

# ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК СТРУЧКОВОГО ТИПА НА МОЛЕКУЛЯРНО-МЕХАНИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

О.Е. Глухова

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН П-03 «Квантовая Макрофизика» (Подпрограмма № 2 «Влияние атомно-кристаллической и электронной структуры на свойства конденсированных сред») и гранта РФФИ (проект № 07-02-00852а).

Разработана молекулярно-механическая модель углеродных нанотрубок с нерегулярной структурой, позволяющая рассчитывать атомное строение каркаса (погрешность менее 3%), параметры упругости и прочности (погрешность не превышает 10% по сравнению с имеющимися экспериментальными данными). Установлено, углеродные однослойные нанотрубки стручкового типа обладают повышенными упругостью и прочностью: модуль Юнга нанотрубок, заполненных фуллеренами, превышает на 12% модуль Юнга идентичных полых нанотрубок, а коэффициент прочности – на 21 %. Подобные структуры можно характеризовать тенденцией *быть прямыми*, наблюдающейся у многослойных нанотрубок.

Масштабы применения углеродных нанотрубок увеличиваются по мере расширения круга знаний об этих уникальных нанообъектах. В настоящее время активно ведется поиск областей применения дефектных нанотрубок с нерегулярной структурой [1-7]. Нерегулярность обусловлена краевыми эффектами, изменением топологии атомного каркаса вдоль оси, возможными локальными дефектами остова (изомеризация с поворотом C-C связи на 90° [5, 8], элиминирование нескольких атомов углерода [5, 9, 10], допирование атомами углерода или других химических элементов [5, 11] и др.) и деформацией каркаса. Причинами последней могут быть прогиб, закручивание, растяжение/сжатие [12, 13], наличие внутренних перемычек (бамбукоподобная структура [14, 15]), заполнение внутренней полости фуллеренами (стручковая структура [16]), синтез полимеров в полости нанотрубки [17] и др.

Цель данной работы – теоретическое исследование механических свойств углеродных нанотрубок стручкового типа.

На сегодняшний день многоатомные углеродные нанотрубки с нерегулярной структурой изучаются на полуэмпирических либо на молекулярно-механических моделях, позволяющих с удовлетворительной точностью рассчитывать геометрию каркаса и моделировать некоторые физические процессы в наноструктурах, протекающие под действием внешних сил (деформирующих сил, внешних электромагнитных полей и др.). В данной работе исследования геометрии каркаса и механических свойств (упругой деформации растяжения/сжатия, прочности на изгиб) проводятся на оригинальной, разработанной авторами, эмпирической модели.

### **1. Молекулярно-механическая модель углеродной нанотрубки: расчет модуля Юнга многоатомных нерегулярных нанокластеров**

Эмпирическая, или молекулярно-механическая, модель определяет полную энергию углеродной тубулярной наноструктуры как многочлен, каждая составляющая которого имеет свой весовой коэффициент, задающийся в результате обработки экспериментальных данных. Нами взята за основу модель валентного силового поля с учетом взаимодействия Ван-дер-Ваальса несвязанных атомов:

$$E = \sum K_r (r - r_0)^2 + \sum K_\theta (\theta - \theta_0)^2 + \sum \left( \frac{K_a}{r^{12}} - \frac{K_b}{r^6} \right). \quad (1)$$

Здесь первое слагаемое учитывает изменение длин связей в наноструктуре по отношению к длине связи в графите ( $r_0 = 1.42 \text{ \AA}$ ), второе – изменение углов между связями по отношению к углу между связями в графите ( $\theta_0 = 120^\circ$ ), а третье – взаимодействие Ван-дер-Ваальса (потенциал Леннарда – Джонса);  $K_r$ ,  $K_\theta$ ,  $K_a$ ,  $K_b$  – весовые коэффициенты. Такой способ задания полной энергии углеродных тубулярных наноструктур был выбран, как один из наиболее оптимальных. Известно, чем сложнее вид многочлена, задающего полную энергию, тем больше неизвестных весовых коэффициентов и, как следствие, тем сложнее и неоднозначнее будет процесс параметризации модели (поиск весовых коэффициентов).

