der Fall $m = 0$ auf. Wirkt auf eine Kreisplatte eine Druckkraft am freien Rand in der Plattenebene, so tritt ab einem bestimmten Wert der Bettungszahl ein von φ unabhängiger Beulmode auf. Warum ein solcher Beulmode beim vorliegenden Problem nicht auftritt, läßt sich mit Hilfe der auftretenden Schnittkräfte klären. Bei einer Kreisplatte mit äußerer Druckbelastung liefert die Lösung des Scheibenproblems $N^{\mathrm{S}}_{\varphi\varphi} = N^{\mathrm{S}}_{rr} = -F$, also eine in der gesamten Platte in radialer als auch in tangentialer Richtung konstante Druckbelastung. Die entsprechende Lösung für das vorliegende Problem ist in Abb. 3.5(b) dargestellt. Die Platte ist für $\beta > 0$ lediglich in tangentialer Richtung auf Druck belastet, wohingegen in radialer Richtung eine Zugbelastung im Inneren der Platte wirkt.

Mit größer werdender Steifigkeit der Bettung ist ein größerer Metrikkoeffizient notwen-

dig, um die Stabilitätsgrenze zu erreichen. Darüber hinaus besitzt der sich einstellende Eigenmode eine größere Wellenzahl m. Abbildung 3.6 zeigt neben der numerischen Lösung des entsprechenden Stabilitätsproblems auch die quantitative Abschätzung. Bemerkenswert ist die Tatsache, dass der qualitative Verlauf der Stabilitätsgrenze (3.58) ohne der Lösung der entsprechenden Gleichungen gefunden wurde.

3.3.3. Nichtlineare Stabilitätsuntersuchung

Aus Abb. 3.6 ist ersichtlich, dass sich Kurven mit unterschiedlicher Wellenzahl schneiden. Um zu entscheiden welcher Beulmode an einem solchen Schnittpunkt auftritt, ist eine nichtlineare Analyse notwendig. Ziel ist es, die Verzweigungsgleichungen abzuleiten, die in Abhängigkeit von den Parametern angeben welche Lösung auftreten wird. Diese Analyse wird exemplarisch für den Schnittpunkt zwischen dem 1. ($m = 2$) und dem 2. Mode ($m = 3$) durchgeführt, der in Abb. 3.7 vergrößert dargestellt ist.

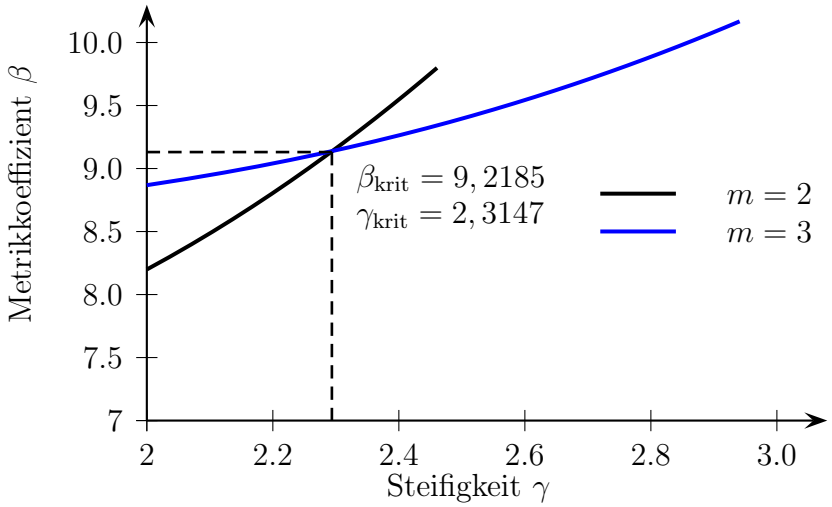


Abbildung 3.7.: Bereich in der Parameterebene, in dem sich der 1. und der 2. Beulmode schneiden.

Im verwendeten Produktansatz (3.69) wird die offensichtliche φ-Abhängigkeit der zu erwartenden Lösung mathematisch in Form einer cos-Funktion formuliert. Aufgrund der Symmetrie der auftretenden Operatoren führt eine φ-Abhängigkeit, ausgedrückt durch eine sin-Funktion, zum selben Randwertproblem. Wenn es nun um die Analyse eines Schnittpunktes im $\beta(\gamma)$-Verlauf zweier Beulmoden geht, ist dieser Tatsache im Ansatz am kritischen Punkt ($\beta_{\text{krit}} = 9.2185$, $\gamma_{\text{krit}} = 2.3147$) durch

$$w(r,\varphi) = u(r)\,(x_{2\text{c}}\cos 2\varphi + x_{2\text{s}}\sin 2\varphi) + v(r)\,(x_{3\text{c}}\cos 3\varphi + x_{3\text{s}}\sin 3\varphi) \tag{3.73}$$

Rechnung zu tragen. Um zu klären welche Terme in den Verzweigungsgleichungen zu berücksichtigen sind, ist der Übergang auf komplexe Zahlen vorteilhaft. Mit den aus der *Euler'schen*-Formel abgeleiteten Zusammenhängen $2\cos m\varphi = \mathrm{e}^{im\varphi} + \mathrm{e}^{-im\varphi}$ bzw. $2i\sin m\varphi = \mathrm{e}^{im\varphi} - \mathrm{e}^{-im\varphi}$ ergibt sich aus (3.73) der komplexwertige Ansatz am kritischen Punkt zu

$$w(r,\varphi) = u(r)\left(z_2\,\mathrm{e}^{i2\varphi} + \bar{z}_2\,\mathrm{e}^{-i2\varphi}\right) + v(r)\left(z_3\,\mathrm{e}^{i3\varphi} + \bar{z}_3\,\mathrm{e}^{-i3\varphi}\right), \tag{3.74}$$

mit $z_2 = \frac{1}{2}(x_{2\mathrm{c}} - ix_{2\mathrm{s}})$ bzw. $z_3 = \frac{1}{2}(x_{3\mathrm{c}} - ix_{3\mathrm{s}})$. Die beiden radialen Eigenfunktionen $u(r)$ und $v(r)$ sind die Lösungen des Differentialgleichungssystems (3.72) für die Wellenzahl $m = 2$ bzw. $m = 3$ am Schnittpunkt beider Beulmoden in der Parameterebene. Beide Funktionen liegen nur in numerischer Form vor und sind in Abb. 3.8 graphisch dargestellt.

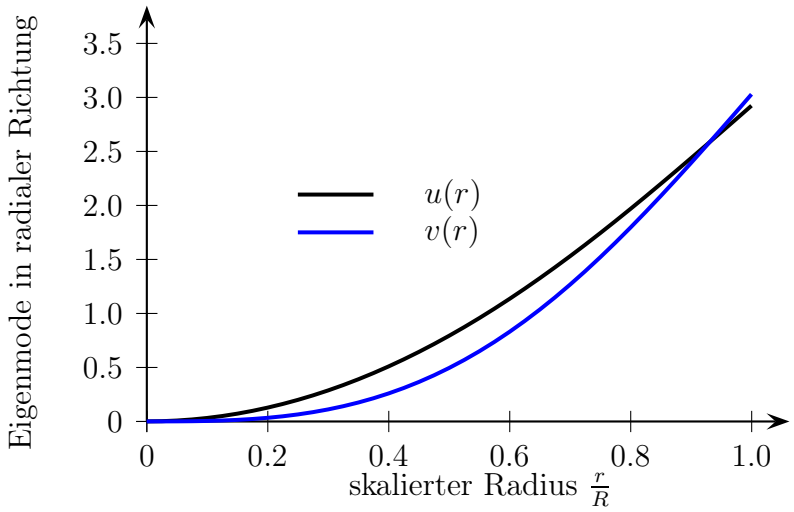


Abbildung 3.8.: Die Eigenfunktionen $u(r)$ für $m = 2$ bzw. $v(r)$ für $m = 3$ am Schnittpunkt beider Beulmoden in der Parameterebene.

Die gesuchten Verzweigungsgleichungen lassen sich aus einem komplexen Potential p-ter Ordnung der Form

$$\mathcal{U} = \sum_p A_p\,\mathcal{Z}_2^{p_1}\,\bar{\mathcal{Z}}_2^{p_2}\,\mathcal{Z}_3^{p_3}\,\bar{\mathcal{Z}}_3^{p_4} \qquad \text{Ordnung } p = \sum_i p_i \tag{3.75}$$

ableiten, wenn man als neue Variablen

$$\mathcal{Z}_2 = z_2\mathrm{e}^{i2\varphi} \qquad\qquad \mathcal{Z}_3 = z_3\mathrm{e}^{i3\varphi}$$

definiert. Die unbestimmten reellen Koeffizienten A_p entstehen durch entsprechendes Integrieren über die Plattenfläche. Bis zu welcher Ordnung p das Potential betrachtet werden muss und welche Kombinationen der Exponenten p_i notwendig sind, um das Systemverhalten am kritischen Punkt zu beschreiben, soll die nun folgende Überlegung klären. Das Potential muss in jedem Fall Rotationssymmetrie besitzen, was durch die Bedingung

$$\mathcal{U}(\varphi) = \mathcal{U}(\varphi + \delta)$$

für beliebiges δ zum Ausdruck gebracht wird. Diese Forderung, angewendet auf (3.75), führt zum folgenden Zusammenhang

$$2\,(p_1 - p_2) + 3\,(p_3 - p_4) = 0.$$

Sollen Terme von 2. bis 5. Ordnung im Potential Berücksichtigung finden, so hat man es mit bis zu 121 verschiedenen Termen zu tun. Unter Verwendung der geforderte Rotationssymmetrie bleiben lediglich 7 Terme im Potential zurück

$$\begin{aligned}\mathcal{U} &= A_{1100}\,\mathcal{Z}_2^1\bar{\mathcal{Z}}_2^1 + A_{0011}\,\mathcal{Z}_3^1\bar{\mathcal{Z}}_3^1 \\ &= A_{2200}\,\mathcal{Z}_2^2\bar{\mathcal{Z}}_2^2 + A_{1111}\,\mathcal{Z}_2^1\bar{\mathcal{Z}}_2^1\mathcal{Z}_3^1\bar{\mathcal{Z}}_3^1 + A_{0022}\,\mathcal{Z}_3^2\bar{\mathcal{Z}}_3^2 \\ &= A_{3002}\,\mathcal{Z}_2^3\bar{\mathcal{Z}}_3^2 + A_{0320}\,\bar{\mathcal{Z}}_2^3\mathcal{Z}_3^2.\end{aligned}$$

Das lineare Problem wird durch entsprechende quadratische Terme im Potential repräsentiert. Berücksichtigt man nun Terme bis zur vierten Ordnung, so entspricht das einer Analyse der führenden nichtlinearen Terme in den entsprechenden Systemgleichungen. Diese werden im weiteren Verlauf dazu verwendet, Aussagen über die Stabilität auftretender Lösungen zu treffen. Bis zur vierten Ordnung treten komplexe und konjugiert komplexe Koeffizienten stets paarweise mit gleichem Exponenten auf, woraus sich ein reelles Verzweigungspotential und somit die beiden Verzweigungsgleichungen

$$\begin{aligned}\mathcal{U}_{,\mathcal{Z}_2} = 0 &= \mathcal{Z}_2\left(2A_{1100} + 4A_{2200}\mathcal{Z}_2^2 + 2A_{1111}\mathcal{Z}_3^2\right) \\ \mathcal{U}_{,\mathcal{Z}_3} = 0 &= \mathcal{Z}_3\left(2A_{0011} + 4A_{0022}\mathcal{Z}_3^2 + 2A_{1111}\mathcal{Z}_2^2\right)\end{aligned} \tag{3.76}$$

ergeben. Der aufwendige Teil der nichtlinearen Analyse reduziert sich auf die Bestimmung der auftretenden Koeffizienten in (3.76), deren Vorzeichen und Größenordnung das Verzweigungsverhalten bestimmt. Die allgemeinen Überlegungen das Potential betreffend haben uns gezeigt, nach welchen Termen Ausschau zu halten ist.

Im allgemeinen Fall muss für die transversale Verschiebung ein Ansatz der Form

$$w = w_\mathrm{c} + w_\mathrm{s} = w_\mathrm{c} + h\left(w_\mathrm{c}, \lambda_\mathrm{c}\right) \tag{3.77}$$

gemacht werden, der sich aus dem kritischen Mode w_c und dem nicht-kritischen Moden, ausgedrückt durch den kritischen $w_\mathrm{s} = h\left(w_\mathrm{c}, \lambda_\mathrm{c}\right)$, zusammensetzt. Dieses Vorgehen ist als *Ljapunov-Schmidt* Methode bekannt [60]. Die Vernachlässigung der nicht-kritischen Moden $h = 0$ in (3.77) liefert die richtigen Verzweigungsgleichungen, wenn nur nicht-lineare Terme bis zur 3.Ordnung zu berücksichtigen sind. In diesem Fall reduziert sich die *Ljapunov-Schmidt* Methode auf das *Galerkin'schen*-Verfahren (vgl. Anhang B), mit welchem im Folgenden die relevanten Terme bestimmt werden.
Mit dem Ziel, die Verzweigungsgleichungen abzuleiten, ist zunächst, wie bei der Lösung des linearen Problems, die Scheibengleichung zu lösen. Vergleichbar zu der im Kapitel 3.3.2 beschriebenen Vorgehensweise, wird nun die Scheibengleichung (3.59a) mit

$$w(r,\varphi) = w^\star \bar{w}(\bar{r},\varphi) \qquad \Phi(r,\varphi) = \Phi^\mathrm{S}(r,\varphi) + \Phi^\star \bar{\Phi}(\bar{r},\varphi) \qquad \beta = \beta_\mathrm{krit} + \epsilon^\star \lambda_\beta \tag{3.78}$$

skaliert bzw. dimensionslos gemacht. Im Gegensatz zu (3.66) wird der Metrikkoeffizient als Summe des kritischen Wertes am Verzweigungspunkt und eines linearen Entfaltungsparameters dargestellt. Der Ausdruck (3.78) in (3.59a) eingesetzt liefert einerseits

$$\Delta^2 \Phi^0 = -Eh\beta_\mathrm{krit} \frac{r^{n-2}}{R^n} n(n+1),$$

was dem bereits behandelten Scheibenproblem (3.60) entspricht, und andererseits

$$\Delta^2 \bar{\Phi} = -\frac{1}{2}\left[\bar{w}, \bar{w}\right] - \lambda_\beta \bar{r}^n n(n+1). \tag{3.79}$$

