

# ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ УЕДИНЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

А. А. Хрущинский, А. Л. Пушкарчук, С. А. Кутень,  
С. Я. Килин\*, А. П. Низовцев\*

## 1. Введение

Углеродные нанотрубки (УНТ) со времени их открытия Иджимой в 1991 г. [1] сразу привлекли широкое внимание в силу их уникальных физико-химических свойств. Эти свойства позволяют надеяться на широкое их применение в разнообразных областях науки и техники. Мы не будем перечислять возможные применения, поскольку, как правило, любая статья на тему нанотрубок содержит это перечисление.

В данной работе исследуются механические свойства одностенных углеродных нанотрубок. Из механических свойств выбраны важные для разработки новых материалов упругие константы (модуль Юнга, модуль изгиба, модуль кручения).

Следует заметить, что несмотря на значительное количество работ, посвященных экспериментальному определению упругих констант УНТ и материалов на их основе, количество надежных экспериментальных данных на эту тему весьма ограничено, что связано со сложностью манипулирования наноразмерными объектами. Практически полностью отсутствуют экспериментальные данные по модулю кручения нанотрубок, а те, которые есть, скорее вызывают сомнение, чем доверие. Из-за малого диаметра нанотрубки осуществить корректно чисто торсионную нагрузку на уединенную нанотрубку очень сложно. Для эксперимента используют обычно связку УНТ и вычисляют потом модули кручения уединенной нанотрубки [2]. Такая процедура дает завышенную оценку модуля ( $\sim 1$  ТПа). Однако уже в работе [3] эксперименты были проведены на единичных нанотрубках и дали в результате (хотя и с большой ошибкой) оценку модуля кручения  $0.41 \pm 0.36$  ТПа. Оценки же методом молекулярной динамики дают величину порядка нескольких сотен ГПа, т. е. близки к оценке в работе [3].

Вместе с тем на практике торсионные деформации являются довольно частым явлением. Поэтому расчеты на основе молекулярной динамики и квантовой химии упругих констант для нанотрубок представляют непосредственный интерес для практики. Модуль Юнга для свободных от примесей нанотрубок был получен в ряде работ на основе различных экспериментальных методик. В работе [4] это было сделано на основе исследования амплитуды тепловых колебаний концов нанотрубки, в [5] с помощью атомного силового микроскопа, исследуя деформацию изгиба. Экспериментальный результат для модуля Юнга лежит в пределах одного ТПа. Это близко к значениям модуля Юнга для графита, однако экспериментальные ошибки достаточно велики. Большой разброс имеет место и в теоретических оценках [6], см. также [8] и ссылки в ней.

---

\* Институт физики НАН Беларуси, Минск.

Определение упругих констант важно во многих прикладных аспектах, в частности при производстве композитов на основе УНТ, разработке и производстве наномеханизмов.

Уединенная нанотрубка характеризуется двумя целыми числами (индексы киральности). Эти числа определяют все свойства нанотрубок. Данная работа посвящена исследованию зависимости механических свойств (упругие константы при деформации растяжения, изгиба и кручения) УНТ от индексов киральности.

## 2. Расчет на основе методов молекулярной динамики упругих постоянных углеродных нанотрубок различной киральности

Для расчета упругих постоянных УНТ были использованы методы молекулярной динамики (МД). Хотя они базируются на классических уравнениях Ньютона, МД достаточно успешно описывает динамику атомов в сложных молекулах в широком диапазоне условий, исключая область очень низких температур.

Итак, основные уравнения МД есть уравнения Ньютона:

$$\frac{d^2r^i}{dt^2} = F^i(r^1, \dots, r^i, \dots) = -\frac{\partial V(r^1, \dots, r^i, \dots)}{\partial r^i} \quad (1)$$

или уравнения Гамильтона, определяемые гамильтонианом:

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + V(r^1, \dots, r^j, \dots), \quad (2)$$

где  $V(r^1, \dots, r^j, \dots)$  – потенциал взаимодействия атомов в молекуле и моделирующий химические связи. Различные варианты метода МД отличаются в основном формой этого потенциала. Для описания С–С, С–Н и других углеродных связей используют обычно Терсова – Бренера (Tersoff – Brenner) потенциал [12–16]:

$$V(r_{ij}) = f_c(r_{ij}) (f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})), \quad (3)$$

