

УДК 539.3

В.А.Басов (5 курс, каф. ФМиКТМ), Д.А.Корнилов (асп., каф. ФМиКТМ)

## МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОТРУБОК

Открытие углеродных нанотрубок относится к наиболее значительным достижениям современной науки. Эта форма углерода по своей структуре занимает промежуточное положение между графитом и фуллеренами. Однако многие свойства углеродных нанотрубок не имеют ничего общего ни с графитом, ни с фуллеренами. Это позволяет рассматривать и исследовать нанотрубки как самостоятельный материал, обладающий уникальными физико-химическими характеристиками.

Исследования углеродных нанотрубок представляют значительный фундаментальный и прикладной интерес. Фундаментальный интерес к этому объекту обусловлен, в первую очередь, его необычной структурой и широким диапазоном изменения физико-химических свойств в зависимости от хиральности. Многие из этих свойств еще и сегодня служат предметом интенсивных исследований, направленных на выявление новых интересных особенностей поведения нанотрубок в той или иной ситуации.

Одна из основных причин постоянно возрастающего интереса к исследованию углеродных нанотрубок связана с их исключительно высокими механическими свойствами, которые ставят этот объект в ряд наиболее прочных из известных материалов. Однако специалисты до сих пор не пришли к единой точке зрения в отношении количественных показателей, характеризующих прочность углеродных нанотрубок. Поэтому очень важной является задача узнать, что же происходит при деформации нанотрубок на атомном уровне. В настоящее время, нет никакого метода, кроме метода молекулярной динамики, для количественной оценки некоторых свойств нанотрубок.

В связи с этим, нашей задачей являлось проведение компьютерных экспериментов по сжатию и растяжению однослойной углеродной нанотрубки в диапазоне температур от 100 до 1300 К при скорости деформации  $2.5 \cdot 10^{-7}$  нм/пс. Для этого была использована модель молекулярной динамики «зарядов на связях», основной особенностью которой является возможность изучения свойств как ионной, так и электронной подсистем. Эта методика уже была успешно применена для изучения самоорганизации фуллеренов и нанотрубок, а также для изучения одноосного растяжения углеродных нанотрубок.

В экспериментах по моделированию растяжения нанотрубок получено, что для низких температур отрыв развивается в плоскости нормали к растягивающей силе и имеет хрупкий характер, т.е. деформация идет в пределах одной атомной плоскости. Характер диаграммы растяжения сходен с диаграммой растяжения для металлических усов. В отличие от низкотемпературного случая, при высоких температурах перелом охватывает уже не одну атомную плоскость, а несколько, и распространяется под углом к растягивающей силе, так как если бы было касательное напряжение. Таким образом, для высокотемпературного растягивания мы почтили не хрупкое, а пластическое разрушение.

Моделирование сжатия нанотрубок дало следующие результаты. Начальная конфигурация нанотрубки показана на рис. 1. Здесь маленькие шары - это электроны, а большие шары – атомы углерода. Как видно из рис. 2, наблюдается продавливание срединной части нанотрубки во внутреннюю область. Это совпадает с компьютерными экспериментами других ученых, занимающихся изучением механических свойств нанотрубок с помощью компьютерных методов моделирования.

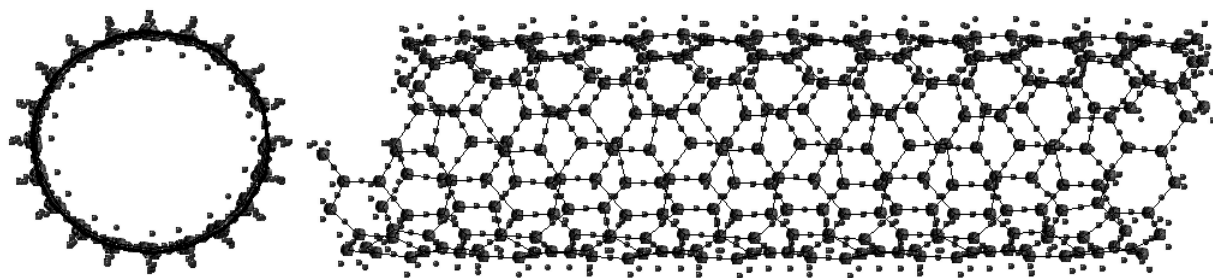


Рис.1. Начальная конфигурация для нанотрубки с хиральностью

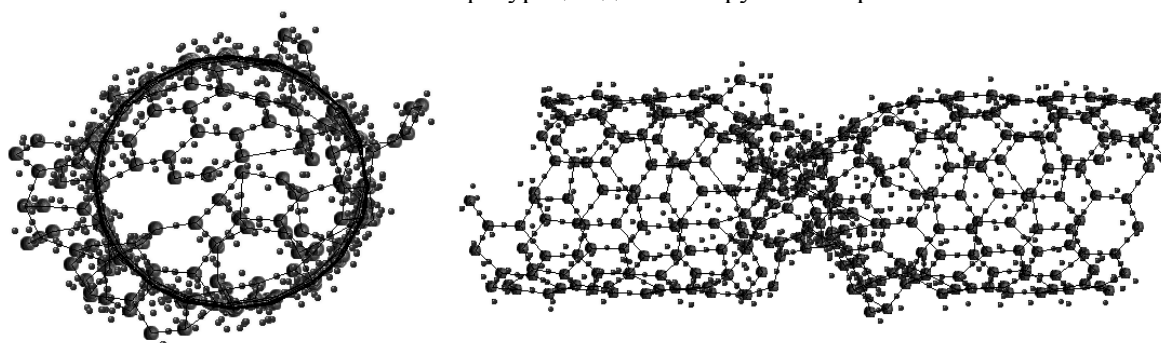


Рис. 2. Конфигурация нанотрубки с хиральностью после сжатия;  
время 1500 пс; температура 300К

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. A.V. Eletsky and B.M. Smirnov, "Fullerenes and carbon structures", *Uspekhi Fiz. Nauk*, 165 (9), 977-1009 (1995).
2. A.V. Eletsky, "Carbon nanotubes", *Uspekhi Fiz. Nauk*, 167 (9), 945 (1997).
3. A.I. Melker, S.N. Romanov, D.A. Kornilov, "Computer simulation of formation of carbon fullerenes," *Materials Physics and Mechanics*, 2(1), 42-50 (2000).
4. D.A. Kornilov, A.I. Melker, S.N. Romanov, "New molecular dynamics predicts fullerene formation", *Proceedings of SPIE* Vol. 4348, 146-153 (2001).
5. A.I. Melker, D.A. Kornilov, S.N. Romanov, N.A. Izotova "Carbon nanotubes: formation and computer simulation", *Proceedings of SPIE* Vol. 5127, (2003).