Die Spannungsfunktion für das linearisierte Scheibenproblem ohne die Berücksichtigung des *Monge-Ampére*-Operators wurde bereits im Kapitel 3.3.1 bestimmt. Bei der nicht-linearen Analyse wird zusätzlich der Einfluss der transversalen Verschiebung auf die Spannungsfunktion betrachtet. Der Ansatz (3.74) in (3.79) eingesetzt liefert unter Ver-

nachlässigung der Querstriche zunächst

$$\begin{aligned}
&\Delta^2\Phi + z_2^2\, F_{2000}\, \mathrm{e}^{i4\varphi} + z_2\bar{z}_2\, F_{1100} + \bar{z}_2^2\, F_{0200}\, \mathrm{e}^{-i4\varphi} + \\
&\quad z_2 z_3\, F_{1010}\, \mathrm{e}^{i5\varphi} + \bar{z}_2 z_3\, F_{0110}\, \mathrm{e}^{i\varphi} + z_2\bar{z}_3\, F_{1001}\, \mathrm{e}^{-i\varphi} + \bar{z}_2\bar{z}_3\, F_{0101}\, \mathrm{e}^{-i5\varphi} + \\
&\quad z_3^2\, F_{0020}\, \mathrm{e}^{i6\varphi} + z_3\bar{z}_3\, F_{0011} + \bar{z}_3^2\, F_{0002}\, \mathrm{e}^{-i6\varphi} + \\
&\quad \beta r^{n-2} n(n+1) = 0,
\end{aligned} \tag{3.80}$$

mit den entsprechenden Funktionen

$$\begin{aligned}
F_{2000} &= F_{0200} = u''\left(\frac{1}{r}u' - \frac{4}{r^2}u\right) + 4\left(\frac{1}{r}u' - \frac{1}{r^2}u\right)^2 \\
F_{1100} &= 2u''\left(\frac{1}{r}u' - \frac{4}{r^2}u\right) - 8\left(\frac{1}{r}u' - \frac{1}{r^2}u\right)^2 \\
F_{1010} &= F_{0101} = u''\left(\frac{1}{r}v' - \frac{9}{r^2}v\right) + v''\left(\frac{1}{r}u' - \frac{4}{r^2}u\right) + 12\left(\frac{1}{r}u' - \frac{1}{r^2}u\right)\left(\frac{1}{r}v' - \frac{1}{r^2}v\right) \\
F_{0110} &= F_{1001} = u''\left(\frac{1}{r}v' - \frac{9}{r^2}v\right) + v''\left(\frac{1}{r}u' - \frac{4}{r^2}u\right) - 12\left(\frac{1}{r}u' - \frac{1}{r^2}u\right)\left(\frac{1}{r}v' - \frac{1}{r^2}v\right) \\
F_{0020} &= F_{0002} = v''\left(\frac{1}{r}v' - \frac{9}{r^2}v\right) + 9\left(\frac{1}{r}v' - \frac{1}{r^2}v\right)^2 \\
F_{0011} &= 2v''\left(\frac{1}{r}v' - \frac{9}{r^2}v\right) - 18\left(\frac{1}{r}v' - \frac{1}{r^2}v\right)^2.
\end{aligned} \tag{3.81}$$

Die in (3.81) angegebenen Funktionen setzten sich im Grunde aus den beiden Eigenmoden in radialer Richtung (Abb. 3.8), bzw. deren Ableitungen zusammen, und sind aufgrund des gewählten Lösungsverfahrens nur in numerischer Form vorhanden. Betrachtet man in der Differentialgleichung (3.80) die Funktionen (3.81) als Störterme, so ist es zielführend im Ansatz für die gesuchte Spannungsfunktion dieser Struktur in Form von

$$\begin{aligned}
\Phi(r,\varphi) = &z_2^2\, f_{2000}\, \mathrm{e}^{i4\varphi} + z_2\bar{z}_2\, f_{1100} + \bar{z}_2^2\, f_{0200}\, \mathrm{e}^{-i4\varphi} + \\
&z_2 z_3\, f_{1010}\, \mathrm{e}^{i5\varphi} + \bar{z}_2 z_3\, f_{0110}\, \mathrm{e}^{i\varphi} + z_2\bar{z}_3\, f_{1001}\, \mathrm{e}^{-i\varphi} + \bar{z}_2\bar{z}_3\, f_{0101}\, \mathrm{e}^{-i5\varphi} + \\
&z_3^2\, f_{0020}\, \mathrm{e}^{i6\varphi} + z_3\bar{z}_3\, f_{0011} + \bar{z}_3^2\, f_{0002}\, \mathrm{e}^{-i6\varphi} + \bar{\Phi}
\end{aligned} \tag{3.82}$$

gerecht zu werden. Jede noch unbekannte Funktion $f_{p_1p_2p_3p_4}$ im Ansatz (3.82) repräsentiert einen entsprechenden Störterm in (3.80). Die Scheibengleichung (3.80) kann nun für jede im Ansatz (3.82) auftretende Funktion separat gelöst werden. Wie bereits besprochen, ist es aus numerischer Sicht von Vorteil, den Operator vierter auf zwei Operatoren

zweiter Ordnung aufzuteilen. Wird nun vom Ansatz (3.82) Gebrauch gemacht, so sind die einzelnen Lösungsfunktionen aus den Differentialgleichungen

$$
\begin{aligned}
{}^1f''_{2000} &= -\frac{1}{r}\,{}^1f'_{2000} + \frac{16}{r^2}\,{}^1f_{2000} + {}^2f_{2000} \\
{}^2f''_{2000} &= -\frac{1}{r}\,{}^2f'_{2000} + \frac{16}{r^2}\,{}^2f_{2000} - F_{2000}
\end{aligned} \tag{3.83a}
$$

$$
\begin{aligned}
{}^1f''_{1010} &= -\frac{1}{r}\,{}^1f'_{1010} + \frac{25}{r^2}\,{}^1f_{1010} + {}^2f_{1010} \\
{}^2f''_{1010} &= -\frac{1}{r}\,{}^2f'_{1010} + \frac{25}{r^2}\,{}^2f_{1010} - F_{1010}
\end{aligned} \tag{3.83b}
$$

$$
\begin{aligned}
{}^1f''_{0110} &= -\frac{1}{r}\,{}^1f'_{0110} + \frac{1}{r^2}\,{}^1f_{0110} + {}^2f_{0110} \\
{}^2f''_{0110} &= -\frac{1}{r}\,{}^2f'_{0110} + \frac{1}{r^2}\,{}^2f_{0110} - F_{0110}
\end{aligned} \tag{3.83c}
$$

$$
\begin{aligned}
{}^1f''_{0020} &= -\frac{1}{r}\,{}^1f'_{0020} + \frac{36}{r^2}\,{}^1f_{0020} + {}^2f_{0020} \\
{}^2f''_{0020} &= -\frac{1}{r}\,{}^2f'_{0020} + \frac{36}{r^2}\,{}^2f_{0020} - F_{0020}
\end{aligned} \tag{3.83d}
$$

$$
\begin{aligned}
{}^1f''_{1100} &= -\frac{1}{r}\,{}^1f'_{1100} + {}^2f_{1100} \\
{}^2f''_{1100} &= -\frac{1}{r}\,{}^2f'_{1100} - F_{1100}
\end{aligned} \tag{3.83e}
$$

$$
\begin{aligned}
{}^1f''_{0011} &= -\frac{1}{r}\,{}^1f'_{0011} + {}^2f_{0011} \\
{}^2f''_{0011} &= -\frac{1}{r}\,{}^2f'_{0011} - F_{0011},
\end{aligned} \tag{3.83f}
$$

zu bestimmen. Jede einzelne Lösung von (3.83) stellt eine additive Komponente der Spannungsfunktion dar und muss daher auch den Randbedingungen des Scheibenproblems genügen.

Tabelle 3.2.: Rand- und Regularitätsbedingungen für die Differentialgleichungen (3.83)

Randbedingungen innen $r = 0$	Randbedingungen außen $r = 1$
• additive Konstante ${}^1f_{p_1,p_2,p_3,p_4} = 0$	• keine Radialkraft (3.35) $m = 0$: ${}^1f'_{p_1,p_2,p_3,p_4} = 0$ $m > 0$: ${}^1f'_{p_1,p_2,p_3,p_4} = 0$ ${}^1f_{p_1,p_2,p_3,p_4} = 0$
• Beschränktheit von ${}^1f_{p_1,p_2,p_3,p_4}$ (Bedingung (3.49)) $m = 0$: ${}^1f'_{p_1,p_2,p_3,p_4} = 0$ $m > 0$: ${}^1f_{p_1,p_2,p_3,p_4} = 0$ ✓	
• Beschränktheit von ${}^2f_{p_1,p_2,p_3,p_4}$ (Bedingung (3.49)) $m = 0$: ${}^2f'_{p_1,p_2,p_3,p_4} = 0$ $m > 0$: ${}^2f_{p_1,p_2,p_3,p_4} = 0$	

Die Lösung des nichtlinearen Scheibenproblems liefert also den Einfluss der transversalen Verschiebung am kritischen Punkt auf die Spannungsfunktion. Der Ansatz in die Plattengleichung eingesetzt, mit der Variation des Ansatzes multipliziert und über die Plattenfläche integriert

$$\int_A \Bigg\{ \Delta^2 w - [\Phi, w] - \left(\beta^2_{\text{krit}} + \lambda_\beta\right) \frac{1+n}{n(2+n)} \left[\Delta w (1 - r^n) - \left(\frac{1}{r} w_{,r} + \frac{1}{r^2} w_{,\varphi\varphi} \right) n r^n \right] + \left(\gamma^4_{\text{krit}} + \lambda_\gamma\right) \left(w - \frac{51 w^\star}{6\sigma} w^2 + \frac{251 w^{\star 2}}{6\sigma^2} w^3 \pm \dots \right) \Bigg\} \delta w \, \mathrm{d}A = 0 \tag{3.84}$$

liefert die gesuchten Verzweigungsgleichungen. In der Auswertung des Ausdrucks (3.84) ist besonders darauf zu achten, alle Terme mit zu berücksichtigen, die entsprechend obiger Überlegung in den Verzweigungsgleichungen (3.76) auftreten. Es ergeben sich die beiden Verzweigungsgleichungen

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{,z_2} = 0 &= z_2 \left(z_2^2 \boldsymbol{a} + z_3^2 \boldsymbol{b} + \lambda_\mu \boldsymbol{c} + \lambda_\beta \boldsymbol{d} + \underline{\gamma^4_{\text{krit}} \boldsymbol{c} + \beta^2_{\text{krit}} \boldsymbol{d} + \boldsymbol{e}} \right) \\ \mathcal{U}_{,z_3} = 0 &= z_3 \left(z_2^2 \boldsymbol{f} + z_3^2 \boldsymbol{g} + \lambda_\mu \boldsymbol{h} + \lambda_\beta \boldsymbol{i} + \underline{\gamma^4_{\text{krit}} \boldsymbol{h} + \beta^2_{\text{krit}} \boldsymbol{i} + \boldsymbol{j}} \right), \end{aligned} \tag{3.85}$$

wobei die unterstrichenen Terme im obigen Ausdruck Null ergeben. Unter Berücksichti-

gung der jeweiligen Koeffizienten ergibt sich für die nichtlineare Analyse des kritischen Punktes

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{,z_2} &= 0 = z_2 \left(z_2^2 + 3,432\ z_3^2 - \lambda\right) \\ \mathcal{U}_{,z_3} &= 0 = z_3 \left(3,432\ z_2^2 + 7,231\ z_3^2 - \mu\right), \end{aligned} \tag{3.86}$$

wenn die Entfaltungsparameter in den neuen Parametern $-\lambda = 0,0273\lambda_\gamma - 0,0207\lambda_\beta$ und $-\mu = 0,0243\lambda_\gamma - 0,0616\lambda_\beta$ zusammengefasst werden. Darüber hinaus steht die über Stabilität entscheidende Hessematrix der Form

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \mathcal{U}_{,z_2z_2} & \mathcal{U}_{,z_2z_3} \\ \mathcal{U}_{,z_2z_3} & \mathcal{U}_{,z_3z_3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3z_2^2 + 3,432z_3^2 - \lambda & 6,864z_2z_3 \\ 6,864z_2z_3 & 3,432z_2^2 + 21,693z_3^2 - \mu \end{bmatrix} \tag{3.87}$$

zu Verfügung. Die beiden linearen Entfaltungsparameter λ und μ messen den Abstand zum kritischen Punkt. Die Existenz der Lösung z_2 bedingt einen positiven Wert von λ, wohingegen der z_3 Mode positives μ voraussetzt. Eine kombinierte Lösung beider kann daher nur im ersten Quadranten der Parameterebene Abb. 3.9(b) auftreten. Die Auswertung der Hessematrix (3.87) für die jeweiligen Lösungen liefert zwei Stabilitätsgrenzen. Abbildung 3.9(b) zeigt, dass die z_2-Lösung für positives λ aber nur bis zu $\mu = 3,432\lambda$ eine stabile Lösung darstellt. Für die reine z_3-Lösung ist die Stabilitätsgrenze $\mu = 2,106\lambda$ von Bedeutung. Eine Kombination beider Lösungen ist nach Auswertung von (3.86) nur zwischen den beiden Stabilitätsgrenzen möglich.