где  $f_R(r) = Ae^{-\lambda_1 r}$ ;  $f_A(r) = -Be^{-\lambda_2 r}$ , а функция обрезания  $f_c(r)$  определяется уравнением

$$f_c(r) = \begin{cases} 1 & r < (R - D) \\ 0.5 - 0.5 \sin(0.5\pi(R - D)/D) & (R - D) < r < (R + D) \\ 0 & r > (R + D) \end{cases} \quad (4)$$

Функция  $b_{ij}$  определяется характером связи (одиночная, двойная, тройная), а также углами между соседними связями для учета стереохимических эффектов. Параметры этого потенциала выбираются из соображений наилучшей подгонки длины связи и ее энергии в основном состоянии молекулы. Явный вид  $b_{ij}$  можно найти в работах [12–16].  $R$  – длина связи,  $D$  – длина переходной об-

ласти функции обрезания. Один из возможных наборов параметров приведен в табл. 1 [12].

В МД межмолекулярное взаимодействие (Ван-дер-Ваальса) описывается обычно с помощью потенциала Ленарда – Джонсона (Lennard – Jones) [17]:

$$V^{LJ} = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (5)$$

Для исследования равновесных конфигураций основного уровня необходимо найти безусловный минимум суммарной энергии. При решении динамических проблем задача моделирования в МД сводится к решению большого числа связанных обыкновенных дифференциальных уравнений с указанными выше потенциалами.

Таблица 1

Основные параметры потенциала Terstoff – Bennet

| $A$ (эВ) | $B$ (эВ) | $\lambda_1$ (Å-1) | $\lambda_2$ (Å-1) | $R$ (Å) | $D$ (Å) |
|----------|----------|-------------------|-------------------|---------|---------|
| 13036    | 346.7    | 3.4879            | 2.2119            | 1.95    | 0.2     |

В большинстве программ молекулярного моделирования на этих решениях строятся функционалы полной энергии, полной кинетической энергии, полной потенциальной энергии. Ясно, что эти функционалы зависят от начальных условий. Если начальные условия выбрать так, чтобы они соответствовали чистой деформации определенного вида, то эти функционалы будут зависеть от величины этой деформации. Тогда, используя приемы континуальной теории упругости, будем иметь:

### 1. Продольное сжатие и модуль Юнга

$$Y = \frac{1}{V_0} \frac{\partial^2 W_{axial}}{\partial \varepsilon^2}, \quad (6)$$

где  $W_{axial}$  – энергия упругой деформации,  $\varepsilon$  – относительная деформация (сжатие или растяжение),  $V_0$  – объем оболочки, моделирующей нанотрубку ( $V_0 = 2\pi L R \delta R$ ),  $L$  – длина нанотрубки,  $R$  – радиус УНТ,  $\delta R$  – толщина оболочки. Однако в отношении последней нет единого подхода. Чаще всего значение этой величины принимают равным расстоянию между графитовыми плоскостями, т. е. 0.34 нм. Мы также в данной работе принимаем это соглашение. Хотя в работе [7] использовалась толщина оболочки 0.06 нм, и именно в ней была получена наиболее завышенная величина оценки модуля Юнга, существенно выше экспериментальной.

### 2. Деформация изгиба

Жесткость на изгиб определяется уравнением [22]

$$K = \frac{1}{L} \frac{\partial^2 W_b}{\partial C^2}, \quad (7)$$

где  $W_b$  – энергия деформации изгиба,  $L$  – длина нанотрубки,  $C$  – кривизна изгиба

УНТ, которая соотносится с углом изгиба  $\theta$  формулой  $C = \theta/L$ . Из общей теории цилиндрических оболочек [23] следует связь жесткости  $K$  с модулем Юнга  $Y$ :

$$K = Y_b \delta R (\pi R^3). \quad (8)$$

### 3. Деформация кручения

Формула для расчета модуля кручения в данном случае есть [22]

$$G_\theta = \frac{1}{V_0} \frac{\partial^2 W_{tw}}{\partial \gamma^2}, \quad (9)$$

где  $W_{tw}$  – упругая энергия деформации кручения,  $V_0$  – равновесный объем, определяемый в данном случае выражением

$$V_0 = 2\pi L R \delta R. \quad (10)$$

Величина  $\gamma$  равна длине дуги закручивания, отнесенной к длине нанотрубки:

$$\gamma = \frac{R \varphi}{L}. \quad (11)$$

$L$  – длина;  $R$  – радиус УНТ в равновесном состоянии;  $\delta R$  – толщина стенок нанотрубки.