Весовые коэффициенты были найдены как решения минимаксной задачи с ограничениями в следующей постановке:

$$\min_{\mathbf{A}} \max S(\mathbf{A}), \quad \text{где } S(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^3 |r_i - r_i^0|. \quad (2)$$

Здесь  $\{r_i\}$  – множество C-C длин связей,  $\{r_i^0\}$  – множество известных (расчетных или экспериментальных) значений,  $\mathbf{A} = (K_r, K_\theta, K_a, K_b)$  – вектор варьируемых параметров. Для нахождения глобального минимума для каждого набора  $(K_r, K_\theta, K_a, K_b)$  строилась по-

верхность целевой функции и соответственно ее профилю смещалась базисная точка. Множество  $\{r_i\}$  находилось минимизацией полной энергии (1) нанотрубки по координатам всех атомов.

Решение минимаксной задачи явилось наиболее трудоемким этапом: оно потребовало больших затрат ресурсов компьютера, поскольку глобальный минимум энергии (1) (для одного набора варьируемых параметров) достигался выполнением нескольких тысяч итераций, каждая из которых соответствовала поиску минимума около базисной точки. Разработанная молекулярно-механическая модель реализована в программно-вычислительном пакете RING-MD.

В созданном пакете RING-MD минимизация энергии осуществляется молекулярно-динамическим методом в реальном времени. За квант времени принята одна фемтосекунда. На каждом шаге вычисляется сила, действующая на каждый атом. Она рассчитывается под условием, что энергетическая поверхность в окрестности атома меняется линейно и вычисляется из разницы значений энергии атома при его сдвиге из текущего положения вдоль координатных осей. Например, из разницы энергий  $E(\dots, x+\Delta x, \dots)$  и  $E(\dots, x-\Delta x, \dots)$  ( $\Delta x$  – сдвиг по оси X) вычисляется проекция силы на ось X:

$$F_x = (E(x - \Delta x) - E(x + \Delta x)) / (2 \cdot \Delta x). \quad (3)$$

Параметр  $\Delta x$  – достаточно мал по сравнению с характерным размером системы (для нанокластера характерным размером считаем  $1 \text{ \AA}$ ). Заметим, что величина  $\Delta x$  не должна выбираться слишком малой, поскольку в этом случае энергия системы меняется столь незначительно, что из-за конечной разрядной сетки вычислительной техники точность вычислений снижается. Также нельзя выбирать параметр сдвига слишком большим, так как в этом случае точность расчетов также будет снижаться вследствие нелинейности энергетической поверхности. В результате тщательного исследования корреляции точности расчетов с параметром  $\Delta x$  нами принята величина сдвига  $10^{-4}$  от характерного размера. Изменение конфигурации нанообъекта (под действием сил) на данном шаге определяется в результате решения уравнений Ньютона. На следующем шаге процесс повторяется.

Для сокращения времени расчета оптимальной конфигурации наноструктуры в пакете RING-MD применяется следующее. При изменении положения данного атома пересчитываются не все межатомные расстояния структуры, поскольку всегда существует некоторая группа пар атомов с сохранившимися длинами связей. Таким образом, при вычислении силы, а точнее, при вычислении изменения энергии в результате сдвига атома, учитываются только те энергетические составляющие в выражении (1), на которые влияет изменение положения данного атома. Так вычисляются силы, действующие на все атомы

системы. Такой алгоритм расчета полной энергии (1) работает при последовательном сдвиге атомов наноструктуры, позволяя сократить время на оптимизацию ее геометрического строения в 1.5-2 раза.