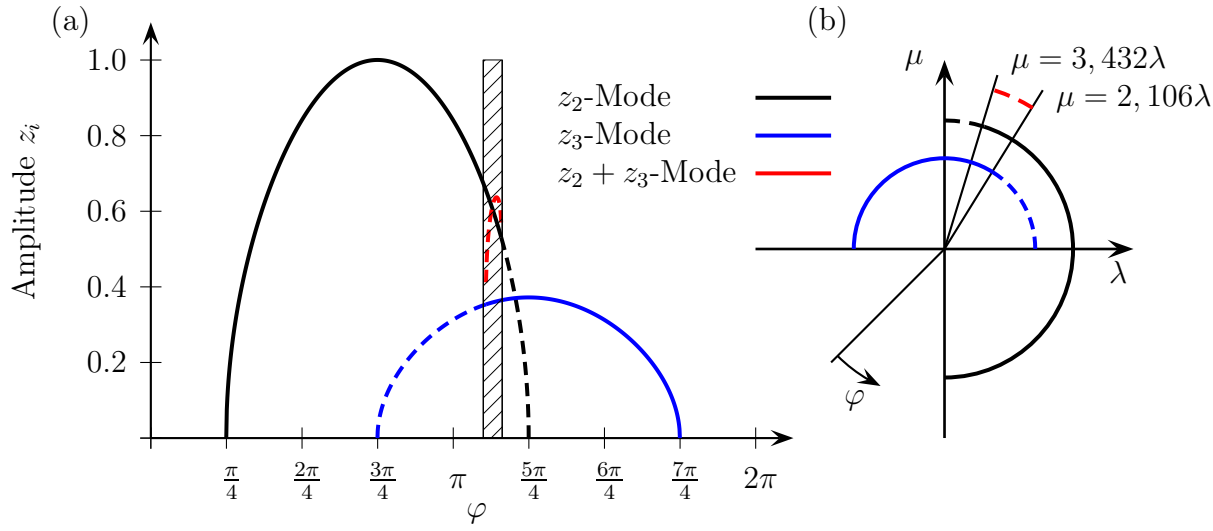


Abbildung 3.9.: Verzweigungsdiagramm (a) für den Pfad in der dimensionslosen Ebene der Entfaltungsparameter am kritischen Punkt (b).

Eine Analyse der Hessematrix zeigt allerdings, dass diese kombinierte Lösung instabil ist. Für den Pfad durch die Parameterebene (Abb. 3.9(b)) ist das entsprechende Ver-

zweigungsdiagramm in Abb. 3.9(a) dargestellt. Beide Einzellösungen verzweigen jeweils subkritisch an der entsprechenden Stabilitätsgrenze. Zwischen diesen beiden Grenzen kann eine kombinierte Lösung auftreten, diese ist allerdings instabil. Welcher Mode an der jeweiligen Stabilitätsgrenze nun tatsächlich auftritt, hängt von den Imperfektionen ab. Da der kombinierte Mode keine stabile Lösung darstellt, braucht der Einfluss der resonanten Terme (Terme 5. Ordnung) nicht weiter berücksichtigt werden.

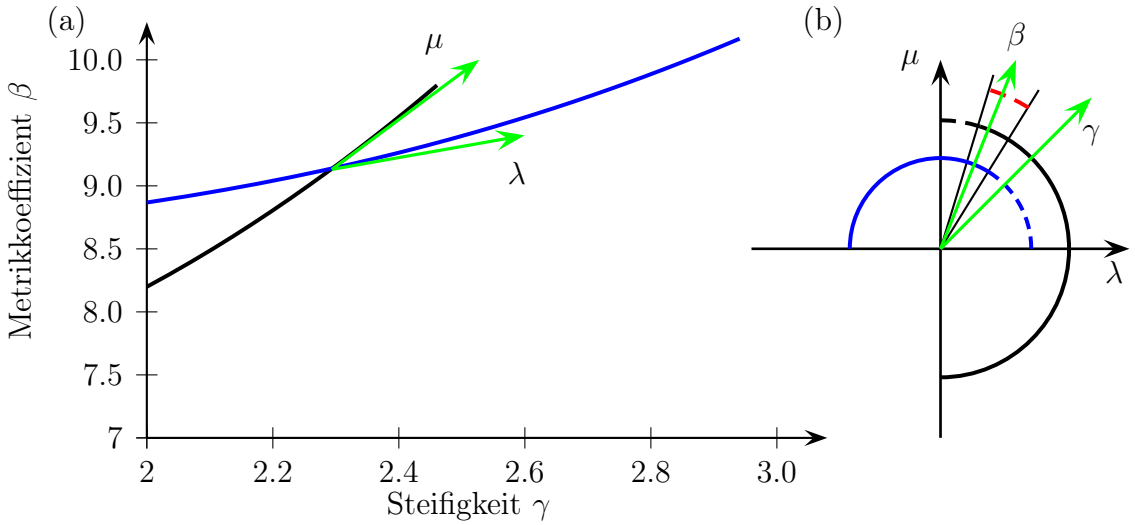


Abbildung 3.10.: Schnittpunkt der beiden Beulmoden, mit Darstellung der mathematischen Entfaltungsparameter am Verzweigungspunkt (a). Ebene der Entfaltungsparameter mit dem Koordinatensystem der physikalischen Parameter (b).

Mit Hilfe der im obigen Text definierten mathematischen Parameter μ und λ ist eine übersichtliche Darstellung der Verzweigungsgleichungen (3.86) gelungen. Unabhängig davon ist das Systemverhalten in Abhängigkeit von den physikalischen Parametern β und γ von Interesse. Abbildung 3.10(b) zeigt in der Ebene der Entfaltungsparameter die Lage des Koordinatensystems der physikalischen Größen. Diese Darstellung erlaubt den sich einstellenden Beulmode bei Veränderung der Steifigkeit der Bettung bzw. der Amplitude des zusätzlichen Metriktermes zu bestimmen. Abbildung 3.10(a) zeigt das Resultat der linearen Analyse in der Ebene der physikalischen Parameter, erweitert um die Lage des Koordinatensystems der mathematischen Parameter. Aufgrund der Entwicklung der nichtlinearen Größen um den Verzweigungspunkt repräsentieren die beiden Achsen der mathematischen Koordinaten Tangenten an die Stabilitätsgrenze der beiden Beulmoden.

4. Simulation des Nachbeulverhaltens und Vergleich der Resultate

Im vorigen Abschnitt wurde die Stabilitätsgrenze für das kontinuumsmechanische Plattenmodell bestimmt. Das Systemverhalten für Parameterwerte, die weit von dieser Grenze entfernt sind, soll mit Hilfe einer numerischen Simulation bestimmt werden. Es soll also das Nachbeulverhalten für die Platte mit nicht-*Euklidischer* Metrik berechnet werden. Bei der Herleitung der Plattengleichungen wurde darauf hingewiesen, dass die Metrik der unverformten Platte der zweidimensionalen Formulierung der ungedehnten Federlänge einer Feder entspricht. Eine Diskussion dieser Äquivalenz ist bei MARDER [40] zu finden. Um dieser Tatsache gerecht zu werden, wird eine Diskretisierung der Platte mit einem Netz vorgenommen, deren Eckpunkte jeweils gleichseitige Dreiecke bilden. Die Seitenkanten dieser Dreiecke sind mit Federn verbunden. Ein derartiges Netz besitzt, so wie eine hexagonale Struktur auch, isotrope mechanische Eigenschaften [31], solange kleine Deformationen betrachtet werden.
Die Federsteifigkeit der einzelnen Federn kann mit der Dehnsteifigkeit der zu modellierenden Platte in Verbindung gebracht werden. Für die Biegesteifigkeit sind zusätzliche Federn zwischen benachbarten Dreiecksflächen zu definieren. In der Arbeit von SEUNG [52] wird gezeigt, wie die Plattendicke und der E-Modul in die Formulierung der Verzerrungsenergie für das Dreiecksnetz eingehen. Mit der Verzerrungsenergie zufolge einer relativen Verschiebung der Eckpunkte zueinander in der Plattenebene

$$U_s = \frac{\sqrt{3}Eh}{4} \sum_{ij} \left(r_{ij} - l_0\right)^2 , \tag{4.1}$$

bzw. jener für eine transversale Verschiebungen der Eckpunkte aus der Plattenebene heraus, ausgedrückt durch die Lage der Flächennormale benachbarter Dreiecksflächen

$$U_b = \frac{Eh^3}{12\sqrt{3}(1-\nu^2)} \sum_{\alpha\beta} (\boldsymbol{n}_\alpha - \boldsymbol{n}_\beta)^2 \,, \tag{4.2}$$

sind die Energieausdrücke für die diskretisierte Platte gewonnen. Diese diskrete Formulierung ist für große Verschiebungen geeignet, und liefert im Grenzübergang zum Kontinuum $l_0 \to 0$ die Verzerrungsenergie der kontinuierlichen Platte [52].

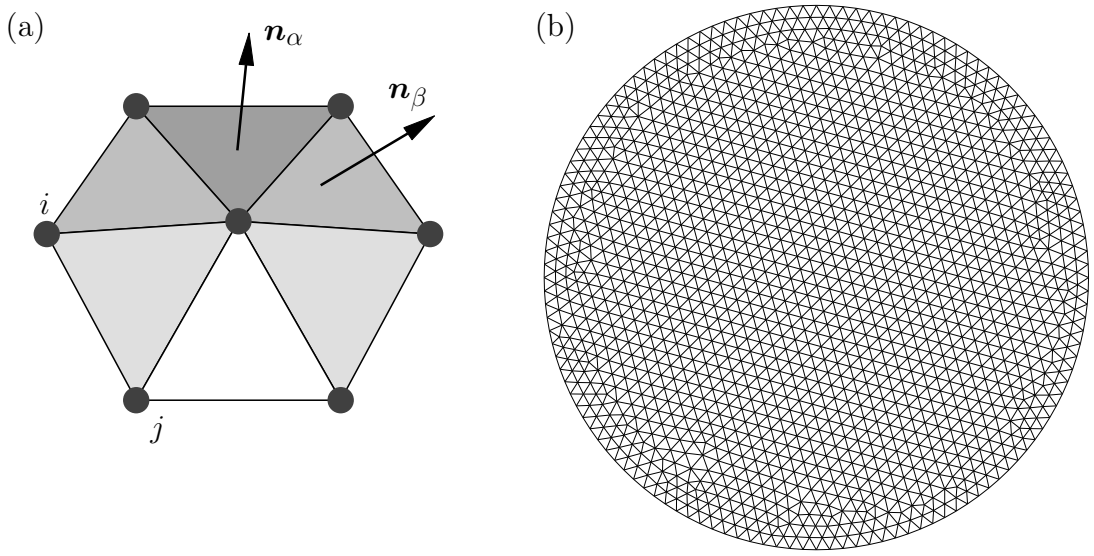


Abbildung 4.1.: Schematische Darstellung der Dreiecksflächen, wobei die entsprechenden Eckpunkte mit Federn verbunden sind, deren Energie mit (4.1) zu bestimmen ist. Die Lage zweier benachbarter Dreiecksflächen zueinander, ausgedrückt durch die Flächennormalen $\boldsymbol{n}_\alpha$ und $\boldsymbol{n}_\beta$, geht in die Verzerrungsenergie (4.2) ein (a). Die diskretisierte Kreisplatte mit einer Teilung des Umfanges in 128 Dreieckskanten (b).

Abbildung 4.1(a) zeigt schematisch die geometrischen Größen, die in den Ausdrücken der Verzerrungsenergien (4.1) und (4.2) auftreten. Das Vernetzen eines Kreises mit gleichseitigen Dreiecken ist nur unter zusätzlicher Verwendung einzelner allgemeiner Dreiecke möglich, und wurde mit EasyMesh [43] verwirklicht. Abbildung 4.1(b) zeigt die für die numerische Simulation verwendete diskretisierte Kreisplatte, mit einer Teilung des Umfanges in 128 Dreieckskanten. Für die Simulation des Nachbeulverhaltens sind die Abmessung der Platte sowie die Biege- und Dehnsteifigkeit jenen von Graphen (vgl. Tab. 2.2) angepasst. Um nun den nicht-*Euklidischen* Charakter in diesem diskreten Mo-

dell zu berücksichtigen, sind die ungedehnten Federlängen aller im Modell vorhandener Federn in Abhängigkeit von der jeweiligen Lage zu verändern. Im kontinuierlichen Modell wurde ein tangentialer zusätzlicher Metrikterm (3.50) berücksichtigt, der vom Radius abhängig ist. Im vorliegenden diskreten Modell entspricht eine veränderte ungedehnte Federlänge

$$l_0 = \hat{l}_0 + \Delta l_0$$

dem zusätzlichen Metrikterm des kontinuierlichen Modells. Der Zusammenhang zwischen der Änderung Δl_0 und der Amplitude des zusätzlichen Metrikterms β (3.50) ist über den Umfang der Kreisplatte im diskreten bzw. im kontinuierlichen Fall (3.9) zu bestimmen.

$$\begin{aligned} U_{\text{diskret}} &= U_{\text{kont}} \\ 128\left(\hat{l}_0 + \Delta l_0(R)\right) &= 2R\pi\sqrt{1+\hat{\epsilon}_{\varphi\varphi}(R)} \\ \rightarrow \Delta l_0(R) &= \frac{2R\pi}{128}\sqrt{1+\beta} - \hat{l}_0 \end{aligned} \tag{4.3}$$

Im obigen Ausdruck für die Veränderung der ungedehnten Federlänge am Rand ist die in Abb. 4.1(b) skizzierte Teilung des Umfanges in 128 Dreieckskanten berücksichtigt. Um nun die Veränderung der ungedehnten Federlänge in Abhängigkeit von der Lage der Feder zu berücksichtigen, ist von der Beziehung

$$\Delta l_0(r,\varphi) = \Delta l_0(R)\left(\frac{r}{R}\right)^n |\sin\varphi| \tag{4.4}$$

Gebrauch zu machen. Die φ-Abhängigkeit gewährleistet einen stetigen Übergang von einer tangential ($\varphi = \pi/2$) angeordneten Feder zu einer radial ($\varphi = 0$) angeordneten. Diese Formulierung ist notwendig, weil bei einer Feder in allgemeiner Lage nur eine Veränderung in tangentialer Richtung vorgenommen werden soll. Der Abstand der Feder vom Mittelpunkt des Kreises, ausgedrückt durch den Radius r in Abb. 4.2, bestimmt die Veränderung der ungedehnten Federlänge entsprechend dem Exponenten n.

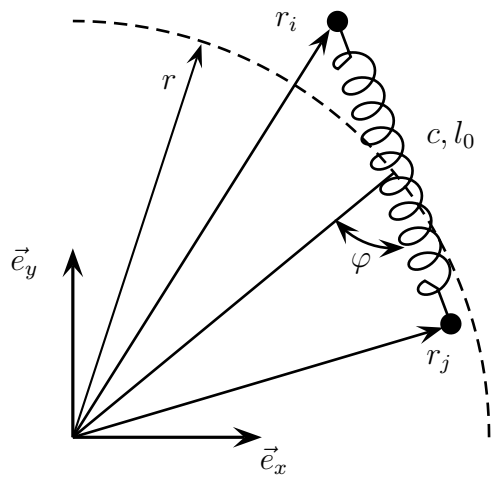


Abbildung 4.2.: Geometrische Zusammenhänge zur Bestimmung der ungedehnten Federlänge gemäß (4.4).

