

Теоретическое изучение зависимостей модулей Юнга и кручения тонких однослойных углеродных нанотрубок типа zigzag и armchair от геометрических параметров

© О.Е. Глухова, О.А. Терентьев

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского,
410601 Саратов, Россия

E-mail: GlukhovaOE@info.sgu.ru

(Поступила в Редакцию 15 июля 2005 г.)

В окончательной редакции 28 октября 2005 г.)

Проведены теоретические исследования модулей Юнга и кручения однослойных углеродных нанотрубок $(m, 0)$ и (m, m) . Показана зависимость обоих модулей от киральности трубки, диаметра и длины. Впервые установлено, что модуль кручения увеличивается с ростом диаметра и уменьшается с ростом длины. Анализ соотношений между диаметром и длиной показал, что модули Юнга и кручения трубок стремятся к насыщению при отношении диаметра к длине ~ 0.3 . Значения модулей кручения, рассчитанных через найденный нами модуль Юнга и через энергию деформации, не совпадают, что можно объяснить влиянием незамкнутых связей на открытых концах трубок. Расчеты энергетике осуществлялись по полуэмпирической схеме сильной связи Харрисона в модификации Гудвина.

PACS: 62.20.Dc, 61.48.+c

Уникальная механическая прочность в сочетании в ажурном строении и необыкновенной легкостью предопределяет использование углеродных нанотрубок (УНТ) в композиционных материалах и стимулирует экспериментальные и теоретические исследования их упругих свойств. По амплитуде колебаний изолированных УНТ, фиксируемой с помощью просвечивающего электронного микроскопа, было получено среднее значение модуля Юнга многослойных и однослойных (диаметром 1.0–1.5 nm) УНТ: $\bar{Y} = 1.8$ [1] и $\bar{Y} = 1.25_{-0.35}^{+0.45}$ TPa [2] соответственно. В экспериментальной работе [3] многослойная УНТ укреплялась на подложке литографическим способом, а сила прикладывалась и измерялась на различных расстояниях от точки крепления иглой атомного силового микроскопа (АСМ). При этом для трубок диаметром 26–76 nm значение модуля Юнга составило 1.28 ± 0.59 TPa. В [4] упругие свойства однослойных УНТ исследовались также с помощью АСМ, но по прогибу трубок, пропущенных через мембрану и подвешенных в порах.

Теоретические исследования упругости УНТ ведутся в основном с применением к УНТ континуальной модели, поскольку рассматриваются достаточно протяженные трубки. Этот подход является справедливым для идеальных (физически и химически однородных по всей длине) трубок. В этом случае с успехом применяются полуэмпирические [5] и эмпирические модели [6], а также метод молекулярной динамики [7–10], объектом исследования которых является сегмент трубки, состоящий из двух атомов. Зачастую при этом не учитывается кривизна цилиндрического каркаса трубки (расчеты проводятся для планарной структуры, т.е. плоского графитового листа), а влияние конечности размеров трубки (красные эффекты), как правило, вовсе не принимается во внимание.

Общность выводов экспериментальных и теоретических расчетов заключается в большом разбросе значений модуля Юнга: для однослойных — от ~ 0.9 [6,11] до ~ 5.5 TPa [5,12], для многослойных — от 1.01 [6] до 1.24 [13] TPa. Выводы о зависимости упругих свойств УНТ от диаметра и киральности также противоречивы: одни авторы отмечают „нечувствительность“ модуля Юнга к диаметру трубки и киральности [6,5], а другие демонстрируют как увеличение модуля Юнга с ростом диаметра при фиксированной длине УНТ [13], так и, наоборот, его уменьшение [5]. Это свидетельствует о необходимости совершенствования методом изучения упругости УНТ, необходимости учета особенностей электронной структуры УНТ разного диаметра d и длины L трубок, а также влияния открытых концов. Например, у одноосных УНТ, адсорбированных на подложке, атомная и электронная структура будут во многом определяться диаметром. Трубки диаметром 1.35 nm и больше испытывают радиальную деформацию. Их поперечное сечение отличается в большей или меньшей мере от круглого вследствие ван-дер-ваальсового взаимодействия с подложкой [14]. Для многослойных УНТ в подобных условиях деформация каркаса будет определяться еще и количеством слоев [14]. Радиальная деформация влечет за собой, возможно, как изменение упругих и других физических свойств трубок, так и появление в каркасе дефектов механического характера (изомеризация, пустоты в клетке вследствие потери одного или группы атомов) [7]. Но эти особенности трубок большого диаметра в работах [5–10] не упоминаются и, видимо, не учитываются. Также не исследуется влияние продольного размера УНТ на упругие свойства, хотя известно, что величину длины в том числе задает безразмерный параметр d/L , определяющий применимость континуальной модели для трубок. Условием воз-

возможности применения последней является неравенство $d/L < 0.1$ [15].