Эволюция углеродной тубулярной наноструктуры во времени рассчитывается в результате решения уравнений движения для всех атомов. Уравнения решаются методами численного интегрирования. В результате находятся состояния моделируемой системы в разные моменты времени с заданным шагом  $10^{-15}$  с. Вычисляя для каждого состояния силы, действующие на атомы системы, получаем координаты и скорости всех ее элементов в следующий момент времени. Однако, если в системе отсутствует трение, то результатом будет бесконечное движение (без смещения всей системы в пространстве) всех атомов и постоянная во времени полная энергия, что позволяет исследовать колебания нанообъекта, но не дает информации о конфигурации его каркаса, соответствующей основному состоянию. Если же ввести трение, то полная энергия совокупности атомов будет уменьшаться во времени, и система будет стремиться к энергетически наиболее выгодному состоянию.

В пакете RING-MD трение моделируется так. Вводится дополнительная величина, будем называть ее *коэффициентом трения*, которая может принимать значения от 0 до 1. На каждом шаге по времени атом теряет часть своей скорости, равную введенному коэффициенту трения. Таким образом, при нулевом значении этого коэффициента трение отсутствует, а при значении равном единице скорости всех атомов обнуляются, т.е. на каждом шаге по времени теряется 100% скорости. При наличии трения конфигурация системы со временем стабилизируется около равновесного состояния, отвечающего глобальному минимуму энергии.

В результате решения минимаксной задачи (2) получены следующие значения весовых коэффициентов:

$$K_r = 3.25 \cdot 10^2 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2}, K_\theta = 4.4 \cdot 10^{-19} \frac{\text{Дж}}{\text{рад}^2}, K_a = 4.0 \cdot 10^{-139} \frac{\text{Дж}}{\text{м}^{12}}, K_b = 1.5 \cdot 10^{-80} \frac{\text{Дж}}{\text{м}^6}. \quad (4)$$

В таблице 1 приведены диаметры некоторых нанотрубок, измеренные и рассчитанные. Для сравнения указаны значения диаметра, вычисленные по известной формуле радиуса модели нанотрубки  $R = a \sqrt{3(n^2 + m^2 + nm)} / \pi$  ( $a = 1.42 \text{ \AA}$ ) [6], полученной сворачиванием графена (будем называть такую модель нанотрубки *графеновой*), и рассчитанные на молекулярно-механической модели с помощью пакета RING-MD с силовыми коэффициентами (4).

Таблица 1

### Диаметры нанотрубок, измеренные и рассчитанные

Трубка	Расчет для графеновой модели	Экспериментальные данные	Расчет с помощью RING-MD	Теоретический расчет (полуэмпирические модели, <i>ab initio</i> )
(4,0)	0.313 нм	0.33 нм [18]	0.336 нм	0.334 нм [5], 0.317 [22]
(5,5)	0.678	–	0.685	0.69 [20], 0.686 [22]
(8,8)	1.085	–	1.092	1.098 [22]
(10,10)	1.356	1.36 [19]	1.360	1.37 [22]
(17,0)	1.331	1.35 [21]	1.337	1.374 [22]
(18,0)	1.409	1.43 [21]	1.422	1.427 [22]

Из приведенных данных видно: во-первых, пакет RING-MD рассчитывает атомную структуру нанотрубки с удовлетворительной точностью (погрешность составляет менее 3%) и, во-вторых, диаметр нанотрубки больше рассчитанного на ее графеновой модели. Объяснить последнее можно нерегулярностью тубулярной наноструктуры, в частности (если отсутствуют деформации, дефекты), краевым эффектом.

Известно, на эмпирической модели можно исследовать механические свойства многоатомных (до нескольких тысяч атомов) тубулярных наноструктур, в том числе нерегулярных. Для апробации разработанных молекулярно-механической модели и пакета RING-MD в изучении механических свойств рассчитаны модули Юнга шести углеродных нанотрубок различного диаметра, длины, киральности и сравнены с экспериментальными значениями.

Алгоритм расчета модуля Юнга в пакете RING-MD имеет следующий вид.