Mit den beiden Beziehungen (4.3) und (4.4) ist es gelungen den im kontinuierlichen Modell verwendeten zusätzlichen Metrikterm in eine diskrete Formulierung überzuführen. Für die Suche nach der ausgebeulten Konfiguration wurde, wie im Kapitel 2, das Molekulardynamikprogramm LAMMPS [46] verwendet.

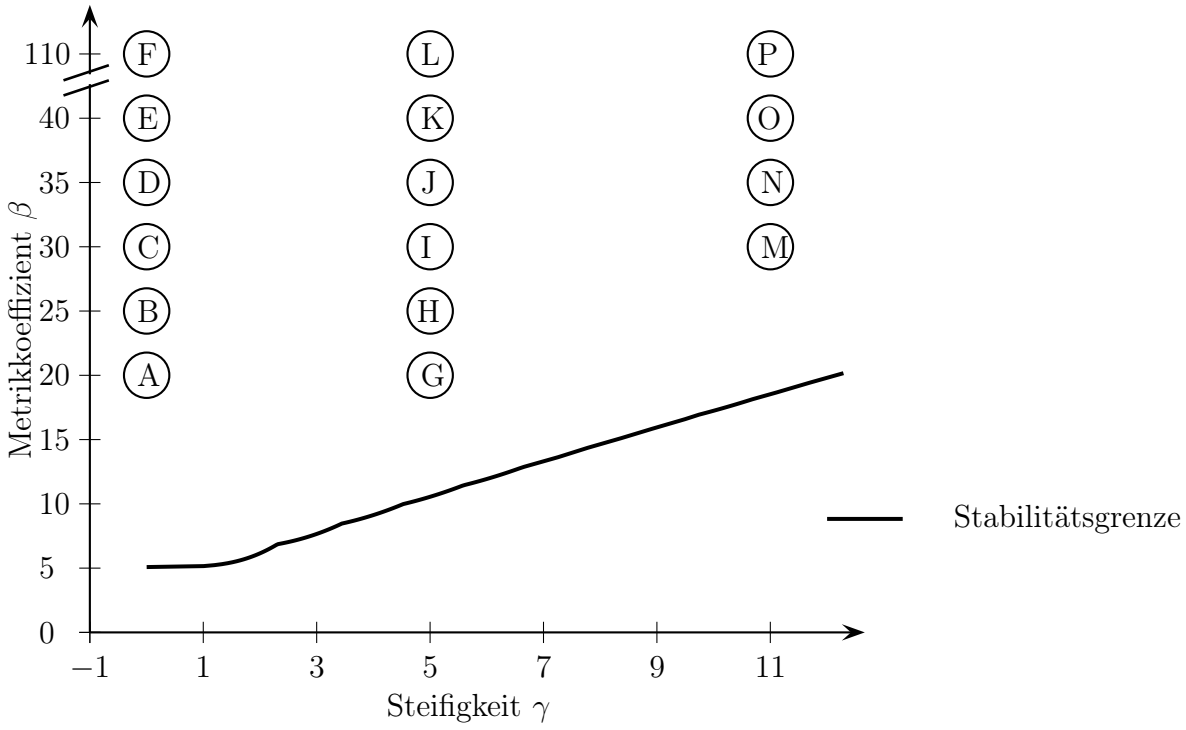


Abbildung 4.3.: Stabilitätsgrenze in der dimensionslosen Parameterebene, mit Kennzeichnung der Bereiche für die Untersuchung des Nachbeulverhaltens.

Die in Abb. 4.1(b) dargestellte diskretisierte Platte besitzt 4794 Freiheitsgrade, die in 4663 Federn der Form (4.1) bzw. 4535 Federn der Form (4.2) zu berücksichtigen sind. Darüber hinaus ist eine Bettung der diskretisierten Platte in Form der *Van der Waals*-Wechselwirkung (C.5) berücksichtigt.
Abbildung 4.3 zeigt die im vorigen Abschnitt bestimmte Stabilitätsgrenze in der dimensionslosen Parameterebene, wobei nur die untere Einhüllende der einzelnen Kurven dargestellt ist. Für die Analyse des Nachbeulverhaltens werden stellvertretend die Punkte Ⓐ bis Ⓟ und die damit verbundenen Parameterwerte berücksichtigt. Die dimensionslose Steifigkeit $\gamma = 11$ repräsentiert die Bettung, modelliert in Form einer *Van der Waals*-Wechselwirkung zwischen zwei Graphenschichten. Diesem Wert entspricht die molekularstatische Simulation des Graphenpatches, vgl. Abb. 2.14(b). Zusätzlich werden Punkte in der Parameterebene mit $\gamma = 5$ bzw. ohne Bettung betrachtet. Für jeden Punkt der Parameterebene wird mit (4.3) die entsprechende Änderung der ungedehnten Federlänge am Rand, bzw. mit (4.4) die Änderung für jede der 4663 Federn in Abhängigkeit von der Lage berechnet.

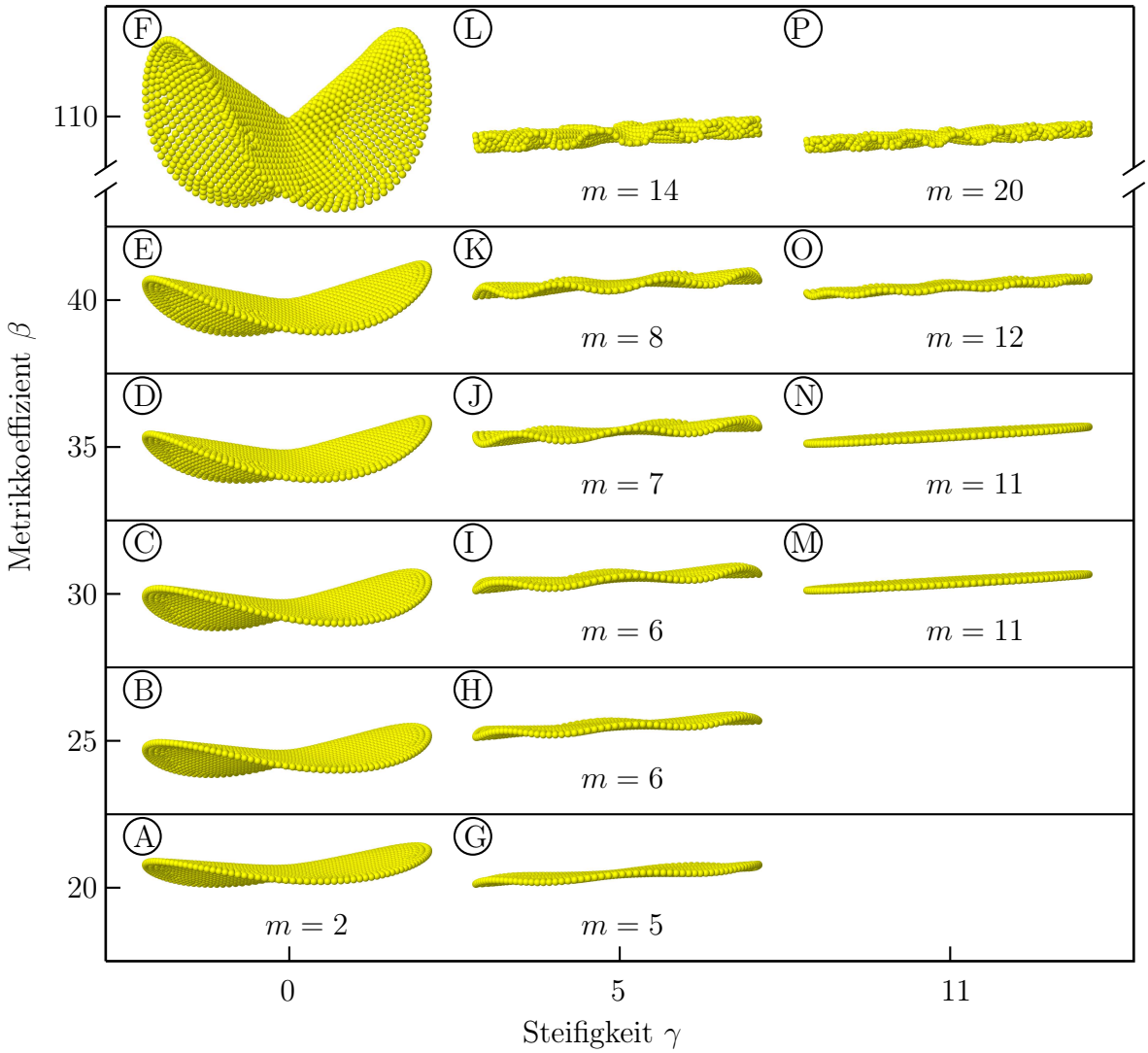


Abbildung 4.4.: Karte mit verschiedenen Nachbeulkonfigurationen, resultierend aus der im Text beschriebenen numerischen Simulation. Die Buchstaben entsprechen der Lage in der Parameterebene Abb. 4.3.

Abbildung 4.4 stellt die Nachbeulkonfigurationen für die in Abb. 4.3 eingezeichneten Punkte zusammen. Im Folgenden wird die Wellenzahl m zur Charakterisierung der Gleichgewichtskonfigurationen benutzt, so wie in der Formulierung des Lösungsansatzes (3.69).

Für jene Punkte, bei der keine Bettung berücksichtigt wurde (Ⓐ bis Ⓕ), stellt sich unabhängig vom Metrikkoeffizienten, also der Änderung der ungedehnten Federlänge, stets ein Mode $m = 2$ ein. Diese ausgebeulte Form erinnert an die Form eines "Pringles"™. Mit größer werdender Belastung wird nur die entsprechende Amplitude der transversalen Verschiebung größer, die qualitative Form bleibt unverändert. Wird eine Bettung

berücksichtigt, bewirkt eine größerer Amplitude des Metrikterms eine höhere Wellenzahl der sich einstellenden Konfiguration. Für Punkte gleicher Metrikkoeffizienten aber unterschiedlicher Steifigkeit der Bettung (beispielsweise Ⓚ und Ⓞ), bewirkt die steifere Bettung eine größere Welligkeit. Für Punkte sehr nahe der Stabilitätsgrenze (diese sind in Abb. 4.3 nicht eingezeichnet) ergeben sich sehr geringe Amplituden, aber die Wellenzahl entspricht jener, die im Zuge der linearen Stabilitätsanalyse bestimmt wurde. Dieses Resultat ist mit der Koexistenz der ausgebeulten und der nicht ausgebeulten Lage an der Stabilitätsgrenze im Einklang.
Abbildung 4.4 stellt das Nachbeulverhalten einer gebetteten Kreisplatte mit nicht-*Euklidischer* Metrik dar, und vervollständigt somit die im vorigen Kapitel diskutierte Stabilitätsanalyse.

4.1. Vergleich der atomistischen mit den kontinuumsmechanischen Ergebnissen

Die mit dem kontinuumsmechanischen Modell erzielten Ergebnisse sollen nun mit den Resultaten der atomistischen Simulation verglichen werden. Dabei ist speziell auf die Wahl des zusätzlichen Metrikterm (3.50) Bezug zu nehmen.
Die Abmessungen sowie die elastischen Eigenschaften der diskretisierten Kreisplatte wurde, wie im vorigen Abschnitt besprochen, an das Graphenpatch angepasst. Im nächsten Schritt ist die Amplitude des zusätzlichen Metrikterms über die Verzerrungsenergie mit dem atomistischen Modell in Verbindung zu bringen. Im kontinuumsmechanischen Modell wird der unverformten Konfiguration der Nullpunkt der Verzerrungsenergie zugeordnet. Um jetzt nur den Einfluss der Kantenenergie zu studieren, ist vom Energieausdruck (2.7) die Energie des Graphenpatches im Grundzustand abzuziehen. Es ist naheliegend, diese mit der Verzerrungsenergie der Scheibe (3.23) gleichzusetzen, und daraus die Amplitude des zusätzlichen Metrikterms zu berechnen.

$$\begin{aligned} E_{\min} - E_{\text{Atom}} N_{\text{Atom}} &= \mathcal{U}_{\text{Scheibe}} \\ 213,57 &= 0,0189202 D R^2 \beta^2 \\ \rightarrow \bar{\beta} &\approx 110 \end{aligned} \tag{4.5}$$

Für die Auswertung obigen Ausdrucks wurde $n = 10$ in (3.50) und die Umrechnung in dimensionslose Parameter (3.66) verwendet. In der dimensionslosen Parameterebene sind Werte von $\bar{\beta} \approx 110$ weit über der berechneten Stabilitätsgrenze. Unabhängig davon

stellt sich nun die Frage, ob die Wahl des Exponenten $n = 10$ für die Beschreibung von Graphen gerechtfertigt war. Mit Hilfe obiger Rechnung (4.5) kann der Einfluss des Exponenten auf die Lage in der Parameterebene studiert werden. Für einen größeren Exponenten des zusätzlichen Metrikterms, bei sonst gleichen Parametern, reduziert sich die Energie der Scheibe, und der Punkt in der Parameterebene wandert zu größeren $\bar{\beta}$ Werten. Für $n = 100$ ergibt sich aus (4.5) ein Wert von $\bar{\beta}_{100} \approx 300$. Im nächsten Schritt ist zu klären, wie sich der veränderte Exponent n auf die lineare Stabilitätsanalyse, also die Stabilitätsgrenze auswirkt. Es zeigt sich, dass mit größer werdendem Exponenten im zusätzlichen Metrikterm (3.50) sowohl die Stabilitätsgrenze, als auch der Punkt, der die atomistische Rechnung charakterisiert, zu größeren Werten $\bar{\beta}$ in der dimensionslosen Parameterebene (Abb. 4.3) verschoben wird.
Die Nachbeulkonfigurationen mit und ohne Berücksichtigung der Bettung sind in Abb. 4.3 dargestellt. Die beiden verformten Kreisplatten (Ⓕ und Ⓟ) sind mit den Resultaten der molekularstatischen Simulation Abb. 2.14 zu vergleichen. Es sind zwei markante Unterschiede zu erkennen. Einerseits stellt sich für die Platte ohne der Berücksichtigung einer Bettung Ⓕ ein Mode $m = 2$ ein, was im Widerspruch zu der in Abb. 2.14(a) dargestellten Konfiguration steht. Andererseits bewirkt der Einfluss der Bettung eine Wellenzahl $m = 20$ Ⓟ, die allerdings niedriger ist als jene aus der vergleichbaren atomistischen Simulation Abb. 2.14(b). Darüber hinaus ist beim *Graphene-sheet* die Welligkeit sehr stark am Rand konzentriert, wohingegen im kontinuierlichen Modell auch Bereiche im Inneren der Platte von der transversalen Verschiebung betroffen sind. Der Grund dafür ist die kontinuierliche Formulierung des zusätzlichen Metrikterms (3.50), unabhängig von der Größe des Exponenten n.
Um zu zeigen, dass eine ausschließlich am Rand veränderte Metrik den Eigenschaften von Graphen am nächsten kommt, wurden in einem weiteren Simulationslauf nur die ungedehnten Federn am Rand der in Abb. 4.1(b) dargestellten Platte vergrößert. Die damit erzeugte starke Netzabhängigkeit des Modells wurde nicht weiter analysiert. Um den Zusammenhang mit der atomistischen Modellierung zu schaffen, ist die Abhängigkeit der Verzerrungsenergie von der ungedehnten Federlänge am Rand zu bestimmen.