## 2.1. Подготовка исходного напряженного состояния нанотрубки различных киральностей

Исходная геометрия деформированного состояния нанотрубки приготавлялась с помощью программы NanotubeModeler. Для исследования эффектов киральности на механические свойства нанотрубок были взяты нанотрубки примерно одного радиуса и шести киральностей. Основные свойства выбранных нанотрубок приведены в табл. 2.

Таблица 2  
Киральность использованных нанотрубок ( $n, m$ ), их радиус, длина и объем оболочки в предположении, что ее толщина равна 0.34 нм. Длина УНТ относится к трубкам, подвергшимся деформации изгиба и кручения, для сжатия это было 80 Å

| $(n, m)$                | 8,0     | 6,2     | 5,3     | 6,3     | 5,4     | 5,5     |
|-------------------------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| $R$ (Å)                 | 3.109   | 2.803   | 2.721   | 3.085   | 3.036   | 3.366   |
| $L$ (Å)                 | 45.0    | 45.0    | 45.0    | 45.0    | 45.0    | 45.0    |
| $V_0$ (Å <sup>3</sup> ) | 2789.52 | 2514.96 | 2441.39 | 2767.98 | 2724.02 | 3020.11 |

Для каждой нанотрубки с заданной киральностью и длиной приготавливались деформированные состояния. Исследуемые деформации: аксиальное растяжение/сжатие, изгиб, кручение. На рис. 1 приведены изображения нанотрубок до и после деформации для деформации изгиба.

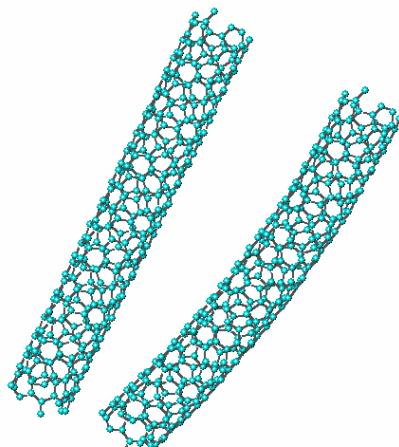


Рис. 1. Деформация изгиба (слева исходная трубка (8,0), справа – деформированная)

## 2.2. Расчет и результаты для упругой энергии и оценки упругих модулей в случае незаполненных нанотрубок

Используя приготовленные начальные состояния для разных видов и значений деформаций с помощью программы «HyperChem», были рассчитаны функционалы полной энергии для всех упомянутых выше нанотрубок. В качестве примера величины полной энергии нанотрубки в зависимости от величины деформаций приведены на рис. 2. для нанотрубки с киральными индексами (8,0).

Используя уравнения (7–9), были определены соответствующие упругие постоянные.

### 1. Модуль Юнга

Таблица 3

#### Величины модуля Юнга (Y) для УНТ разной киральности

| $(n, m)$  | 8, 0  | 6, 2  | 5, 3  | 6, 3  | 5, 4  | 5, 5  |
|-----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $R$ (Å)   | 3.109 | 2.803 | 2.721 | 3.085 | 3.036 | 3.366 |
| $Y$ (ТПа) | 1.32  | 1.38  | 1.24  | 1.25  | 1.23  | 1.24  |

Из таблицы 3 видно, что величина модуля Юнга в пределах ошибок ( $\sim 30\%$ ) расчетов не зависит от киральности. Более того, она в пределах тех же ошибок [8] не зависит и от радиуса.

Имеющиеся в наличии к настоящему времени экспериментальные значения приведены в табл. 4.

Они были определены двумя методами: исследованием спектра тепловых колебаний нанотрубки и методом измерения возвращающей силы с помощью атомного силового микроскопа.