1. Рассчитывается конфигурация каркаса нанобъекта, соответствующая основному состоянию, и полная энергия.
2. Длина каркаса нанобъекта увеличивается/уменьшается на 1 % (упругая деформация), фиксируется и снова рассчитывается его атомная структура, соответствующая минимальному значению полной энергии (1).
3. Вычисляется модуль Юнга:

$$Y = \frac{F}{S} \cdot \frac{L}{\Delta L} \quad (5)$$

Здесь  $F$  – сила растяжения/сжатия нанокластера, которая вычисляется по величине энергии упругой деформации  $\Delta E$ :  $\Delta E = F \cdot \Delta L / 2$ ;  $L$  – длина недеформированного каркаса,  $\Delta L$  – удлинение каркаса;  $S$  – площадь поперечного сечения кольца шириной 3,4 Å (расстояние между слоями в графите), содержащего периметр остова.

В таблице 2 приведены результаты расчетов модуля Юнга для двух типов однослойных трубок: zigzag (14,0), (19,0) и armchair (8,8), (11,11). Типы трубок выбраны так, чтобы

их длина и диаметр совпадали с соответствующими размерами однослойных индивидуальных нанотрубок, для которых известны экспериментальные значения модуля Юнга [23]. Других экспериментальных данных для однослойных индивидуальных трубок (с известными длиной и диаметром) на настоящий момент нет, поскольку в большинстве случаев модуль Юнга измеряется не для индивидуальных трубок, а для жгутов из них (в этом случае для модуля Юнга указывается интервал 0.3-1.4 ТПа) [19]. Привести аналогичные данные, полученные на других моделях не представляется возможным: методы *ab initio* и полуэмпирические позволяют изучать только структуры с числом атомов до тысячи. Вычисления модуля Юнга на альтернативных эмпирических моделях дают следующие результаты: [24] – для трубки диаметром 1.10 нм – 1.3 ТПа, 1.50 нм – 1.0 ТПа (длина не учитывалась); [25] – 0.97 ТПа независимо от киральности и диаметра трубки (трубки считаются протяженными).

Таблица 2

Модуль Юнга однослойных индивидуальных нанотрубок

Эксперимент			Расчет с помощью RING-MD			
Диаметр, нм	Длина, нм	Модуль Юнга [23 ], ТПа	Тип трубки – число атомов	Диаметр, нм	Длина, нм	Модуль Юнга, ТПа
1.12	23.4	1.02 ± 0.3	(8,8) – 3072	1,09	23,45	0.82
			(14,0) – 3108	1.10	23,46	0.92
1.52	24.3	1.20 ± 0.2	(11,11) – 4378	1.50	24.3	0.90
			(19,0) – 4308	1.50	24.34	1.0
1.50	36.8	1.33 ± 0.2	(11,11) – 6600	1.50	36.77	1.1
			(19,0) – 6612	1.50	36.91	1.2

Результаты расчетов дают основание утверждать, что разработанные молекулярно-механическая модель и пакет RING-MD могут быть использованы в исследованиях механических свойств однослойных нанотрубок с нерегулярной структурой. Модуль Юнга вычисляется верно: с ростом диаметра модуль Юнга увеличивается, погрешность вычислений по сравнению с экспериментом [23] менее 10 %. Погрешность альтернативных теоретических расчетов [24] также не превышает 10 %, но с увеличением диаметра трубки модуль Юнга уменьшается вместо его роста. Расчет на эмпирической модели жестких связей [25] определяет модуль Юнга, как постоянную величину.

## 2. Механические свойства углеродных нанотрубок стручкового типа (упругая деформация растяжения/сжатия, прочность на изгиб)

В качестве модели нанотрубки стручкового типа рассмотрена трубка (8,8), заполненная 34 фуллеренами C<sub>20</sub> (рис.1а). В свободном состоянии молекулы C<sub>20</sub> нестабильны,

но в поле удерживающего потенциала трубки они пребывают в равновесном состоянии [26]. Теплота образования структуры  $34C_{20}@ (8,8)$  равна  $-1067$  ккал/моль. Молекулы  $C_{20}$  дистанцированы от стенок трубки на расстояние  $d_{C_{20}-tube} = 3.45 \text{ \AA}$  и центрируются на оси трубки с шагом  $d_{C_{20}-tube} = 6.32 \text{ \AA}$  (рис.1б).