В настоящей работе представлены результаты теоретического изучения упругих свойств тонких однослойных УНТ ($d/L = 0.17 \dots 0.42$) типа zigzag и armchair по их квантовой модели. Диаметр не превышает 1 nm, поэтому взаимодействие нанотрубки с подложкой нами не учитывается. Длина трубки меняется, увеличиваясь от $2d$ до $3-4d$. Рассчитаны некоторые параметры упругости (модуль Юнга, коэффициент Пуассона и модуль кручения) трубок и исследована их зависимость от геометрических размеров. Учтено влияние регбридизации σ - и π -электронов каркаса и неспаренных электронов открытых концов на электронную структуру и, как следствие, на механические свойства УНТ.

1. Квантовая модель УНТ и методика расчета модулей упругости

Для изучения механических свойств тонких трубок разной длины нами используется их квантовая модель [16], апробированная при изучении атомной и электронной структуры УНТ [16] и наночастиц [17]. Континуальная модель не может применяться в связи с конечными продольными размерами трубок, метод молекулярной динамики нечувствителен к перераспределению электронной плотности (что наблюдается на атомах кромки открытых концов трубок [18]), методы *ab initio* не позволяют рассчитывать энергетику незамкнутых структур.

В основе применяемой при расчете квантовой модели — схема Харрисона, позволяющая строить гамильтониан в реальном пространстве в базисе $2s$ - и $2p$ -орбиталей атома углерода. Расчеты не требуют больших затрат ресурсов компьютера в отличие от метода *ab initio* и обеспечивают результаты, достаточно хорошо согласующиеся с экспериментальными. Волновые функции валентных электронов различных атомов приближенно считаются не перекрывающимися. Энергия нанотрубки равна сумме энергии заполненных электронных уровней (E_{bond}) и феноменологической энергии (E_{rep}).

Феноменологическая энергия, учитывающая межэлектронное и межъядерное взаимодействия, представляется суммой парных отталкивающих потенциалов

$$E_{\text{rep}} = \sum_{i < j} V_{\text{rep}}(|r_i - r_j|), \quad (1)$$

где i, j — номера взаимодействующих атомов; r_i, r_j — декартовы координаты; функция V_{rep} определяется выражением [19]

$$V_{\text{rep}}(r) = V_{\text{rep}}^0 \left(\frac{1.54}{r} \right)^{4.455} \times \exp \left\{ 4.455 \left[- \left(\frac{r}{2.32} \right)^{22} + \left(\frac{1.54}{2.32} \right)^{22} \right] \right\}, \quad (2)$$

$V_{\text{rep}}(r) = 10.92 \text{ eV}$. Энергии заполненных уровней являются собственными значениями гамильтониана, матричные недиагональные элементы которого задаются в виде

$$V_{ij\alpha}(r) = V_{ij\alpha}^0 \left(\frac{1.54}{r} \right)^{2.796} \times \exp \left\{ 2.796 \left[- \left(\frac{r}{2.32} \right)^{22} + \left(\frac{1.54}{2.32} \right)^{22} \right] \right\}, \quad (3)$$

где r — расстояние между атомами; i, j — орбитальные моменты волновых функций; α — индекс, указывающий тип связи (α или π). Диагональные элементы суть атомные термы $\varepsilon_s, \varepsilon_p$. Их значения и величины $V_{ss\sigma}^0, V_{sp\sigma}^0, V_{pp\sigma}^0, V_{pp\pi}^0$ приведены в [16]. Они получены нами именно для расчета электронной структуры углеродных кластеров и обеспечивают хорошее согласие с экспериментальными данными при расчете длин связей и энергетики фуллеренов и нанотрубок [16,17].

Расчет модулей упругости для УНТ осуществляется по следующей схеме.

1) Генерация атомной структуры трубки (расчет координат атомов) заданной киральности. Атомная структура, соответствующая данному состоянию УНТ, выявляется минимизацией энергии трубки по характерным линейным параметрам каркаса. Таким образом, нами вычисляется длина L и полная энергия нанотрубки в исходном (основном) состоянии. Таким образом, для недеформированной трубки мы полагаем длины связи неодинаковыми, поскольку для тонких трубок большая кривизна поверхности может привести к отклонению от исходной топологии графитового слоя.