Таблица 4

#### Известные экспериментальные значения модуля Юнга

| Метод     | Тепловые колебания [18] МСУНТ | Возвращающая сила при изгибе [19] МСУНТ | Тепловые колебания [20] УНТ | Возвращающая сила при изгибе [21] УНТ |
|-----------|-------------------------------|---|-----------------------------|---------------------------------------|
| $Y$ (ТПа) | $1.8 \pm 1.4$                 | $1.28 \pm 0.59$                         | $1.7 \pm 1.4$               | 1.0                                   |

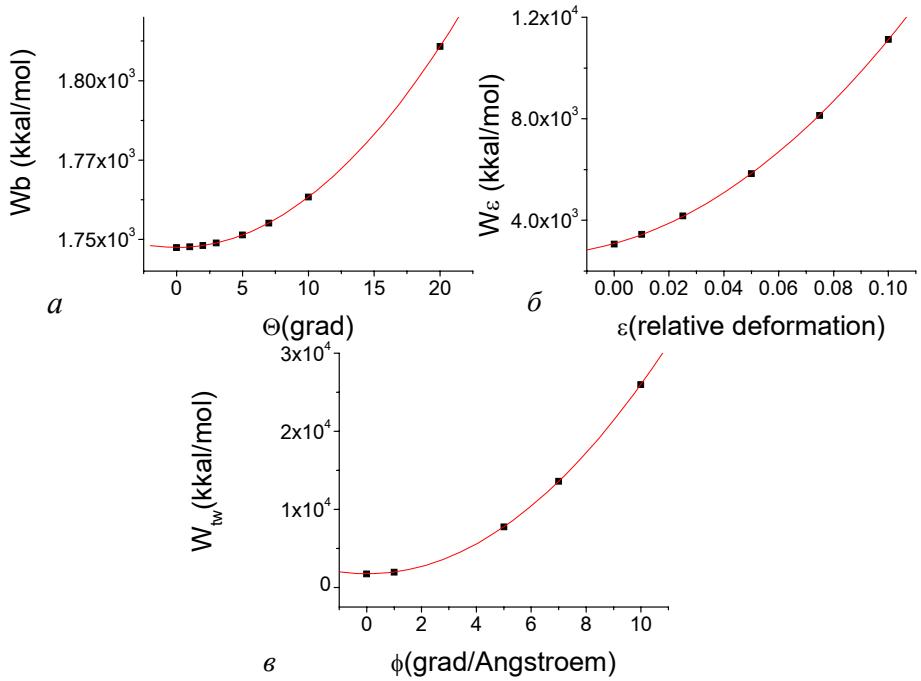


Рис. 2. Рассчитанные значения функционалов полной энергии как функции соответствующих деформаций для: *a* – деформация изгиба; *b* – деформация растяжения; *c* – деформация кручения

Видно, что полученные нами значения модуля Юнга в пределах экспериментальных и расчетных ошибок совпадают с экспериментальными. Они также совпадают с большинством оценок других авторов, см. в работе [8].

## 2. Деформация изгиба

Таблица 5

Значение жесткости  $K$  и модуля Юнга  $Y_b$  на изгиб для нанотрубок разной киральности

| $(n, m)$     | 8, 0  | 6, 2  | 5, 3  | 6, 3  | 5, 4  | 5, 5  |
|--------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $R$ (Å)      | 3.109 | 2.803 | 2.721 | 3.085 | 3.036 | 3.366 |
| $K$ (эВ·мкм) | 0.203 | 0.149 | 0.135 | 0.199 | 0.186 | 0.264 |
| $Y_b$ (ТПа)  | 1.013 | 1.015 | 1.006 | 1.020 | 0.997 | 1.039 |

Как видно из табл. 5, здесь так же, как и в предыдущем пункте, модуль Юнга не зависит от киральности в пределах ошибок моделирования. Что касается жесткости, то, как известно [22], она зависит от радиуса по кубическому закону. Поскольку мы исследовали зависимость упругих постоянных от киральности, то были выбраны нанотрубки примерно одинакового радиуса и упомянутый выше закон не мог проявиться достаточно отчетливо.