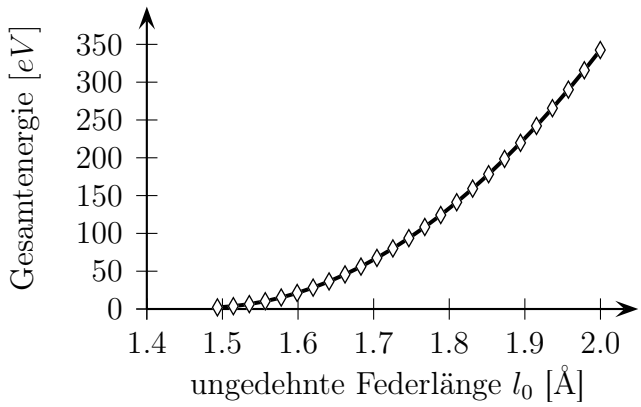


Abbildung 4.5.: Verzerrungsenergie für die in Abb. 4.1(b) dargestellte Kreisplatte in Abhängigkeit von der ungedehnten Federlänge am Rand.

Abbildung 4.5 stellt die Verzerrungsenergie der diskretisierten Kreisplatte, berechnet mit LAMMPS [46], in Abhängigkeit von der ungedehnten Federlänge am Rand dar. Für $l_0 = 1.88$Å, der ursprüngliche Wert liegt bei $\hat{l_0} = 1,472$Å, ergibt sich eine Energie, die dem Ergebnis der atomistischen Rechnung $E_{\min} - E_{\text{Atom}} N_{\text{Atom}} = 213,57eV$ entspricht (vgl. (4.5)). Für die in Abb. 4.1(b) dargestellte Kreisplatte ist also eine ungedehnte Federlänge am Rand $l_0 = 1,88$Å vorzuschreiben, um dem im Kapitel 2.2 behandelte *Graphenesheet*, in Bezug auf die Kantenenergie, gerecht zu werden.
Im Gegensatz zum kontinuierlichen bzw. zum, mit gleichseitigen Dreiecken, diskretisierten Modell, ist der Umfang des Graphenpatches anisotrop aufgrund der Aneinanderreihung von *armchair*- und *zigzag*-Abschnitten. Die Abfolge von Bereichen unterschiedlicher Kantenenergien (vgl. Tab. 2.1) und die aufgrund der geometrischen Form der Kante offensichtlichen Anisotropie der mechanischen Eigenschaften, wirken sich zusätzlich auf die auftretende Form der transversalen Verschiebung am Rand aus. Die Isotropie einer hexagonalen Struktur ist nicht für einen beliebig konstruierten Randbereich gültig. Um das zu untermauern, wurden einzelne Punkte am Umfang des mit Dreiecken vernetzten Kreises entfernt.

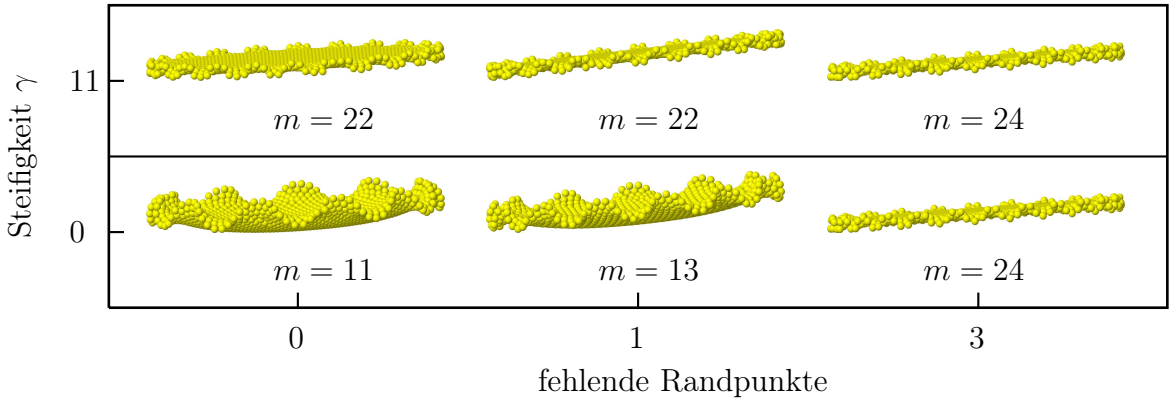


Abbildung 4.6.: Karte mit Nachbeulkonfigurationen der diskretisierten Kreisplatte (Abb 4.1(b)), resultierend aus der Veränderung der ungedehnten Federlänge am Rand ($l_0 = 1,88$Å).

Abbildung 4.6 zeigt überkritische Gleichgewichtslagen in Abhängigkeit von der Anzahl der fehlenden Atome am Umfang und der Bettungssteifigkeit, die für das Graphenpatch von Interesse sind. Ein Vergleich dieser Resultate mit jenen aus Abb. 2.14 zeigt, dass eine Vergrößerung der ungedehnten Federlänge am Rand der diskretisierten Kreisplatte zu Verformungen ähnlich denen des Graphenpatches führen. Die transversalen Verschiebungen sind stark am Rand konzentriert und klingen in Richtung Plattenmittelpunkt rasch ab. Darüber hinaus hat das Entfernen von Punkten am Rand und die damit erzeugte Anisotropie der Kante einen untergeordneten Einfluss auf das Systemverhalten, wenn eine Bettung berücksichtigt wird. Die Bettung bewirkt eine Verringerung der Amplitude und eine Erhöhung der Wellenzahl der sich einstellenden Verformung. Ohne Bettung ist der Einfluss der fehlenden Randpunkte signifikant und bewirkt einer höhere Welligkeit bei geringerer Amplitude.

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit ist aus der Idee heraus entstanden, ein speziell bei Graphen auftretendes Phänomen mit kontinuumsmechanischen Konzepten zu untersuchen.
Im ersten Teil steht die Modellierung von Graphen mit Hilfe klassischer Vielteilchenpotentiale im Vordergrund. Mit dieser Formulierung ist es gelungen Kantenenergie bzw. -spannung zu berechnen, die dem Vorzeichen und der Größenordnung nach mit Resultaten quantenmechanischer Rechnungen vergleichbar sind. Es konnte die Auswirkung dieser am Rand lokalisierten Spannung auf ein kreisförmiges Graphenpatch untersucht werden. Das molekularmechanische Modell lieferte eine wellige transversale Verschiebung, deren Wellenzahl vom Vorhandensein eines Substrates maßgeblich beeinflusst wird.
Der zweite Teil dieser Arbeit ist der kontinuumsmechanischen Analyse gewidmet. Um das Verhalten von Graphen als Stabilitätsproblem formulieren zu können, wurden die Plattengleichungen für eine Kreisplatte mit nicht-*Euklidischer* Metrik hergeleitet. Mit einem passend formulierten zusätzlichen Metrikterm, kann das Verhalten der Kante eines Graphenpatches nachempfunden werden. Die Abschätzung der entsprechenden Energienausdrücke einerseits, und die numerischer Lösung des Randwertproblems andererseits, liefert die Stabilitätsgrenze in der dimensionslosen Parameterebene. Es ist hervorzuheben, dass die Platte keiner äußeren Belastung unterworfen wird, sondern lediglich durch einen Eigenverzerrungszustand belastet wird. Mit größer werdender Steifigkeit der Bettung, ist ein größerer zusätzlicher Metrikterm notwendig, um das System an die Stabilitätsgrenze zu bringen. Darüber hinaus stellt sich beim Versagensmode eine größere Wellenzahl ein. Am Schnittpunkt zweier Versagenmoden mit unterschiedlichen Wellenzahlen wurde eine nichtlineare Analyse durgeführt, um die Modeinteraktion zu studieren. Es hat sich gezeigt, dass der kombinierte Mode instabil ist, wodurch die resonanten Terme fünfter Ordnung nicht berücksichtigt werden müssen. Beim Vergleich der Resultate beider Rechenmodelle fällt auf, dass die beim Graphen ermittelte Kantenenergie einem Bereich in der Parameterebene entspricht, der sich weit über der berechneten Stabilitätsgrenze befindet.
Aus diesem Grund wurde im letzten Abschnitt das Nachbeulverhalten anhand eines diskreten Modells diskutiert. Die Veränderung der ungedehnten Federlänge ausschließlich am Rand führt zu Ergebnissen, die sehr gut mit jenen aus der molekularmechanischen Analyse in Einklang zu bringen sind. Im Gegensatz dazu bewirkt eine Veränderung aller Federn in Abhängigkeit von ihrer Lage entsprechend dem kontinuierlichen zusätzlichen Metrikterm Verformungen mit zu geringer Wellenzahl. Neben der Bettung beeinflusst auch eine anisotrope Kantengeometrie die Form der Platte nach dem Stabilitätsverlust.

A. Notwendige Begriffe der Tensorrechnung

Dieses Kapitel stellt die für die Herleitung der FvK-Plattengleichungen notwendig Begriffe aus der Tensorrechnung zusammen, die beispielsweise bei FUNG [17] oder KLINGBEIL[29] zu finden sind.
Ein Vektor kann durch seine kovarianten Komponenten in Richtung der kontravarianten Basisvektoren

$$\vec{v} = v_k \; g^k \tag{A.1}$$

dargestellt werden. Darüber hinaus stellen sich die kovariante partiellen Ableitungen auf kontravarianter Basis entsprechend dem Zusammenhang

$$\vec{v}_{,i} = v_k|_i \; g^k \tag{A.2}$$

dar. Die *Christoffel*-Symbole zweiter Art bestimmen sich aus den Metriktensoren nach der Vorschrift

$$\Gamma^i_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} g^{i\sigma} \left(\frac{\partial g_{\alpha\beta}}{\partial x^\sigma} + \frac{\partial g_{\alpha\sigma}}{\partial x^\beta} - \frac{\partial g_{\alpha\beta}}{\partial x^\sigma} \right). \tag{A.3}$$

Die kovariante Ableitung eines Tensors der Stufe $p+q$, kontravariant der Stufe p und kovariant der Stufe q, berechnet sich unter Zuhilfenahme der *Christoffel*-Symbole (A.3) gemäß

$$T^{\alpha_1 \ldots \alpha_p}_{\beta_1 \ldots \beta_q}\Big|_\gamma = \frac{\partial T^{\alpha_1 \ldots \alpha_p}_{\beta_1 \ldots \beta_q}}{\partial \gamma} + \Gamma^{\alpha_1}_{\sigma\gamma} \, T^{\sigma \ldots \alpha_p}_{\beta_1 \ldots \beta_q} \cdots + \Gamma^{\alpha_p}_{\sigma\gamma} \, T^{\alpha_1 \ldots \sigma}_{\beta_1 \ldots \beta_q} - \Gamma^{\sigma}_{\beta_1\gamma} \, T^{\alpha_1 \ldots \alpha_p}_{\sigma \ldots \beta_q} \cdots - \Gamma^{\sigma}_{\beta_q\gamma} \, T^{\alpha_1 \ldots \alpha_p}_{\beta_1 \ldots \sigma}. \tag{A.4}$$

Die Allgemeinheit der mit der Tensorrechnung erzielten Ergebnisse macht es notwendig auftretende Ausdrücke mit den Metriktensoren in physikalische Größen umzurechnen. Für die Komponenten des Verzerrungstensors können mit

$$\epsilon_{ij} = \sqrt{g^{ii} g^{jj}} \; e_{ij} \tag{A.5}$$

die physikalischen Anteile berechnet werden.

B. Nichtlineare Stabilitätsuntersuchung eines gebetteten Stabes

Dieses Kapitel soll die Vorgehensweise bei der Untersuchung eines Schnittpunktes zweier Stabilitätsgrenzen anhand eines einfachen Beispiels demonstrieren. Das hier behandelte Beispiel stellt den einfachsten Fall eines kontinuierlichen Systems dar, bei dem zwei verschiedene Beulmoden bei entsprechender Wahl der Parameter gleichzeitig auftreten können.

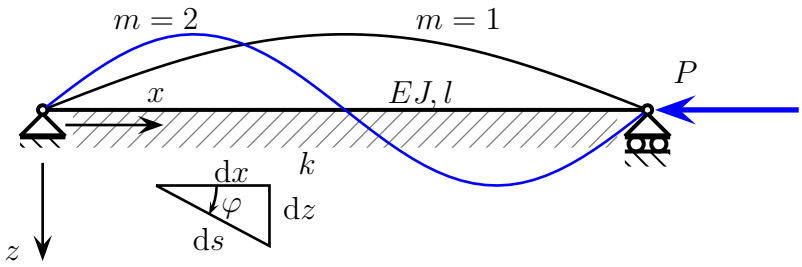


Abbildung B.1.: Gelenkig gelagerter Stab auf einer linearen Bettung, mit den beiden ersten Beulmoden.