Однослойные нанотрубки стручкового типа исследуются на растяжение/сжатие по алгоритму, приведенному в п.1. Модуль Юнга наностручка  $34C_{20}@ (8,8)$ , содержащего 3752 атома, равен 0.93 ТПа, что на 12 % превышает модуль Юнга полый трубки (8,8). Здесь надо отметить, что нами в качестве площади  $S$  в (5) по-прежнему берется площадь поперечного сечения кольца шириной  $3.4 \text{ \AA}$ , поскольку края трубки свободны и давление извне будет приходиться именно на них.

Наравне с упругостью важной характеристикой нанотрубок при конструировании на их основе элементов устройств электроники являются прочность. Экспериментально прочность нанотрубок измеряется следующим образом. К жгутам из нанотрубок, подвешенным между двумя стойками, прикладывается механическая нагрузка с помощью иглы атомного силового микроскопа. В результате устанавливается связь между нагрузкой  $F$  и стрелой прогиба  $\delta$  [27]: для жгутов из полых однослойных нанотрубок эта связь линейная до некоторой величины прикладываемой силы. Нами процесс измерения прочности однослойных трубок (8,8) и  $34C_{20}@ (8,8)$  симитирован с помощью пакета RING-MD и рассчитана зависимость  $\delta - F$  на молекулярно-механической модели.

На рис.2 показана нанотрубка, заполненная фуллеренами, изгиб которой составляет 35 градусов. Приложенная сила равна 4.46 нН, стрела прогиба – 1.75 нм. Исследование прочности трубки проводилось постепенным увеличением прогиба нанотрубки (увеличивался угол изгиба) и расчетом требуемой для этого силы  $F$ . Максимальный изгиб составил 40 градусов. Фрагменты концов нанотрубки, удерживающие ее на опорах (группа атомов, обеспечивающих соприкосновение трубки с опорами) фиксируются. На каждом шаге прогиба трубки ее структура оптимизируется минимизацией энергии (1). Сила, требуемая для прогиба, рассчитывается по энергии деформации  $\Delta E = F \cdot \Delta L / 2$  ( $\Delta L$  - изменение длины, характеризующее растяжение/сжатие поверхности трубки при изгибе). На рис. 3 приведен график, демонстрирующий линейное возрастание силы  $F$  с увеличением смещения  $\delta$  центральной части трубки относительно исходного состояния (рис.2). Аналогично было проведено измерение прочности модели полый нанотрубки (8,8). График  $\delta - F$  так же приведен на рис.3.

Характеризовать прочность нанотрубок удобно с помощью коэффициента

$$k = \frac{F}{\delta} \quad (6),$$

имеющего размерность Н/м коэффициента жесткости в законе Гука. Для полый нанотрубки, как следует из графика на рис.3,  $k = 2.8$  Н/м, для заполненной фуллеренами  $C_{20}$  –  $k = 3.4$  Н/м. Этот коэффициент, имеющий прочностной смысл, также может выступать как форм фактор наноструктуры. Действительно, если провести аналогию с классической механикой, коэффициент пропорциональности между силой и стрелой прогиба определяется модулем Юнга, длиной и моментом инерции поперечного сечения трубки [28]. Однако, для наноструктур все перечисленные параметры либо неизвестны вовсе, как момент инерции поперечного сечения трубки, либо измерены с погрешностью, либо рассчитаны на тех или иных моделях с некоторыми упрощениями. Поэтому введенный нами *коэффициент прочности*  $k$  имеет большое преимущество, поскольку для его расчета требуются только результаты физического или численного эксперимента, даже без уточнения структуры каркаса нанотрубки, ее киральности, способа заполнения полости.