### 3. Деформация кручения

Таблица 6

Значение модуля Юнга кручения  $G_\theta$  для нанотрубок различной киральности

| $(n, m)$         | 8, 0  | 6, 2  | 5, 3  | 6, 3  | 5, 4  | 5, 5  |
|------------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $R$ (Å)          | 3.109 | 2.803 | 2.721 | 3.085 | 3.036 | 3.366 |
| $G_\theta$ (ТПа) | 0.383 | 0.386 | 0.304 | 0.344 | 0.286 | 0.271 |

Как уже говорилось во введении, надежные экспериментальные данные по модулю кручения в настоящее время отсутствуют по понятным причинам. Наш результат соответствует результатам расчетов других авторов, в частности [24] и экспериментальным результатам в [3], хотя в три раза меньше, чем в [2]. Анализ табл. 6 показывает наличие, хотя и слабой, зависимости модуля кручения от киральности нанотрубок. Нанотрубка (8, 0) имеет больший модуль кручения, нежели нанотрубки (5, 4) и (5, 5), имеющие примерно тот же радиус, что и нанотрубка (8, 0).

### 2.3. Расчет и результаты для упругой энергии и упругих постоянных в случае нанотрубок, содержащих одну молекулу водорода

Исходная структура деформированного состояния была такая же, как и в п. 2, но в деформированную нанотрубку в центр помещалась одна молекула водорода. По уравнениям (7–9) были рассчитаны жесткость и модуль Юнга на изгиб для нанотрубок, содержащих молекулу водорода. Их значения приведены в табл. 7.

Таблица 7

Значение жесткости  $K$  и модуля Юнга  $Y_b$  на изгиб для нанотрубок разной киральности при наличии двух атомов водорода в нанотрубке

| $(n, m)$         | 8, 0   | 6, 2  | 5, 3  | 6, 3  | 5, 4  | 5, 5  |
|------------------|--------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $R$ (Å)          | 3.109  | 2.803 | 2.721 | 3.085 | 3.036 | 3.366 |
| $K$ (эВ·мкм)     | 0.2025 | 0.148 | 0.135 | 0.199 | 0.185 | 0.263 |
| $Y_b$ (ТПа)      | 1.0108 | 1.011 | 1.006 | 1.018 | 0.995 | 1.036 |
| $G_\theta$ (ТПа) | 0.384  | 0.382 | 0.307 | 0.356 | 0.287 | 0.271 |

Сравнение величин жесткости и модуля Юнга из табл. 5 и 7 показывает, что существенной разницы между ними нет. Это и следовало ожидать, поскольку ван-дер-ваальсово взаимодействие атомов водорода с нанотрубкой достаточно слабо, чтобы изменить ощутимо упругие константы УНТ.

Таблица 8

Значение модуля изгиба для нанотрубок различной киральности, содержащих 10 молекул водорода

| $(n, m)$     | 8, 0   | 6, 2  | 5, 3  | 6, 3  | 5, 4  | 5, 5  |
|--------------|--------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $R$ (Å)      | 3.109  | 2.803 | 2.721 | 3.085 | 3.036 | 3.366 |
| $K$ (эВ·мкм) | 0.2024 | 0.161 | 0.135 | 0.199 | 0.186 | 0.263 |
| $Y_b$ (ТПа)  | 1.010  | 1.097 | 1.008 | 1.018 | 0.997 | 1.035 |

### 3. Частоты собственных мод колебаний в МД описании

Расчет частот собственных мод колебаний в МД подходе сводится к тому, что нанотрубку подвергают сначала определенной деформации, приготовляется состояние, когда атомы углерода сдвинуты из положения равновесия. После этого прослеживается динамика всех атомов УНТ, решая связанную систему обыкновенных дифференциальных уравнений (см. выше), рассматривая приготовленное состояние как начальное. На решениях этих уравнений строятся функционалы полной кинетической и потенциальной энергий.

Ясно, что собственные моды низкочастотных колебаний УНТ присутствуют в этих функционалах. Большинство программ МД рассчитывают эти функционалы. Исследовав Фурье спектр этих функционалов, определяют собственные моды. Такой подход был реализован нами для всех отобранных нанотрубок, но результат приводится ниже только для УНТ (8,0) для двух случаев начальной деформации: сжатие и изгиб. На рис. 3 представлены амплитудные спектры потенциальной энергии для этих двух случаев. Для случаев сжатия и сдвига присутствуют частоты:

- деформация сжатия:  $f \sim 0.1$  ТГц; 0.57 ТГц; 1.15 ТГц; 6.26 ТГц;
- деформация сдвига:  $f \sim 0.141$  ТГц; 0.413 ТГц; 6.26 ТГц.