Die lineare Stabilitätsanalyse eines elastisch gebetteten Balkens Abb. B.1 ist bei RAMMERSTORFER [48] zu finden. Für eine geometrisch nichtlineare Formulierung der Systemgleichungen ist der Zusammenhang zwischen den Verschiebungen und der Winkellage eines infinitesimalen Balkenstücks der Länge ds gemäß

$$z' = \sin\varphi \qquad\qquad x' = \cos\varphi$$

mit $a' = \frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}s}$ zu berücksichtigen. Die Gesamtenergie setzt sich aus der Verzerrungsenergie zufolge der Biegung, dem Potential der richtungstreuen Kraft und der Energie der

linearen Bettung zusammen. Mit der Biegesteifigkeit EJ und der Länge l des Balkens, sowie der Steifigkeit der linearen Bettung k ergibt sich

$$V = \frac{EJ}{2}\int_0^l \varphi'(s)^2 \mathrm{d}s + Pu(l) + \frac{k}{2}\int_0^l w(s)^2 \mathrm{d}s \tag{B.1}$$

als Ausdruck für die Gesamtenergie. Im Ausdruck der Energie (B.1) tritt $\varphi(s)$ als Winkel zwischen einem verformten Balkenstück und der $x-$Achse, $u(l)$ als die Verschiebung des Kraftangriffspunktes in $x-$Richtung und $w(s)$ als die Verschiebung eines Balkenstückes in $z-$Richtung auf. Diese unterschiedlichen Größen, die die Verformung des Balkens beschreiben, können mit Hilfe von

$$\varphi'(s) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\arcsin z' = \frac{w''}{\sqrt{1-w'^2}}$$
$$u(l) = \int_0^l (\cos\varphi - 1)\mathrm{d}s = \int_0^l (\sqrt{1-w'^2} - 1)\mathrm{d}s$$

durch die transversale Verschiebung ausgedrückt werden. Für die Gesamtenergie erhält man somit

$$V = \frac{EJ}{2}\int_0^l \frac{w''^2}{1-w'^2}\mathrm{d}s + P\int_0^l \left(\sqrt{1-w'^2} - 1\right)\mathrm{d}s + \frac{k}{2}\int_0^l w^2 \mathrm{d}s,$$

bzw. nach einer Taylorreihenentwicklung der nichtlinearen Terme um die triviale Lage $w_0 = 0$

$$V(w(s)) = \frac{1}{2}\int_0^l \left\{ EJ\left[\overline{w''^2}\left(1 + \widetilde{w'^2} + w'^4 + ...\right)\right] - P\left(\overline{w'^2} + \frac{\widetilde{w'^4}}{4} + \frac{w'^6}{8} + ...\right) + k\overline{w^2}\right\}\mathrm{d}s. \tag{B.2}$$

Werden Terme bis zur Ordnung 2 ($\overline{a}$) im Potential berücksichtigt, und dimensionslose Abkürzungen [48]

$$\alpha^2 = \frac{Pl^2}{EJ} \qquad (\pi\gamma)^4 = \frac{kl^4}{EJ} \qquad s = x = \bar{x}l \qquad \mathrm{d}s = \mathrm{d}x = l\mathrm{d}\bar{x} \tag{B.3}$$

verwendet, so kann mit $\delta V = 0$ die lineare Differentialgleichung

$${}^{\mathrm{l}}\mathcal{D}(w) = w^{(4)} + \alpha^2 w'' + (\pi\gamma)^4 w = 0 \tag{B.4}$$

hergeleitet werden. Einbeziehung der Terme mit nächst höherer Ordnung ($\widetilde{a}$) im Poten-

tial (B.2) liefert die nichtlineare Differentialgleichung

$$^{\mathrm{nl}}\mathcal{D}(w) = w^{(4)}\left(1+\underline{w'^2}\right) + \underline{4w'w''w'''} + \underline{w''^3} + \alpha^2 w'' + (\pi\gamma)^4 w = 0. \tag{B.5}$$

Die unterstrichenen Terme in der nichtlinearen Differentialgleichung (B.5) stellen den Unterschied zur linearen DGL (B.4) dar.
Die an die kinematischen Randbedingungen ($w(0) = w(1) = 0$) angepasste Lösung der linearen Differentialgleichung (B.4)

$$w = \mathcal{C}\sin(m\pi x) \quad m \in \mathbb{N}$$

führt, unter der Voraussetzung der Existenz einer nichttrivialen Lösung, auf die Knickbedingung

$$\frac{P^{\mathrm{krit.}}}{\sqrt{kEJ}} = \left[\left(\frac{m}{\gamma}\right)^2 + \left(\frac{\gamma}{m}\right)^2\right]. \tag{B.6}$$

Der funktionale Zusammenhang B.6 zwischen der kritischen Last und der Steifigkeit der Bettung ist für verschiedene Wellenzahlen m in Abbildung B.2 dargestellt.

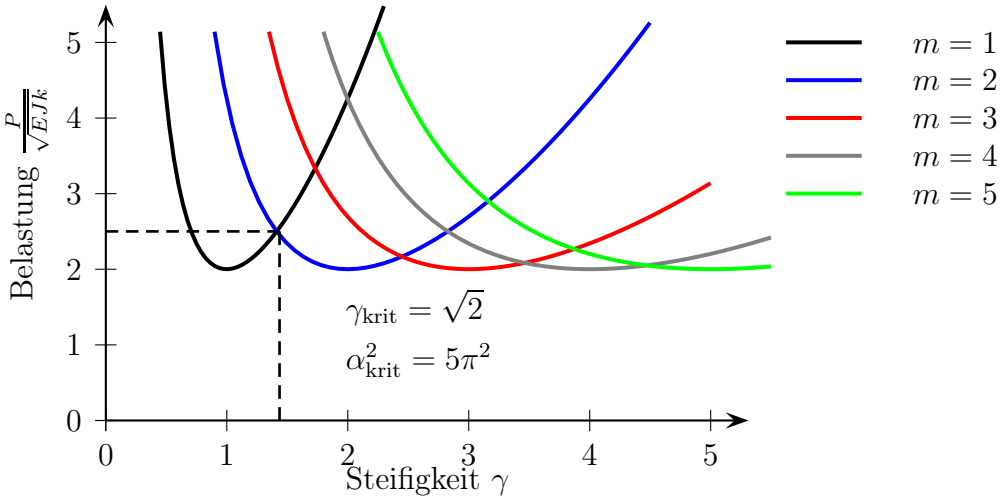


Abbildung B.2.: Stabilitätsgrenze in der dimensionslosen Parameterebene.

Die Einhüllende dieser Kurven stellt die Stabilitätsgrenze in der Parameterebene dar. Abbildung B.2 zeigt, dass sich Kurven verschiedener Wellenzahlen schneiden. Anhand des Schnittpunktes zwischen dem Mode $m = 1$ und dem Mode $m = 2$ soll die Vorgehensweise einer nichtlinearen Analyse gezeigt werden. Diese beiden Moden sind in Abb. B.1 graphisch dargestellt. Am kritischen Punkt ($\gamma_{\mathrm{krit}} = \sqrt{2}$, $\alpha^2_{\mathrm{krit}} = 5\pi^2$) sind die beiden Mo-

den Lösungen des linearen Beulproblems. Für die nichtlineare Analyse wird die Summe beider Moden

$$w = x_1 \sin \pi x + x_2 \sin 2\pi x, \tag{B.7}$$

als Ansatz verwendet, um die Verzweigungsgleichungen herzuleiten. Der Ansatz (B.7) in die Verzerrungsenergie (B.2) eingesetzt liefert unter Verwendung der dimensionslosen Größen (B.3)

$$\begin{aligned} V &= \int_0^1 \left[\frac{1}{2} w''^2 \left(1 + w'^2\right) - \left(\alpha_{\text{krit}}^2 + \lambda_p\right) w'^2 + \frac{1}{2} \left((\pi\gamma_{\text{krit}})^4 + \lambda_k\right) w^2 \right] \mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{16} \left[\pi^6 \left(x_1^4 + 40 x_1^2 x_2^2 + 64 x_2^4\right) - 4\pi^2 \left(x_1^2 + 4x_2^2\right) \lambda_p + 4 \left(x_1^2 + x_2^2\right) \lambda_k \right] \\ &= \frac{1}{16} \left[\pi^6 \left(x_1^4 + 40 x_1^2 x_2^2 + 64 x_2^4\right) - x_1^2 \lambda - x_2^2 \mu \right]. \end{aligned}$$

Die beiden Entfaltungsparameter λ_p und λ_k messen den Abstand zum kritischen Punkt in der dimensionslosen Parameterebene. Mit Hilfe neuer Parameter $-\lambda = 4\lambda_k - 4\pi^2\lambda_p$ bzw. $-\mu = 4\lambda_k - 16\pi^2\lambda_p$, kann eine übersichtliche Darstellung erzielt werden. Um einen stationären Wert des Potentials zu finden, ist das Gleichungssystem

$$V_{,x_1} = 0 = x_1 \left[\pi^6 \left(2x_1^2 + 40 x_2^2\right) - \lambda \right] \tag{B.8a}$$

$$V_{,x_2} = 0 = x_2 \left[\pi^6 \left(128 x_2^2 + 40 x_1^2\right) - \mu \right] \tag{B.8b}$$

für x_{10} und x_{20} zu lösen. Die Vorgehensweise mit dem Energiefunktional entspricht dem *Ritz'schen*-Verfahren [44], wobei im vorliegenden Fall ein spezieller Ansatz für die Lösungsfunktion, die Lösung des linearen Problems, verwendet wird. Eine zweite Möglichkeit der Bestimmung der Verzweigungsgleichungen für den kritischen Punkt ist das Verfahren von *Galerkin* [44], bei dem der Ansatz (B.7) direkt in die nichtlineare Differentialgleichung (B.5) eingesetzt, mit der Variation des Ansatzes multipliziert und über den Definitionsbereich

$$\int_0^1 {}^{\text{nl}}\mathcal{D}(w) \delta w \, \mathrm{d}x = 0$$

integriert wird. Die Auswertung des obigen Ausdruckes führt auf dieselben beiden Bestimmungsgleichungen (B.8), die schon durch Anwendung des Verfahren von *Ritz* gewonnen wurden. Für das im Haupttext behandelte Problem ist das Verfahren nach *Galerkin* der effektivere Weg, die entsprechenden Koeffizienten der Verzweigungsgleichungen zu berechnen.

Von den mit (B.8) bestimmten Gleichgewichtslagen sind nur jene stabil, die die positive

Definitheit der Hessematrix

$$H = \begin{bmatrix} V_{,x_1x_1} & V_{,x_1x_2} \\ V_{,x_1x_2} & V_{,x_2x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \pi^6(6x_1^2 + 40x_2^2) - \lambda & \pi^6 80 x_1 x_2 \\ \pi^6 80 x_1 x_2 & \pi^6(40x_1^2 + 384x_2^2) - \mu \end{bmatrix} \tag{B.9}$$

garantieren. Die Lösung $x_1 \neq 0$ bzw. $x_2 = 0$ kann nur für positive Werte von λ, und die Lösung $x_2 \neq 0$ bzw. $x_1 = 0$ kann nur für positive Werte von μ existieren. Eine kombinierte Lösung $x_1 \neq 0$ und $x_2 \neq 0$ kann somit nur im ersten Quadranten, genauer zwischen den beiden Geraden $\mu = 20\lambda$ und $\mu = 3,2\lambda$ der Parameterebene auftreten.

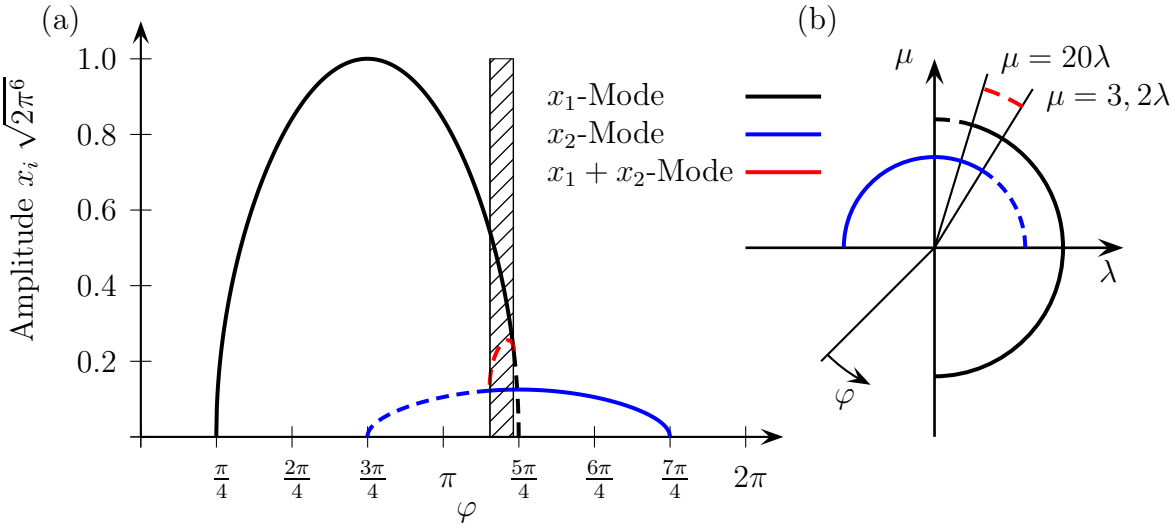


Abbildung B.3.: Verzweigungsdiagramm (a) für den Pfad in der dimensionslosen Ebene der Entfaltungsparameter am kritischen Punkt (b).

Wertet man nun die Hessematrix (B.9) für diese drei Fälle aus, so ergeben sich zwei Stabilitätsgrenzen in der Parameterebene, die in Abb. B.3(b) eingezeichnet sind. Die Stabilitätsanalyse zeigt, dass eine Linearkombination der beiden Beulmoden nicht als stabile Lösung auftreten kann. Die beiden Lösungen verzweigen jeweils subkritisch an den entsprechende Stabilitätsgrenzen. In Abb. B.3(a) ist das Verzweigungsdiagramm für den in Abb. B.3(b) eingezeichneten Pfad dargestellt, wobei die Amplituden auf den x_1-Mode skaliert sind. Die stabilen Bereiche beider Beulmoden überschneiden sich in einem schmalen Streifen. In diesem Bereich sind beide primäre Lösungen getrennt voneinander stabil, der kombinierte Mode ist instabil. Welcher Mode in diesem Bereich auftritt, hängt von den Imperfektionen sowie vom Belastungspfad ab.