2) Расчет модуля Юнга и коэффициента Пуассона. Длина нанотрубки увеличивается (или уменьшается) и фиксируется. По необходимым линейным параметрам снова оптимизируется геометрическая структура остова и вычисляется энергия вытянутой (или сжатой) нанотрубки. Рассчитывается модуль Юнга

$$Y = \frac{F L}{S \Delta L}, \quad (4)$$

где ΔL — удлинение трубки; F — сила, необходимая для растяжения (или сжатия) трубки, определяемая формулой

$$F = \frac{2\Delta E}{\Delta L}, \quad (5)$$

ΔE — энергия упругого растяжения (сжатия), S — площадь поперечного сечения кольца шириной 3.4 \AA (расстояние между слоями в графите), содержащего периметр нанотрубки [13]. Для нанотрубок малого радиуса (менее 1.7 \AA) мы используем кольцо той же ширины, считая это приближение параметризацией, а не реальной характеристикой трубки. Более оправданным с точки зрения строения остова было бы использование вместо площади кольца-основания нанотрубки ее периметра [9,13] и вычисление соответственно псевдомодуля Юнга

$$Y_P = \frac{F L}{P \Delta L}, \quad (6)$$

где P — периметр нанотрубки.

На основе имеющихся данных о растяжении (сжатии) УНТ вычисляется коэффициент Пуассона

$$\mu = -\frac{\Delta R}{R} \frac{L}{\Delta L}, \quad (7)$$

где R — радиус нанотрубки в основном состоянии; ΔR — изменение радиуса при деформации.

3) Расчет модуля кручения. Каждый слой атомов закручивается вокруг оси трубки относительно основания („нижний“ ряд атомов) на некоторый угол, пропорционально расстоянию до основания. Длина остается фиксированной, что отвечает упругой деформации [20]. После оптимизации атомной структуры закрученной УНТ рассчитывается энергия кручения ΔE и модуль кручения

$$f_{\Delta E} = \frac{2\Delta E}{\varphi^2}. \quad (8)$$

Здесь φ — угол поворота концов нанотрубки относительно друг друга; обозначение для модуля кручения $f_{\Delta E}$ указывает способ его вычисления (расчет из энергии кручения).

Модуль кручения вычисляется также по известной из классической механики формуле [20], в которой фигурируют модуль Юнга и коэффициент Пуассона

$$f_Y = \frac{\pi Y}{4(1+\mu)L} \left[\left(R + \frac{t}{2} \right)^4 - \left(R - \frac{t}{2} \right)^4 \right], \quad (9)$$

где R — радиус нанотрубки, t — толщина стенки цилиндра (у нас 3.4 \AA). Обозначение f_Y указывает на расчет через уже найденное значение модуля Юнга.

2. Трехпараметрический метод генерации координат атомов однослойной УНТ

Ячеистая, из одинаковых гексагонов, сетка, образующая квазицилиндрическую (гофрированную) поверхность однослойной УНТ типа zigzag или armchair, генерируется нами заданием трех линейных параметров (трехпараметрический метод): одним из ребер (H_2) шестиугольника, большей (H_1) и меньшей (H_3) диагоналями гексагона (рис. 1). Такой способ „выкладывания“ тубуса УНТ из атомов углерода позволяет легко и быстро вычислять координаты атомов трубки произвольной киральности (m, n). Регибридизация σ - и π -электронов каркаса электронов (рис. 1), возникающая из-за кривизны поверхности графитового листа, свернутого в цилиндр малого диаметра, учитывается автоматически в ходе вычисления матричных элементов гамильтониана — потенциалов межатомного взаимодействия (3). Появление $sp^{2+\Delta}$ -гибридизации приводит к деформации правильных шестиугольников исходного графитового листа и образованию нескольких различных длин связей у трубки. Недостатком трехпараметрической модели трубки является отсутствие возможности воссоздания „волнообразности“ (гофрированности)