Эти величины достаточно хорошо совпадают с величинами, приведенными в табл. 9 для нанотрубки (8,0)

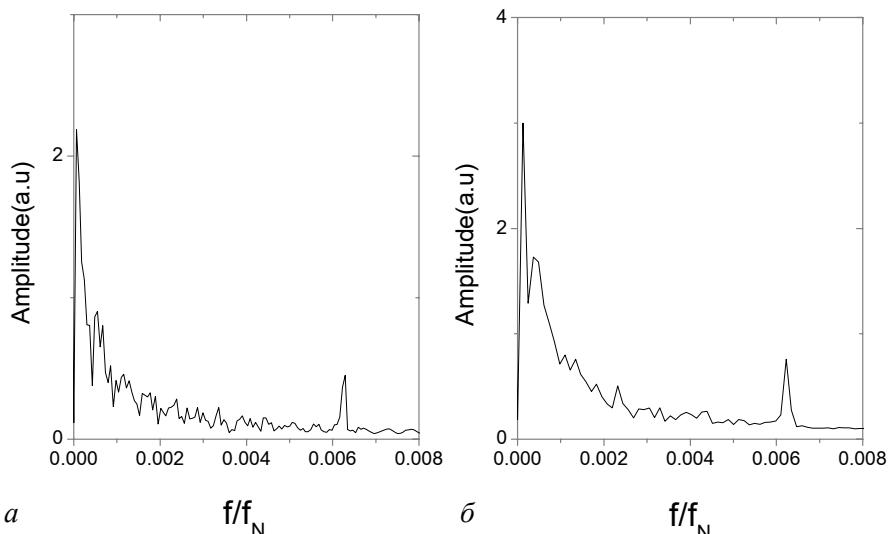


Рис. 3. Амплитудный спектр колебаний потенциальной энергии. По оси абсцисс – частота в долях частоты Нейквиста  $= 10^{15}$  ГГц, по вертикальной оси – амплитудный спектр: *а* – при возбуждении нанотрубки за счет продольного сжатия; *б* – при возбуждении нанотрубки за счет изгиба

Полученные частоты могут быть сравнимы с оценками по теории оболочек, поскольку модули Юнга были уже оценены выше. Так, для колебаний вдоль оси нанотрубки, имеем [25]

$$\omega = \frac{1}{4L} \sqrt{\frac{Y}{\rho}}, \quad (12)$$

где  $Y$  – модуль Юнга,  $L$  – длина нанотрубки (в нашем рассмотрении – 45 Å),  $\rho$  – плотность вещества оболочки в оболочечной модели нанотрубки, которая при условии, что толщина оболочки принята равной 3.4 Å, составляет величину порядка  $9.5 \cdot 10^3$  кг·м<sup>3</sup>.

Для поперечных (изгибных) мод имеем более сложную формулу [25]:

$$f_i = \frac{k_i^2}{2\pi L^2} \sqrt{\frac{Y_b I}{\rho A}}, \quad (13)$$

где  $Y_b$  – модуль Юнга на изгиб,  $I$  – момент инерции =  $\pi R t (4R^2 + t^2)$ ,  $A$  – площадь сечения оболочки, моделирующей нанотрубку =  $2\pi R t$ ,  $k_i$  – константы, рассчитываемые из модели оболочек и для трех нижних мод, принимающие значения 1.875, 4.694, 7.855 соответственно,  $t$  – толщина оболочки.

В соответствии с ранее рассчитанными значениями модуля Юнга для выбранных нами УНТ имеем следующие значения частот (табл. 9).