C. Empirische Kraftfeldpotentiale

Das im Zuge der molekularstatischen Simulation (Kapitel 2) verwendete REBO-Potential (**R***eactive* **E***mpirical* **B***ond* **O***rder*), bzw. die erweiterte Form des AIREBO-Potentials (**A***daptive* **I***ntermolecular* **R***eactive* **E***mpirical* **B***ond* **O***rder*), soll in diesem Anhang kurz dargestellt werden. Ziel ist es speziell für reine Kohlenstoffverbindungen die entsprechenden Anteile des Potentials darzustellen. Beide Potentiale eignen sich für die Simulation von Kohlenwasserstoffe, und somit auch für *Graphene* und *Carbon Nanotubes*.
Im Folgenden werden nur die wichtigsten Terme angegeben und kurz charakterisiert. Für eine detaillierte Darstellung sei auf die Arbeiten [9, 10, 57] verwiesen.

Das AIREBO-Potential

Das AIREBO-Potential setzt sich formal aus drei verschiedenen Anteilen zusammen.

$$E^{\mathrm{AIREBO}} = \frac{1}{2}\sum_{i}\sum_{j\neq i}\left[E^{\mathrm{REBO}} + \sum_{k\neq i,j}\sum_{l\neq i,j,k} E^{\mathrm{tors}}_{kijl} + E^{\mathrm{LJ}}_{ij}\right] \tag{C.1}$$

Der erste Term repräsentiert das REBO-Potential [9], das den zentralen Zusammenhang zwischen Energie und Abstand der Bindungspartner darstellt. Eine Weiterentwicklung stellt die Erweiterung um einen Torsionsterm und einer nicht gebundenen Wechselwirkung dar.

Das REBO-Potential

Dieses Potential wird nach einem seiner Entwickler auch als *Brenner*-Potential bezeichnet. Es besteht aus zwei Anteilen

$$E^{\mathrm{REBO}} = E^{R}_{ij} + b_{ij}E^{A}_{ij}, \tag{C.2a}$$

einem abstoßenden (*repulsive*)

$$E_{ij}^{R} = w_{ij}(r_{ij}) \left[1 + \frac{Q_{ij}}{r_{ij}}\right] A_{ij} e^{-\alpha_{ij} r_{ij}} \tag{C.2b}$$

sowie einem anziehenden Anteil (*attractive*)

$$E_{ij}^{A} = -w_{ij}(r_{ij}) \sum_{n=1}^{3} B_{ij}^{(n)} e^{-\beta_{ij}^{(n)} r_{ij}}. \tag{C.2c}$$

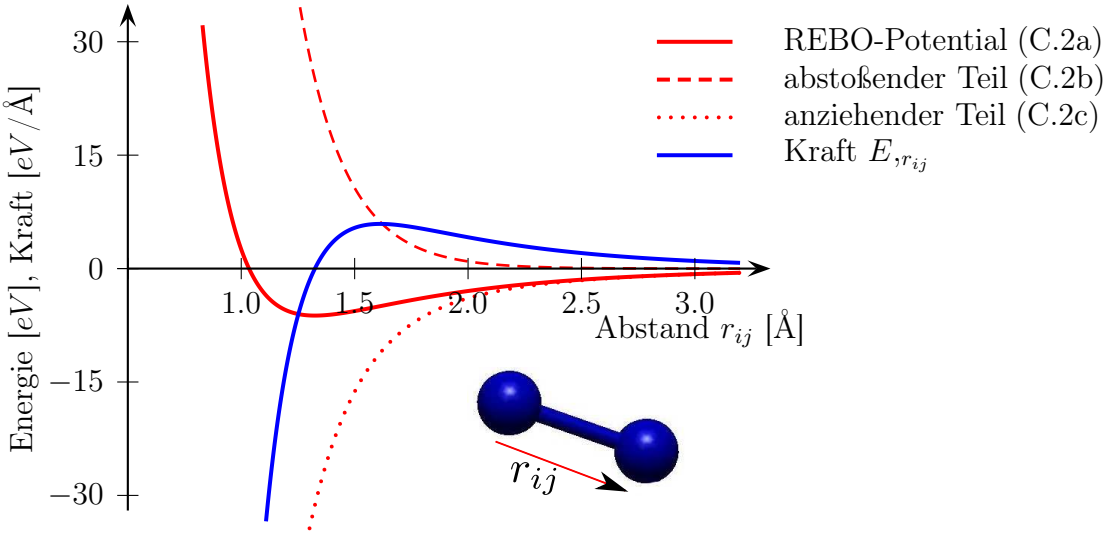


Abbildung C.1.: Das REBO-Potential und die entsprechende Kraft als Funktion des Atomabstandes für $b_{ij} = 1$.

Abbildung C.1 stellt das Potential (C.2) und die daraus resultierende Kraft in Abhängigkeit von dem Atomabstand dar. Der Bindungsordnungsterm b_{ij} ist eine für dieses Potential charakteristische Größe. Dieser Koeffizient beeinflusst die Stärke der Bindung in Abhängigkeit von der Anzahl der nächsten Nachbarn (Koordinationszahl), der Winkellage benachbarter Bindungen und der Konjugation chemischer Orbitale. Mit anderen Worten wird die Stärke der Bindung in Abhängigkeit von der Umgebung beider Bindungspartner mit diesem Term verändert.
Im Namen beider Potentiale wird diese Eigenschaft mit den Worten *Bond Order* berücksichtigt. Wie alle diese Einflüsse mathematisch in der Formulierung des Bindungsordnungsterm verwirklicht sind, ist dem Anhang der Arbeit [57] zu entnehmen.
Der Grund für die Bezeichnung des Potentials als *Reactive* ist im Gewichtungsfaktor

$w_{ij}(r_{ij})$, der die Kraft zwischen den jeweiligen Bindungspartnern skaliert, zu suchen.

$$w(r) = \begin{cases} 1 & r < r_{\min} \\ \frac{1}{2}\left[1 + \cos\left(\pi \frac{r - r_{\min}}{r_{\max} - r_{\min}}\right)\right] & r_{\max} \geq r \geq r_{\min} \\ 0 & r > r_{\max} \end{cases} \tag{C.3}$$

Beispielsweise kann die Notwendigkeit bestehen, ursprünglich nicht miteinander verbundener Atome während der Simulation zu verbinden. Unterschreitet der Abstand zwischen den beiden Atome einen Grenzwert $r_{\min}$, wird eine neue Bindung im Gesamtpotential berücksichtigt. Umgekehrt ist bei entsprechend großem Abstand zwischen den Bindungspartnern die ursprünglich bestehende Bindung als gebrochen zu betrachten. Diese Schaltfunktion (C.3) garantiert somit einen stetigen Übergang zwischen gebundenen und nicht gebundenen Zustand zweier Bindungspartner. Vereinfacht dargestellt bringt dieser Term einen quantenmechanischen Aspekt in das empirische Kraftfeld, und ermöglicht die Veränderung der Bindungsstruktur während der Simulation. Diese Eigenschaft des Potentials während der Simulation Bindungen zu erzeugen bzw. zu zerstören kommt in der Bezeichnung *Reactive* zum Ausdruck.
Das AIREBO-Potential stellt eine Weiterentwicklung des REBO-Potentials dar. Es wurden manche Koeffizienten gegenüber älteren Versionen geringfügig verändert, und darüber hinaus zwei zusätzliche Energieterme hinzugefügt.

Das Torsionspotential

Das Torsionspotential verbindet den Winkel zwischen zwei Flächen, der als *dihedral* bezeichnet wird, mit einer entsprechenden Energie. Jede dieser beiden Flächen wird durch jeweils zwei Vektoren aufgespannt, wodurch bis zu 12 Freiheitsgrade im Raum pro Auswertung zu berücksichtigen sind. Im AIREBO-Potential ist ein Torsionspotential der Form

$$E_{kijl}^{\text{tors}} = \frac{1}{2}\epsilon\left[1 + \cos\left(3\omega\right)\right] \tag{C.4}$$

implementiert. Bei der Auswertung des Gesamtpotentials (C.1) werden die Torsionsanteile mit entsprechenden Schaltern der Form (C.3) versehen, um auch bei diesem Potential dem Entstehen und Zerstören von Bindungen während der Simulation Rechnung zu tragen [57].

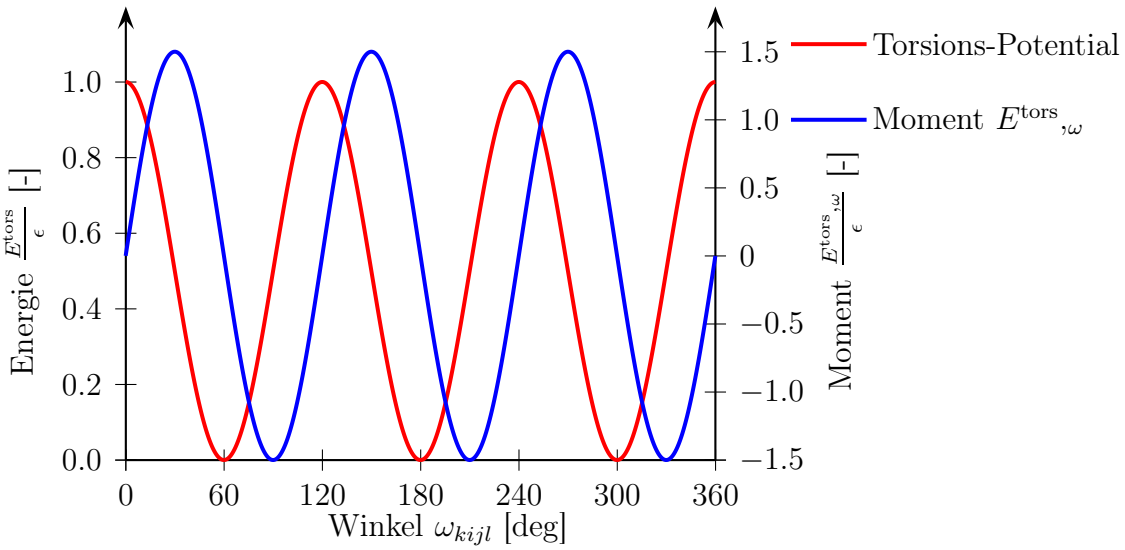
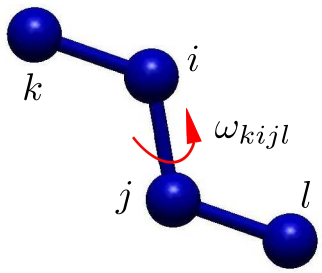


Abbildung C.2.: Das Torsions-Potential (C.4), bzw. das entsprechende Torsionsmoment $M = E^{\text{tors}}{}_{,\omega}$, als Funktion des Winkels ω_{kijl}.

Abbildung C.2 zeigt das Torsionspotential sowie das Moment in Abhängigkeit vom Winkel. Der einfache funktionale Zusammenhang zwischen Drehwinkel und Potential wird durch die Darstellung in Abhängigkeit vom Drehwinkel erzielt. In den gängigen Molekulardynamik-Programmen stellen die Positionen der einzelnen Atome in kartesischen Koordinaten die Freiheitsgrade dar.



$$\cos\omega_{kijl} = \frac{r_{ji}\times r_{ik}}{|r_{ji}\times r_{ik}|}\cdot\frac{r_{ij}\times r_{jl}}{|r_{ij}\times r_{jl}|}$$

Abbildung C.3.: Der Zusammenhang zwischen der Lage von vier Atome im Raum und dem Torsionswinkel.

Die Abhängigkeit des Drehwinkels von den Ortsvektoren der entsprechenden Atome ist in Abb. C.3 dargestellt.

Die *Van der Waals*-Wechselwirkung

Der letzte Anteil in (C.1) stellt eine nicht gebundene Wechselwirkung dar. Das *Lennard-Jones* Potential

$$E_{ij}^{\mathrm{LJ}} = 4\epsilon_{ij}\left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{6}\right] \tag{C.5}$$

beschreibt prinzipiell die Wechselwirkung aller im System vorhandenen Atome.

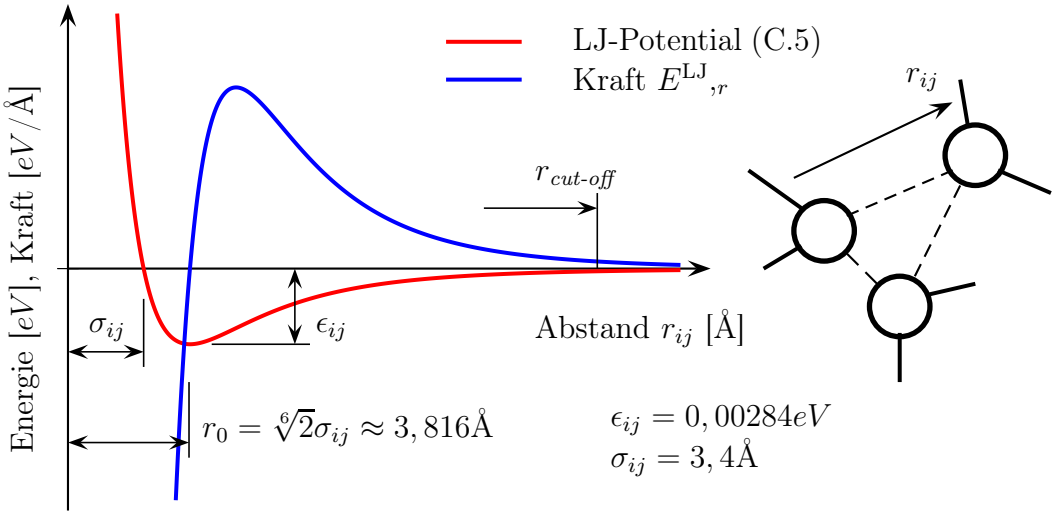


Abbildung C.4.: *Lennard-Jones* Potential und die entsprechende Kraft als Funktion vom Atomabstand.

Weil die Interaktion zwischen den ersten Nachbarn (1-2) und den zweiten Nachbarn (1-3) durch das REBO Potential hinreichend gut beschrieben wird, und das Torsionspotential die (1-4) Nachbarschaft abdeckt, wird das *Lennard-Jones* Potential erst ab einer (1-5) Nachbarschaft ausgewertet [57]. Ist der Abstand zweier Atome größer als ein bestimmter *cut-off* Wert (vgl. Abb. C.4), wird die Wechselwirkung nicht berücksichtigt um Rechenzeit zu sparen. Um einen stetigen Übergang zwischen voller Interaktion und keiner zu gewährleisten, wird in der Implementierung ein Schalter ähnlich der Form (C.3) verwendet.