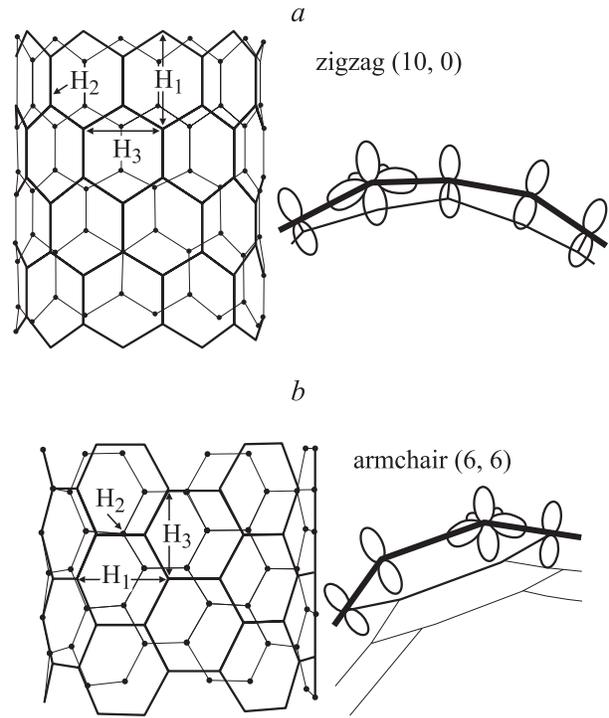


Рис. 1. Атомный остов, построенный трехпараметрическим методом, и регибридизация π - и σ -электронов: a — для трубки zigzag, b — для трубки armchair.

остова из-за одинаковости шестиугольников. Гексагоны тонких УНТ не являются плоскими, что и делает остов гофрированным.

С целью апробации нашей модели мы применили другой способ генерации координат атомов сетки шестиугольников. Этот способ основан на использовании теории групп точечной симметрии. Атомная структура восстанавливается в результате действия операциями симметрии соответствующей группы на координаты одного атома базиса (или базисов, в зависимости от геометрии каркаса). Координаты атомов разных базисов не могут быть получены друг через друга никакими операциями симметрии.

Сравнение двух методов проведено на примере расчета атомной и электронной структуры однослойной трубки типа zigzag (6, 0) в основном состоянии, а также после принудительного удлинения и сжатия. Для исследования была взята нанотрубка C_{96} (рис. 2), остов которой получен двумя способами: трехпараметрическим и с применением операций группы D_{6h} . Из-за малого диаметра трубки взаимодействием с подложкой мы пренебрегаем, так как оно не окажет существенного влияния на геометрическое строение тубуса. Поэтому энергия трубки складывается только из энергии заполненных валентными электронами энергетических уровней (с учетом спина) и феноменологической энергии.

Каркас C_{96} , построенный трехпараметрическим методом, характеризуется длиной 15.563 \AA , диаметром 4.828 \AA и двумя длинами связи 1.422 и 1.433 \AA .

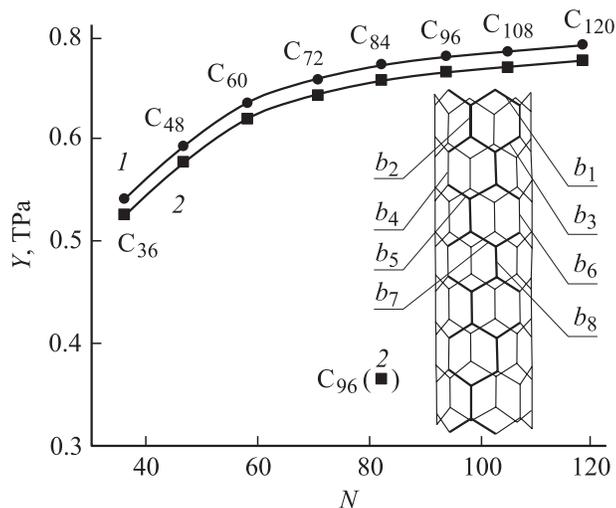


Рис. 2. Изменение модуля Юнга Y трубки (6, 0) с увеличением числа атомов N . 1 — кривая, соответствующая трехпараметрической модели ($d = 4.83 \text{ \AA}$); 2 — кривая, соответствующая модели, генерированной с помощью теории групп ($d = 4.84 \text{ \AA}$).

Генерирующие параметры: $H_1 = 2.824$, $H_2 = 1.422$, $H_3 = 2.528$. Из расчетов вторым методом (табл. 1) мы обнаруживаем гофрированность каркаса C_{96} : изменение диаметра трубки d по длине (координата Z). При этом средний диаметр равен 4.844 \AA , вместо двух длин связей обнаружилось восемь (рис. 2): $b_1 = 1.418$, $b_2 = 1.434$, $b_3 = 1.436$, $b_4 = 1.419$, $b_5 = 1.438$, $b_6 = 1.415$, $b_7 = 1.439$, $b_8 = 1.414$.