### **Выводы**

1. Углеродные однослойные нанотрубки стручкового типа обладают повышенными упругостью и прочностью: модуль Юнга нанотрубок, заполненных фуллеренами, превышает на 12% модуль Юнга идентичных полых нанотрубок, а коэффициент прочности – на 21 %. Нанотрубки стручкового типа предпочтительнее полых нанотрубок в тех наноустройствах, где требуются более жесткие тубулярные наноструктуры.
2. Углеродные однослойные нанотрубки стручкового типа можно характеризовать тенденцией *быть прямыми*. На данный момент известно, что прямолинейная конфигурация в пространстве присуща многослойным трубкам (поэтому в качестве игл микроскопов используются именно они), а однослойные с диаметром  $\sim 1$  нм, как правило, изогнуты [6]. Можно предположить, что введение в полость однослойных нанотрубок фуллеренов сделает их заменителями многослойный прямых трубок и расширит область применения наностручков в зондовой микроскопии и электронике.

### **Литература**

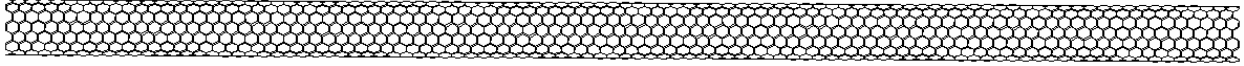
1. Глухова О.Е. Функциональные наноустройства на основе наночастицы  $C_{60}@C_{450}$ // Нано- и микросистемная техника. – 2007. – № 3. – С.52-57.

2. Глухова О.Е., Мещанов В.П., Салий И.Н. Функциональные наноустройства на базе углеродных гибридных соединений // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. – 2007. – Т.10. – № 2. – С.71-75.
3. Запороцкова И.В. Новые возможности и перспективы функционализации нанотруб. Труды V российско-японского семинара «Оборудование, технологии и аналитические системы для материаловедения, микро- и нанoeлектроники». Москва, 2007. Изд-во МИСиС. Том 1. С. 285-302.
4. О.Е. Глухова, Н.И.Синицын, Г.В.Торгашов, О.А.Терентьев, З.И.Буянова Углеродные нанотрубки с дефектами как элементы электронных устройств. Труды V российско-японского семинара «Оборудование, технологии и аналитические системы для материаловедения, микро- и нанoeлектроники». Москва. 2007. Изд-во МИСиС. Том 1. С. 373-380.
5. Терентьев О.А. Атомная структура и эмиссионная способность нерегулярных углеродных тубулярных нанокластеров. Канд. дис. Саратовский ун-т, Саратов. 2007. 151 с.
6. Харрис П. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века. Техносфера, М. 2003. 336 с.
7. О.Е. Глухова, О.А. Терентьев "Конструирование наноустройств на углеродных нанотрубках с локальными дефектами остова". Сб. науч. тр. Российской школы-конференции молодых ученых и преподавателей «Биосовместимые наноструктурные материалы и покрытия медицинского назначения». Изд-во Белгород. унив-та. 2006. С. 119-122.
8. Ding Feng Theoretical study of the stability of defects in single-walled carbon nanotubes as a function of their distance from the nanotube end // Physical Review B. –2005. – V.72. – № 24. – P. 245409(7).
9. Kotakoski J., Krasheninnikov A.V., and Nordlund K. Energetics, structure, and long-range interaction of vacancy-type defects in carbon nanotubes: Atomistic simulations // Physical Review B. –2006. – V.74. – № 24. – P. 245420(5).
10. Глухова О.Е., Жбанов А.И. Равновесное состояние нанокластеров C<sub>60</sub>, C<sub>70</sub>, C<sub>72</sub> и локальные дефекты молекулярного остова // Физика твердого тела.–2003.– Т.45. – № 1.–С.180-186.
11. Sternberg M., Curtiss L. A., Gruen D. M., Kedziora G., Horner D. A., Redfern P.C., and Zapol P. Carbon Ad-Dimer Defects in Carbon Nanotubes // Physical Review Letters. – 2006. – V.96. – № 7. – P. 075506(4).