Tabelle C.1.: Die in den entsprechenden Potentialterme auftretenden Parameter für reine Kohlenstoffbindungen [10, 57].

Parameter	Wert	Gleichung	Parameter	Wert	Gleichung
Q_{ij} [Å]	0,313460	(C.2b)	$B_{ij}^{(1)}$ $[eV]$	12388,792	(C.2c)
A_{ij} $[eV]$	10953,544	(C.2b)	$B_{ij}^{(2)}$ $[eV]$	17,567065	(C.2c)
α_{ij} [Å^{-1}]	4,7465391	(C.2b)	$B_{ij}^{(3)}$ $[eV]$	30,714932	(C.2c)
ϵ_{ij} $[eV]$	0,00284	(C.5)	$\beta_{ij}^{(1)}$ [Å^{-1}]	4,7204523	(C.2c)
σ_{ij} [Å]	3,40	(C.5)	$\beta_{ij}^{(1)}$ [Å^{-1}]	1,4332132	(C.2c)
ϵ_{kijl} $[eV]$	0,3079	(C.4)	$\beta_{ij}^{(1)}$ [Å^{-1}]	1,3826913	(C.2c)

Tabelle C.1 fasst die für die Beschreibung von reinen Kohlenstoffverbindungen notwendigen Werte von Parametern zusammen. Das Gesamtpotential (C.1) mit den in Tab. C.1 angegebenen Koeffizienten ist im verwendeten Molekulardynamikpaket LAMMPS [46] implementiert.

Literaturverzeichnis

[1] M. P. Allen and D. J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, USA, 6 1989.

[2] M. Arroyo and T. Belytschko. Continuum mechanics modelling and simulation of carbon nanotubes. *III European Conference on Computational Mechanics*, 2006.

[3] U. Ascher, J. Christiansen, and R. D. Russell. A collocation solver for mixed order systems of boundary value problems. *Mathematics of Computation*, 33:659–679, 1979.

[4] B. Audoly and A. Boudaoud. Self-similar structures near boundaries in strained systems. *Phys. Rev. Lett.*, 91(8):086105, 2003.

[5] B. Audoly and Y. Pomeau. *Elasticity and Geometry: From hair curls to the nonlinear response of shells*. Oxford University Press, USA, 8 2010.

[6] P. Ballone and P. Milani. Simulated annealing of carbon clusters. *Phys. Rev. B*, 42:3201–3204, 1990.

[7] K. Bets and B. I. Yakobson. Spontaneous twist and intrinsic instabilities of pristine graphene nanoribbons. *Nano Research*, 2:161–166, 2009.

[8] F. Bonaccorso, Z. Sun, T. Hasan, and A. C. Ferrari. Graphene photonics and optoelectronics. *Nat Photon*, 4:611–622, 2010.

[9] D. W. Brenner. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films. *Phys. Rev. B*, 42(15):9458–9471, Nov 1990.

[10] D. W. Brenner, O. A. Shenderova, J. A. Harrison, S. J. Stuart, B. Ni, and S. B. Sinnott. A second-generation reactive empirical bond order (rebo) potential energy expression for hydrocarbons. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14(4):783, 2002.

[11] H.-J. Butt and M. Kappl. *Surface and Interfacial Forces*. Wiley-VCH, 2010.

[12] J. Campos-Delgado, J. M. Romo-Herrera, X. Jia, D. A. Cullen, H. Muramatsu, Y. A. Kim, T. Hayashi, Z. Ren, D. J. Smith, Y. Okuno, T. Ohba, H. Kanoh, K. Kaneko, M. Endo, H. Terrones, M. S. Dresselhaus, and M. Terrones. Bulk production of a new form of sp2 carbon: Crystalline graphene nanoribbons. *Nano Letters*, 8(9):2773–2778, 2008.

[13] P. G. Ciarlet. A justification of the von kármán equations. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 73(4):349–389, 1980.

[14] C. Coman. Edge-wave buckling of rolled elastic strips: asymptotic results. *Acta Mechanica*, 211(1-2):101–113, 2010.

[15] C. L. Dym and I. H. Shames. *Solid Mechanics: A Variational Approach (Advanced engineering series)*. McGraw-Hill Inc.,US, 4 1973.

[16] F. D. Fischer, F. G. Rammerstorfer, and N. Friedl. Residual stress-induced center wave buckling of rolled strip metal. *Journal of Applied Mechanics*, 70(1):84–90, 2003.

[17] Y. C. Fung. *Foundations of Solid Mechanics*. Prentice Hall, 6 1965.

[18] A. Geim and K. Novoselov. For groundbreaking experiments regarding the two-dimensional material graphene. http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2010/.

[19] A. K. Geim. Graphene: Status and prospects. *Science*, 324(5934):1530–1534, 2009.

[20] A. K. Geim and K. S. Novoselov. The rise of graphene. *Nat Mater*, 6:183–191, 2007.

[21] K. Girkmann. *Flächentragwerke; Einführung in die Elastostatik der Scheiben, Platten, Schalen und Faltwerde.* Springer, 1946.

[22] A. E. Green and W. Zerna. *Theoretical Elasticity*. Oxford University Press, USA, 2nd. edition, 1968.

[23] J. P. Hirth and J. Lothe. *Theory of Dislocations*. Krieger Pub Co, 5 1992.

[24] D. P. Holmes, M. Roche, T. Sinha, and H. A. Stone. Bending and twisting of soft materials by non-homogenous swelling. *Soft Matter*, 7(11):5188–5193, 2011.

[25] Y. Huang, J. Wu, and K. C. Hwang. Thickness of graphene and single-wall carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, 74:245413, 2006.

[26] Jmol. An open-source java viewer for chemical structures in 3d. http://www.jmol.org/.

[27] R. F. C. Jr., S. H. Kroto, and R. E. Smalley. For their discovery of fullerenes. http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1996/.

[28] S. Jun. Density-functional study of edge stress in graphene. *Phys. Rev. B*, 78(7):073405, 2008.

[29] E. Klingbeil. *Tensorrechnung für Ingenieure*. Bibliographisches Institut Mannheim, 1966.

[30] K. Kudin, G. Scuseria, and B. I. Yakobson. C2f, bn, and c nanoshell elasticity from ab initio computations. *Physical Review B*, 64(23):235406, 2001.

[31] L. D. Landau and E. Lifschitz. *Elastizitätstheorie, Volume 7 (Theoretische Physik)*. Akademie Verlag Berlin, 1966.

[32] A. Leach. *Molecular Modelling: Principles and Applications (2nd Edition)*. Prentice Hall, 2 edition, 4 2001.

[33] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *Science*, 321(5887):385–388, 2008.

[34] H. Liang and L. Mahadevan. The shape of a long leaf. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 106:22049–22054, 2009.

[35] H. Liang and L. Mahadevan. Growth, geometry, and mechanics of a blooming lily. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 108(14):5516–5521, 2011.

[36] W. K. Liu, E. G. Karpov, and H. S. Park. *Nano Mechanics and Materials: Theory, Multiscale Methods and Applications*. Wiley, 1 edition, 3 2006.

[37] Y. Liu, A. Dobrinsky, and B. I. Yakobson. Graphene edge from armchair to zigzag: The origins of nanotube chirality? *Phys. Rev. Lett.*, 105(23):235502, 2010.

[38] Q. Lu and R. Huang. Nonlinear mechanics of single-atomic-layer graphene sheets. *International Journal of Applied Mechanics*, 1(3):443–467, 2009.

[39] Q. Lu and R. Huang. Excess energy and deformation along free edges of graphene nanoribbons. *Phys. Rev. B*, 81(15):155410, 2010.

[40] M. Marder, R. D. Deegan, and E. Sharon. Crumpling, buckling, and cracking: Elasticity of thin sheets. *Physics Today*, 60(2):33–38, 2007.

[41] D. A. McQuarrie. *Statistical Mechanics*. University Science Books, 1st edition, 5 2000.

[42] T. Mora and A. Boudaoud. Buckling of swelling gels. *The European Physical Journal E: Soft Matter and Biological Physics*, 20(2):119–124, 2006.

[43] B. Niceno. A two-dimensional quality mesh generator. www-dinma.univ.trieste.it/nirftc/research/easymesh/easymesh.html.

[44] H. Parkus. *Mechanik der Festen Körper*. Springer-Verlag, 2nd. edition, 1966.

[45] V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres. Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene. *Phys. Rev. B*, 80(4):045401, Jul 2009.

[46] S. Plimton. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 117:1–19, 1995. http://lammps.sandia.gov.

[47] D. D. Quinn, J. P. Wilber, C. B. Clemons, G. W. Young, and A. Buldum. Buckling instabilities in coupled nano-layers. *International Journal of Non-Linear Mechanics*, 42(4):681 – 689, 2007.

[48] F. G. Rammerstorfer. *Repetitorium Leichtbau*. Oldenbourg, 1992.

[49] F. G. Rammerstorfer, F. D. Fischer, and N. Friedl. Buckling of free infinite strips under residual stresses and global tension. *Journal of Applied Mechanics*, 68(3):399–404, 2001.

[50] R. Saito, G. Dresselhaus, and M. Dresselhaus. *Physical properties of carbon nanotubes*. Icp, 1st edition, 9 1998.

[51] F. Schwierz. Graphene transistors. *Nat Nano*, 5(7):487496, 2010.

[52] H. S. Seung and D. R. Nelson. Defects in flexible membranes with crystalline order. *Phys. Rev. A*, 38:1005–1018, 1988.

[53] E. Sharon and E. Efrati. The mechanics of non-euclidean plates. *Soft Matter*, 6:5693–5704, 2010.

[54] V. B. Shenoy, C. D. Reddy, A. Ramasubramaniam, and Y. W. Zhang. Edge-stress-induced warping of graphene sheets and nanoribbons. *Phys. Rev. Lett.*, 101(24):245501, 2008.

[55] R. Shuttleworth. The surface tension of solids. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 63(5):5444, 1950.

[56] W. I. Smirnow. *Lehrgang der Höheren Mathematik Teil 1-5*. VEB Deutscher Verlag Der Wissenschaften, 1971.

[57] S. J. Stuart, A. B. Tutein, and J. A. Harrison. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions. *The Journal of Chemical Physics*, 112(14):6472–6486, 2000.

[58] S. P. Timoshenko and J. Goodier. *Theory of Elasticity (McGraw-Hill Classic Textbook Reissue Series)*. McGraw Hill Higher Education, 3rd edition, 10 1970.

[59] S. P. Timoshenko and S.Woinowsky-Krieger. *Theory of Plates and Shells*. McGraw-Hill Book Company, 2nd edition, 1959.

[60] H. Troger and A. Steindl. *Nonlinear Stability and Bifurcation Theory: An Introduction for Engineers and Applied Scientists*. Springer-Verlag, 1991.

[61] von Karman T. Festigkeitsprobleme im maschinenbau. *Encyklopädie der mathematischen Wissenschaften*, Vol. IV:349, 1910.

[62] C. Y. Wang. On the buckling of a circular plate on an elastic foundation. *Journal of Applied Mechanics*, 72(5):795–796, 2005.

[63] H. Wang and M. Upmanyu. Rippling instabilities in suspended nanoribbons. *ArXiv e-prints*, 2011.

[64] J. P. Wilber, C. B. Clemons, G. W. Young, A. Buldum, and D. D. Quinn. Continuum and atomistic modeling of interacting graphene layers. *Phys. Rev. B*, 75(4):045418, 2007.

[65] B. I. Yakobson, C. J. Brabec, and J. Bernholc. Structural mechanics of carbon nanotubes: From continuum elasticity to atomistic fracture. *Journal of Computer-Aided Materials Design*, 3(1):173–182, 1996.

[66] X. X. Zhang, T. F. Guo, and Y. W. Zhang. Instability analysis of a programmed hydrogel plate under swelling. *Journal of Applied Physics*, 109(6):063527, 2011.

Curriculum Vitae

Michael Hermann Schwarzbart
Josef Bartmannstrasse 15
2483 Weigelsdorf, Österreich

2.Juni 1981	geboren in Baden
1987 - 1991	Volksschule Weigelsdorf
1991 - 1995	Hauptschule Ebreichsdorf mit ausgezeichnetem Erfolg abgeschlossen
1995 - 2000	**HTL - Eisenstadt** Abteilung: Werkstofftechnologie Thema der Diplomarbeit: *Herstellung von Gusseisen mit Kugel- und Lamellengraphit*
Juni 2000	Reifeprüfung mit ausgezeichnetem Erfolg abgelegt
Juli - Dezember 2000	**Fa. König & Bauer** Montage von Druckerpressen
Jänner - August 2001	**Militärdienst** Kraftfahrer StbBt/PzAB9 Baden
2001 - 2007	**Technische Universität Wien** Studienzweig: Maschinenbau Vertiefung: Modellbildung und Simulation
April 2003	1.Diplomprüfung mit ausgezeichnetem Erfolg abgelegt
August 2006	2.Diplomprüfung abgelegt Thema der Diplomarbeit: *Stabilitätsuntersuchungen am Raumaufzug*
Mai 2007	3.Diplomprüfung mit ausgezeichnetem Erfolg abgelegt
Jänner 2006 - Juni 2011	Univ.Ass. am Institut für Mechanik und Mechatronik ehem. Abteilung für Angewandte Mechanik bei Prof. Hans Troger **Abgehaltene Lehrveranstaltungen** Übungen zu “Mechanik 3” sowie zu “Höhere Festigkeitslehre” für Studenten des Maschinenbaus

November 2008	ASAG Mobilitätsstipendium
Februar - Juli 2009	J1 Besucher an der Rice University in Houston, TX, in der Gruppe von Prof. Boris I. Yakobson Department of Mechanical Engineering & Material Science
Juli 2011 - August 2012	**Fachhochschule Wiener Neustadt** Wissenschaftlicher Mitarbeiter im Fachbereich für Angewandte und Numerische Mechanik
April 2012 - Juni 2012	Teilbeschäftigter II L-Vertragslehrer für den fachtheoretischen Unterricht an der HTL-Wiener Neustadt, Automatisierungstechnik
seit September 2012	**HTL Wiener Neustadt** Vollbeschäftigter I L-Vertragslehrer für den fachtheoretischen Unterricht in der Abteilung für Automatisierungstechnik Nebenberuflicher Lektor an der FH-Wiener Neustadt für den Masterstudiengang Mechatronik

Wien, am 18.01.2013