Вторая модель дает, несомненно, более точное представление об атомной структуре УНТ, а значит и о ее свойствах. Количественно упругость нанотрубок было бы правильнее изучать по второй модели атомной структуры, рассчитанной с учетом симметрии остова, но для получения информации о целом ряде трубок разной киральности и размеров процесс генерирования структуры путем манипуляции операторами симметрии различных групп становится трудоемким. Качественно изучать характер изменения характеристик упругости с изменением топологии УНТ, ориентации по отношению к подложке и размеров можно по сетке гексагонов, восстановленной трехпараметрическим способом. Подтверждением тому являются графики на рис. 2. Кривые увеличения модуля Юнга, рассчитанного для C_{96} с разной атомной структурой, демонстрируют идентичный характер изменения с ростом длины, и модуль Юнга в обоих случаях одинаково достигает насыщения.

Анализ смещения лежащих на одной окружности атомов при растяжении и сжатии трубки C_{96} (табл. 1) также подтвердил качество трехпараметрического метода. Атомы одного и того же кольца остовов, генерированных разными методами, смещаются синхронно с разницей по величине лишь в одну–две сотых ангстрема. Превышение же модуля Юнга, вычисленного по более простой модели, на 1–2% по сравнению со второй моделью является вполне допустимым. Как было от-

мечено выше, погрешность экспериментальных методов определения модуля Юнга составляет 28–36% [2–4], а величина для однослойных УНТ оценивается промежуточно ~ 0.9 – $\sim 5.5 \text{ ТПа}$. Рассчитанный нами модуль Юнга, равный $\sim 0.7 \text{ ТПа}$, близок к нижнему пределу этого промежутка. Расхождение можно объяснить малой длиной трубки. Как показано на графике рис. 2, с ростом длины модуль Юнга также растет.

В результате сравнения мы делаем вывод о возможности применения трехпараметрического метода генерации атомной структуры в исследованиях упругих свойств УНТ.

3. Механические свойства однослойных УНТ типа zigzag и armchair

Механические свойства изучались для тонких трубок zigzag и armchair, подвергаемых упругой деформации: растяжению, сжатию, кручению. Методика упругого деформирования трубок описана выше. Нами решались две задачи: выявление зависимости модулей Юнга и кручения тонких трубок от длины (что ранее не исследовалось); прогнозирование геометрических параметров (диаметра и длины), при которых трубки будут обладать наибольшей прочностью. Все расчеты проводились с использованием трехпараметрического метода генерации координат атомов УНТ.

Длина трубки никогда не рассматривалась в качестве элемента, способного влиять на механических свойства. Расчеты велись для выделенного сегмента [9,13] либо для трубок фиксированной длины [10]. Нами рассчитаны параметры упругости УНТ для трубок разной длины при фиксированном диаметре.

На рис. 2 приведена кривая роста модуля Юнга УНТ zigzag (6, 0) с увеличением длины от 4.85 до 19.80 \AA .

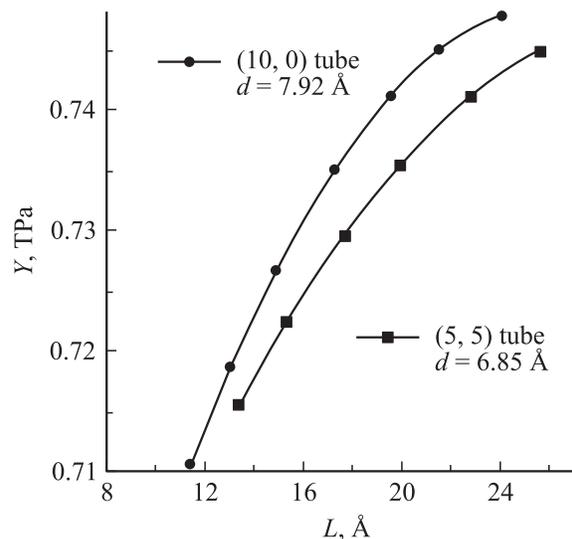


Рис. 3. Изменение модуля Юнга Y трубок с увеличением длины.