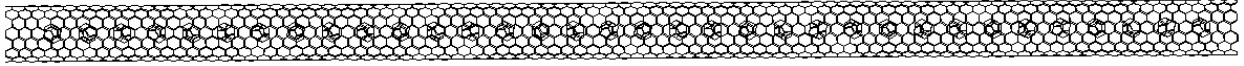
12. Глухова О.Е., Терентьев О.А. "Теоретическое изучение зависимостей модулей Юнга и кручения тонких однослойных углеродных нанотрубок zigzag и armchair от геометрических параметров" // Физика твердого тела. – 2006. – Т. 48. – № 7. – С. 1329-1335.
13. Belova E., Chernozatonskii L. A. Mechanical properties of carbon nanotube bough junctions: A theoretical study // Physical Review B. –2007. – V.75. – № 4. – P. 073412(7).
14. Chen J., Li Y., Ma Y., Qin Y., Chang L. Formation of bamboo-shaped carbon filaments and dependence of their morphology on catalyst composition and reaction conditions // Carbon. – 2001. – V.39. –P.1467–1475.
15. Глухова О.Е., Колесникова А.С. Теоретическое изучение электронной структуры и механических свойств нанотрубок типа “бамбук”. Сборник материалов научной школы-конференции «Нелинейные дни в Саратове для молодых». Саратов: РИО журналов «Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика». 2007. С. 69 -71.
16. Pichler T., Liu X., Knupfer M. and Fink J. Electronic properties of intercalated single-wall carbon nanotubes and C<sub>60</sub> peapods New Journal of Physics. – 2003. –V. 5. –P.156.1–156.23.
17. О.Е. Глухова Функциональные наноустройства на базе углеродных кластеров. Сб. науч. тр. Российской школы-конференции молодых ученых и преподавателей «Биосовместимые наноструктурные материалы и покрытия медицинского назначения». Изд-во Белгород. госуниверситета. 2006. С. 112-118.
18. Sano N., Chhowalla M., Roy D., and Amaratunga G. A. J. Viability of sub-0.4-nm diameter carbon nanotubes // Physical Review B. –2002. – V.66. – № 11. – P. 113403(4).
19. Yu Min-Feng, Files Bradley S., Arepalli Sivaram, and Ruoff Rodney S. Tensile Loading of Ropes of SingleWall Carbon Nanotubes and their Mechanical Properties // Physical Review Letters. –2006. – V.84. – № 24. – P. 5552(4)
20. Barajas-Barraza R. E. and Guirado-Lo'pez R. A. Clustering of H<sub>2</sub> molecules encapsulated in fullerene structures // Physical Review B. –2002. – V.66. – № 15. – P. 155426(12).
21. Hirahara K., Bandow S., Suenaga K., Kato H., Okazaki T., Shinohara H., and Iijima S. Electron diffraction study of one-dimensional crystals of fullerenes // Physical Review B. – 2001. – V.64. – № 11. – P. 115420(5).
22. Verberck B. and Michel K. H. Nanotube field of C<sub>60</sub> molecules in carbon nanotubes: Atomistic versus continuous approach // Physical Review B. –2006. – V.74. – № 4. – P. 045421 (14).

23. Krishnan A., Dujardin E., Ebbesen T. W., Yianilos P. N. and J. Treacy M. M. Young's modulus of single-walled nanotubes // *Physical Review B*. –1998. – V.58. – № 20. – P. 14013 (7).
24. Shen Lianxi and Li Jackie Transversely isotropic elastic properties of single-walled carbon nanotubes // *Physical Review B*. –2004. – V.69. – № 4. – P. 045414(10).
25. Lu Jian Ping Elastic Properties of Carbon Nanotubes and Nanoropes // *Physical Review Letters*. –1997. – V.79. – № 7. – P. 1297(4).
26. Глухова О.Е., Жбанов А.И., Резков А.Г. Вращение внутренней оболочки наночастицы  $C_{20}@C_{80}$  // *Физика твердого тела*. – 2005. – Т. 47. –Вып. 2. – С.376-382.
27. Дьячков П.Н. Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применение / Дьячков П.Н. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2006. – 293 с.
28. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Механика. М.: 1979. – 520 с.