Таблица 9

**Значения частот продольных колебаний нанотрубок ( $f$ ) и частот трех первых мод поперечных колебаний ( $f_1, f_2, f_3$ ) нанотрубок различной киральности из теории оболочек**

| $(n, m)$    | 8, 0  | 6, 2  | 5, 3  | 6, 3  | 5, 4  | 5, 5  |
|-------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $R$ (Å)     | 3.109 | 2.803 | 2.721 | 3.085 | 3.036 | 3.366 |
| $Y$ (ТПа)   | 1.32  | 1.38  | 1.24  | 1.25  | 1.23  | 1.24  |
| $F$ (ТГц)   | 0.104 | 0.106 | 0.101 | 0.101 | 0.101 | 0.101 |
| $Y_b$ (ТПа) | 1.013 | 1.015 | 1.006 | 1.020 | 0.997 | 1.039 |
| $f_1$ (ТГц) | 0.143 | 0.132 | 0.129 | 0.142 | 0.196 | 0.154 |
| $f_2$ (ТГц) | 0.895 | 0.829 | 0.808 | 0.893 | 0.872 | 0.965 |
| $f_3$ (ТГц) | 2.507 | 2.322 | 2.262 | 2.501 | 2.44  | 2.702 |

Эти результаты следует сравнить для трубы (8, 0) с теми, что получены методом МД. Согласие довольно хорошее.

Как видно из табл. 9, частоты продольных колебаний довольно отчетливо зависят как от радиуса, так и от индексов киральности. Это означает, что исследуя спектр поперечных низкочастотных колебаний нанотрубок, можно попытаться определить одновременно киральность и радиус УНТ.

На обоих графиках можно видеть максимум на частоте:  $f = 0.0063 f_N = 6.3 \cdot 10^{12}$  Гц = 200 см<sup>-1</sup>, эта частота соответствует нижней частоте комбинационного рассеяния для нанотрубки [26] и лежит в терагерцовой области.

## 4. Заключение

В работе приведены результаты модельных расчетов упругих постоянных углеродных нанотрубок различной киральности и примерно одинакового радиуса. Рассматривались свободные недопированные нанотрубки, нанотрубки, допированные одной молекулой водорода, допированные многими молекулами водорода. Используя методы и программы для молекулярной динамики, показано следующее.

Модуль Юнга для недопированных нанотрубок различной киральности лежит в диапазоне 1.23–1.38 ТПа и слабо зависит от киральности и радиуса [8] нанотрубок. Эти утверждения хорошо совпадают с утверждениями других авторов, производивших расчеты упругих постоянных, и немногочисленными экспериментальными данными ( $1.28 \pm 0.59$  [19] –  $1.8 \pm 1.4$  [18]).

Жесткость на изгиб и модуль изгиба для исследованного набора нанотрубок лежат в диапазонах 0.135–0.264 эВ·мкм и 0.997–1.036 ТПа соответственно. Большой разброс жесткости определяется кубической зависимостью жесткости от радиуса и разбросом, хотя и слабым по радиусу исследуемого набора нанотрубок. Что же касается модуля изгиба, то он не зависит в пределах ошибок моделирования от киральности и радиуса.

Модуль кручения для рассмотренных нанотрубок лежит в диапазоне 0.271–0.383 ТПа. Имеет место слабая зависимость от индексов киральности нанотрубки. Для практических целей ее можно, как правило, пренебречь. У большинства авторов, проведших моделирование упругих свойств нанотрубок с помощью методов молекулярной динамики или квантовой химии, значения модуля кручения с точностью до 30 % совпадают с полученными в настоящей работе.

Экспериментальное значение [2], полученное на жгуте нанотрубок, составляет величину  $\sim 1$  ТПа и вряд ли может рассматриваться как надежный результат. Экспериментальное значение модуля кручения ( $0.41 \pm 0.36$  ТПа), полученное в работе [3], достаточно близко к полученным в нашей работе.

Исследование тех же модулей для нанотрубок, содержащих в центре одну или несколько молекул водорода, показало, что эти модули совпадают в пределах точности с таковыми для недопированных нанотрубок.

Тот факт, что значения упругих модулей не меняется от наличия молекулярного водорода в нанотрубке, позволяет утверждать, что можно использовать анализ колебаний нанотрубок для оценки содержания водорода в нанотрубке, что очень важно, если нанотрубки найдут применение в водородной энергетике.

В работе проведено исследование низкочастотных колебаний отобранных нанотрубок. Было установлено, что частоты продольных (вдоль оси нанотрубки) колебаний не зависят от индексов киральности, в то время как для поперечных (инициированных изгибом нанотрубки) колебаний имеет место явная зависимость частоты от индексов киральности. Этот факт может послужить отправным пунктом для развития методов экспериментального определения индексов киральности нанотрубок.