Таблица 1. Изменение диаметра нанотрубки zigzag (6,0) C_{96} вдоль оси Z-оси трубки

Основное состояние		Растяжение трубки на 1%		Сжатие трубки на 1%	
Z	d	Z	d	Z	d
1.150	4.789	1.241	4.763	1.824	4.816
1.838	4.795	1.945	4.774	2.496	4.818
3.273	4.839	3.386	4.818	3.924	4.860
3.973	4.848	4.099	4.827	4.611	4.870
5.392	4.840	5.525	4.820	6.024	4.862
6.098	4.845	6.243	4.824	6.716	4.866
7.513	4.842	7.665	4.822	8.126	4.863
8.220	4.845	8.385	4.824	8.820	4.866
9.635	4.845	9.806	4.824	10.228	4.866
10.342	4.842	10.527	4.822	10.922	4.863
11.757	4.845	11.948	4.824	12.332	4.866
12.463	4.840	12.667	4.820	13.024	4.862
13.882	4.848	14.093	4.827	14.437	4.870
14.582	4.839	14.806	4.818	15.124	4.860
16.017	4.795	16.247	4.774	16.552	4.818
16.705	4.789	16.951	4.763	17.224	4.816

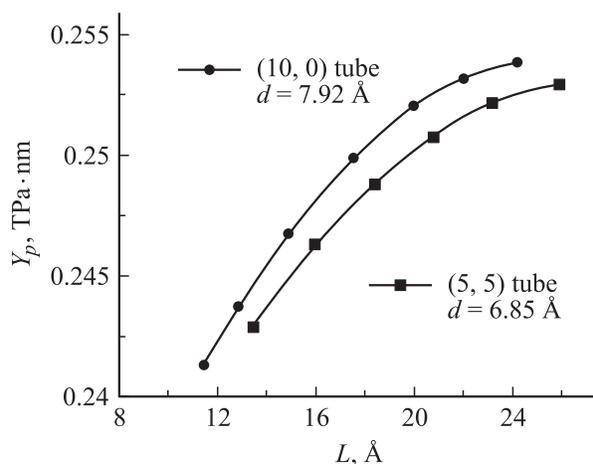
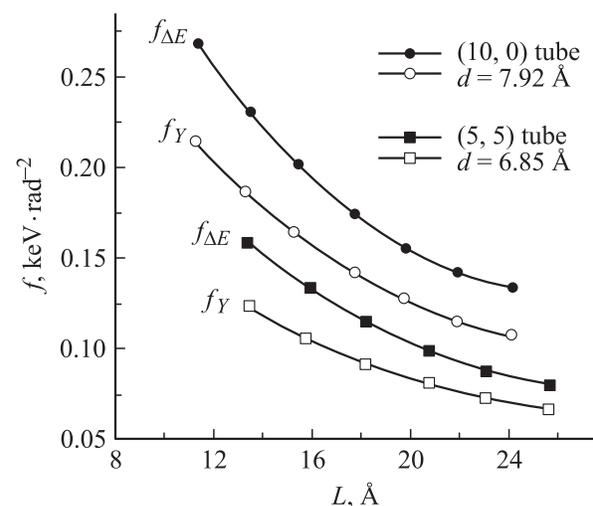
Таблица 2. Изменение параметров упругости УНТ типа zigzag с увеличением диаметра

N	(m, n)	d, Å	Y, TPa	Y_p , TPa·nm	μ
96	(6, 0)	4.83	0.671	0.228	0.445
112	(7, 0)	5.60	0.692	0.235	0.433
128	(8, 0)	6.37	0.709	0.241	0.435
144	(9, 0)	7.14	0.722	0.245	0.433
160	(10, 0)	7.92	0.730	0.248	0.431
176	(11, 0)	8.69	0.733	0.249	0.429

Таблица 3. Изменение параметров упругости УНТ типа armchair с увеличением диаметра

N	(m, n)	d, Å	Y, TPa	Y_p , TPa·nm	μ
120	(3, 3)	4.18	0.683	0.232	0.439
160	(4, 4)	5.51	0.721	0.245	0.444
200	(5, 5)	6.85	0.740	0.252	0.447
240	(6, 6)	8.19	0.751	0.255	0.448
280	(7, 7)	9.54	0.758	0.258	0.449

Рис. 3 и 4 демонстрируют также увеличение модуля Юнга Y и псевдомодуля Юнга Y_p с ростом длины трубок двух типов zigzag и armchair. Модуль кручения этих же трубок напротив обнаруживает тенденцию к уменьшению по мере увеличения длины (рис. 5). Число атомов N трубок (рис. 3–5) меняется с шагом 20: для (10, 0) от 120 до 240, для (5, 5) от 120 до 220. При этом на фоне заметного убывания модуля кручения и возрастания модуля Юнга величина коэффициента Пуассона остается практически постоянной: для zigzag (10, 0) наблюдается небольшое увеличение от 0.423 до 0.438, для armchair (5, 5) можно задать $\mu = 0.45 \pm 0.003$.