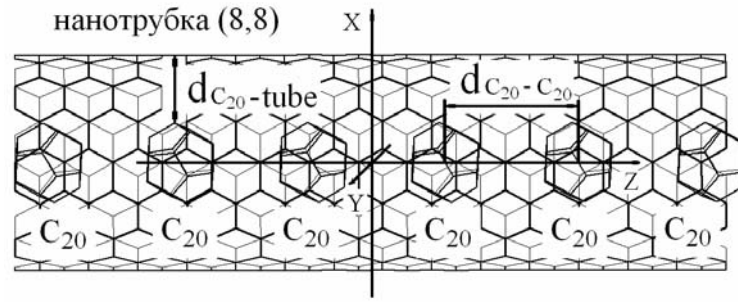
нанотрубка (8,8)



нанотрубка (8,8) с инкапсулированными фуллеренами  $C_{20}$  (34 молекулы фуллера)



а



б

Рис. 1. Нанотрубка (8,8): а) полая нанотрубка и заполненная фуллеренами  $C_{20}$ ; б) фрагмент нанотрубки стручкового типа

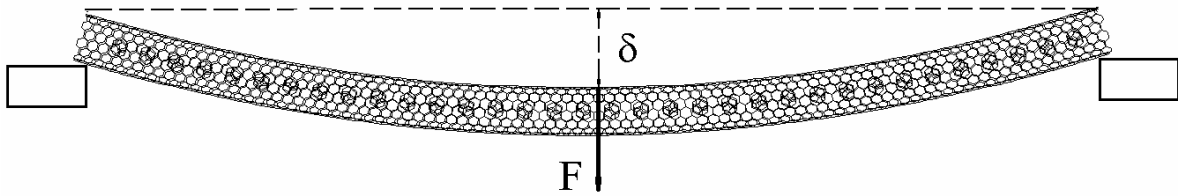


Рис. 2. Прогиб нанотрубки (8,8) стручкового типа, закрепленной на двух опорах, под действием силы  $F$  ( $\delta$  – смещение от положения равновесия)

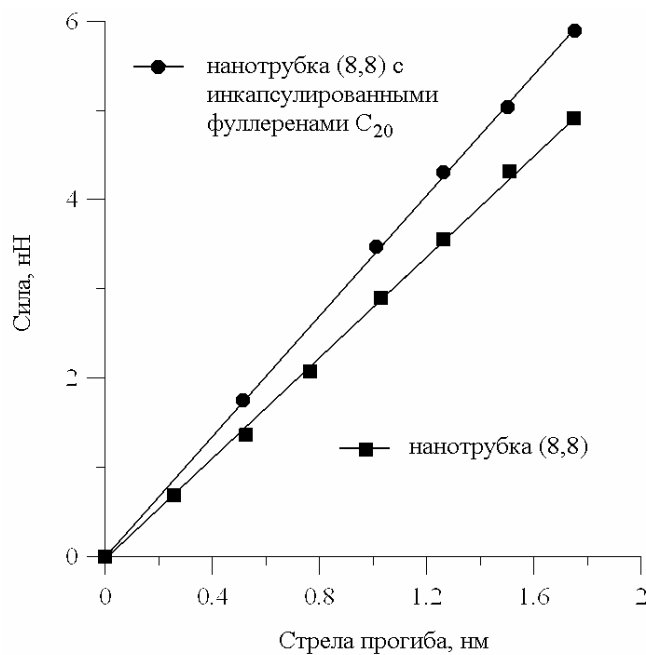


Рис. 3. Изменение силы, необходимой для прогиба нанотрубки, с увеличением стрелы прогиба