То, что на спектрах потенциальной энергии присутствует частота комбинационных колебаний  $200 \text{ см}^{-1}$ , говорит о том, что методы молекулярной динамики позволяют проводить расчеты спектров комбинационного (рамановского) рассеяния на нанотрубках, по крайней мере, для низкочастотного участка.

### Литература

1. *Iijima S.* // *Nature*. 1991. Vol. 354. P. 56.
2. *Salvetat J. P., Andrew G. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* 1999. Vol. 82. P. 944.
3. *Hall A. R., An L. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* 2006. Vol. 96. P. 256102.
4. *Treacy M. M. J., Ebbesen T. W., Gibson J. M.* // *Nature*. 1996. Vol. 381. P. 678.
5. *Wong E. W., Seedan P. E., Lieber C. M.* // *Science*. 1997. Vol. 277. P. 1971.
6. *Iijima S., Brabec C. et al.* // *J.Chem.Phys.* 1996. Vol. 104. P. 2089.
7. *Yakobson B. I., Brabec C., Bernholc J.* // *Phys. Rev. Lett.* 1996. Vol. 76. P. 2511.
8. Елецкий А. В. // УФН. 2007. Vol. 177. P. 233.
9. *Brenner D. W.* // *Phys. Stat. Sol. B*. 2000. Vol. 217. P. 23.
10. *Brenner D. W., Shenderova O. A. et al.* // *J. Phys. Condens. Matter*. 2002. Vol. 14. P. 783.
11. *Tersoff J.* // *Phys. Rev. Lett.* 1988. Vol. 61. P. 2872.
12. *Brenner D. W.* // *Phys. Rev. B*. 1990. Vol. 42. P. 9458.
13. *Tadmor E. B., Smith, G. S. et al.* // *Phys. Rev. B*. 1999. Vol. 59. P. 235.
14. *Lennard-Jones J. E.* // *Proc. Physical Society*. 1931. Vol. 43. P. 461.
15. *Poncharal P. et al.* // *Science*. 1999. Vol. 283. P. 1513.
16. *Iijima S. et al.* // *J.Chem.Phys.* 2000. Vol. 104. P. 2089.
17. *Treacy M. M. J. et al.* // *Nature*. 1996. Vol. 381. P. 678.
18. *Wong W. E. et al.* // *Science*. 1997. Vol. 277. P. 1991.
19. *Srivastava D., Wei C., Cho K.* // *ASME*. 2003. Vol. 56. P. 215.
20. *Li C., Chou T-W.* // *Int. J. Solids Structures*. 2003. Vol. 40. P. 2487.
21. *Ming-Jun C., Ying-Chun L. et al.* // *Chinese Phys.* 2006. Vol. 15. P. 2676.
22. *Chen X., Cao G.* // *Nanotechnology*. 2006. Vol. 17. P. 1004.
23. Ястебов Н. Г., Иванов-Омский В. И., Кособукин В. А. // Письма в ЖЭТФ. 2004. Т. 30. С. 47.

### RESEARCH OF MECHANICAL PARAMETERS OF INDIVIDUAL CARBON NANOTUBES BY METHODS OF THE MOLECULAR DYNAMIC

**A. A. Khrutchinsky, A. L. Pushkarchuk, S. A. Kuten, S. Ja. Kilin\*,  
A. P. Nizovtsev\***

Elastic modules of nanotubes have been investigated by methods of the molecular dynamics. It has been shown, that the Young's modulus for undoped nanotubes of a different chirality lays in the range 1.23–1.38 TPa and slightly depends on their chirality and radius.

Bending stiffness and modulus for the investigated set of nanotubes lay in the ranges 0.135–0.264 eV um and 0.997–1.036 TPa, respectively. The torsion modulus for nanotubes of interest lays in the range 0.271–0.383 TPa showing a weak dependence on chirality indexes.

Low frequency oscillations of nanotubes under consideration has been carried out. It has been shown, that frequencies of longitudinal (along the nanotube axis) oscillations do not depend on chirality indexes, while for transversal (initiated by curving of a nanotube) oscillations a certain relation between the frequency and chirality indexes takes place. This fact can be a start point for development of experimental methods for the determination of the nanotube chirality indexes.

\* Institute of Physics, Minsk, Belarus.