**Рис. 4.** Изменение модуля Юнга Y_p трубок с увеличением длины.**Рис. 5.** Изменение модуля кручения трубок с увеличением длины.

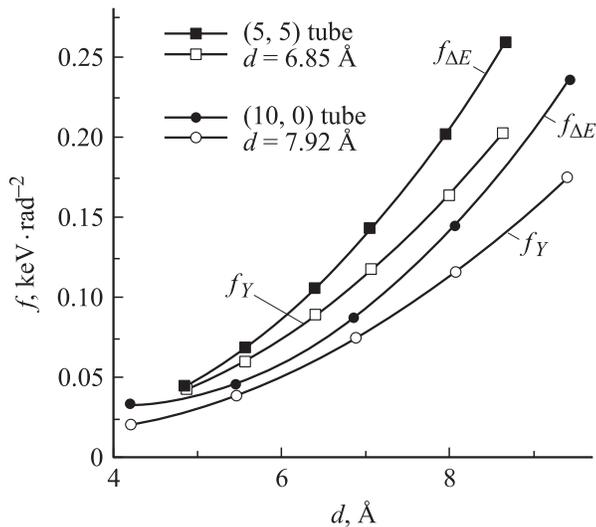


Рис. 6. Изменение модуля кручения трубок с увеличением диаметра.

Изменение параметров упругости трубок типа zigzag и armchair с увеличением диаметра отображено в табл. 2 и 3 соответственно. Характер изменения модуля кручения с увеличением диаметра отображен графиком на рис. 6. Длина трубок при этом остается постоянной: для УНТ zigzag $L = 15.60 \text{ \AA}$ (табл. 2, рис. 6), для armchair — 23.31 \AA .

4. Выводы и обсуждение результатов

1) Модуль Юнга, псевдомодуль Юнга и модуль кручения тонких однослойных УНТ zigzag и armchair определяются геометрическими параметрами их остова: диаметром, киральностью и длиной.

И для трубок $(m, 0)$, и для (n, n) псевдомодуль Юнга растет по мере увеличения диаметра, что согласуется с результатами аналогичных исследований [9,13]. Классический модуль Юнга Y также растет. Этот вывод аналогичен выводам [13], хотя в работе [9] результаты противоположные: модуль убывает. При этом характер возрастания обоих модулей Y и Y_p таков, что с приближением диаметра к значению $8\text{--}9 \text{ \AA}$ они (значения модулей) достигают насыщения, стремясь к величинам $0.75\text{--}0.8 \text{ ТПа}$ и $0.25\text{--}0.3 \text{ ТПа}\cdot\text{nm}$ соответственно. Эти величины находятся в согласии с экспериментальными значениями [6,11].

Как отмечалось выше, зависимость модулей Y и Y_p от длины ранее не изучалась. Нами получено следующее: значения Y и Y_p для тонких недлинных трубок очень „чувствительных“ к увеличению атомов в трубке. Они резко увеличиваются с наращиванием остова по длине и стремятся к насыщению, когда длина превышает $24\text{--}25 \text{ \AA}$.

Коэффициент Пуассона, на наш взгляд, можно считать постоянным, поскольку изменение на тысячные доли незначительно на фоне заметного изменения других

параметров упругости УНТ. Для трубок zigzag $\mu \approx 0.43$, для armchair $\mu \approx 0.45$.

Несмотря на то что существуют различные методы расчета модуля Юнга [5–10], модуля сдвига [5,6] и изгиба трубок [5,6,21], модуль кручения исследован крайне мало [5,9] и без доведения „до числа“. Расчеты этого параметра упругости сводятся к вычислению модуля сдвига [9]. Поэтому ни о значении модуля f , ни о его зависимости от атомного строения трубки практически ничего не известно.

Нами не только вычислены значения модуля кручения УНТ f , но также найдена зависимость f от атомной структуры УНТ. В отличие от модуля Юнга модуль кручения для обоих рассматриваемых типов киральности обнаружил увеличение с ростом диаметра и уменьшение с ростом длины. Уменьшение f с длиной стремится к насыщению после превышения ею $24\text{--}25 \text{ \AA}$, но не имеет ограничения роста с увеличением диаметра.

Анализ соотношений между диаметром и длиной показал, что модули Юнга и кручения трубок стремятся к насыщению при выполнении условия $d/L \sim 0.3$.

2) Разница между значениями модуля кручения $f_{\Delta E}$ и f_Y , наблюдающаяся как для УНТ типа zigzag, так и для УНТ типа armchair, объясняется конечностью продольного размера трубок. Такой вывод сделан на основе анализа и сравнения графиков изменения модулей с ростом длины и диаметра. С увеличением поперечного размера остова кривые зависимостей $f_{\Delta E}$ и f_Y медленно расходятся, а с ростом продольного заметна тенденция к сближению. Следовательно, именно открытые концы (незамкнутые связи атомов краев трубки) во многом определяют энергетику и упругость миниатюрных УНТ. Как упоминалось выше, на краях остова возникает перераспределение плотности электронной популяции, что ведет к изменению электронной и частично атомной структуры [19]. Нужно отметить, что модуль кручения как характеристика упругости УНТ требует дополнительного исследования.

3) Из проведенного изучения упругости трубок по двум параметрам (модулям Юнга и кручения) мы можем сформулировать условия для обнаружения тонких трубок наибольшей жесткости. Для трубок, использующихся в качестве игл микроскопов [22] или игл в нанохирургии, где к прочности (при сжатии) материала игл предъявляются повышенные требования, необходимо использовать длинные (более 2.5 nm) и сравнительно толстые трубки (но не более 1 nm в диаметре, дабы не допускать деформирования остова при взаимодействии иглы с поверхностью).

Упругие свойства УНТ и, в частности, параметры, их характеризующие, требуют дополнительного исследования.

Список литературы

- [1] M.J. Treacy, T.W. Ebbesen, J.M. Gibson. Nature. **381**, 678 (1996).
- [2] A. Krishnan, E. Dujardin, T.W. Ebbesen, P.N. Yianilos, M.M.J. Treacy. Phys. Rev. B **58**, 20, 14013 (1998).

- [3] E.W. Wong, P.E. Sheehan, C.M. Lieber. *Science*. **277**, 5334, 1971 (1997).
- [4] J.-P. Salvetat, G.A.D. Briggs, J.-M. Bonard, R.R. Bacsá, A.J. Kulik, T. Stöckli, N.A. Burnham, L. Forró. *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5, 944 (1999).
- [5] Zhou Xin, Zhou Jianjun, Ou-Yang Zhong-can. *Phys. Rev. B* **62**, 20, 13 692. (2000).
- [6] J.P. Lu. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 7, 1297 (1997).
- [7] K.M. Liew, X.Q. He, C.H. Wong. *Acta Mater.* **52**, 17, 2521 (2004).
- [8] Marc Dequesnes, S.V. Rotkin, N.R. Aluru. *Nanotechnology*, **13**, 120 (2002).
- [9] Lianxi Shen, Jackie Li. *Phys. Rev. B* **69**, 045 414 (2004).
- [10] Rodney S. Ruoff, Dong Qian, Wing Kam Liu. *C. R. Physique* **4**, 993 (2003).
- [11] C.F. Cornwell, L.T. Wille. *Solid State Commun.* **101**, 555 (1997).
- [12] B.I. Yakobson, C.J. Brabec, J. Bernholc. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 14, 2511 (1996).
- [13] E. Hernandez, C. Goze, P. Bernier, A. Rubio. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 20, 4502 (1998).
- [14] Tobias Hertel, Robert E. Walkup, Phedon Avouris. *Phys. Rev. B* **58**, 20, 13 870 (1998).
- [15] N.M. Harik. *Computational Materials Science* **24**, 328 (2002).
- [16] О.Е. Глухова, А.И. Жбанов. *ФТТ* **45**, 1, 180 (2003).
- [17] О.Е. Глухова, А.И. Жбанов, А.Г. Резков. *ФТТ* **47**, 2, 376 (2005).
- [18] S. Han, J. Ihm. *Phys. Rev. B* **61**, 15, 9986 (2000).
- [19] L. Goodwin. *J. Phys.: Condens. Matter.* **3**, 3869 (1991).
- [20] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теоретическая физика. Т. 7. Теория упругости.* М. (2001).
- [21] C.Q. Ru. *Phys. Rev. B* **62**, 15, 9973 (2000).
- [22] H. Dai, J.H. Hafner, A.G. Rinzler, D.T. Colbert, R.E. Smalley. *Nature (London)* **384**, 147 (1996).