

УДК 531.3

ЭВОЛЮЦИЯ СТРУКТУРЫ ПУЧКА ОДНОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ПОД ДЕЙСТВИЕМ ДЕФОРМАЦИИ СЖАТИЯ

© 2025 г. О. В. Андрухова^а, А. А. Овчаров^б,
Т. В. Андрухова^с, А. Ю. Моркина^{д, е, *}

^аУниверситет науки и технологий МИСИС, Москва, Россия

^бООО «ГПБ-ИТИ», Москва, Россия

^сАлтайский государственный университет, Барнаул, Россия

^дИнститут проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия

^еУфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

*E-mail: alinamorkina@yandex.ru

Поступила в редакцию 10.10.2024 г.

После доработки 17.10.2024 г.

Принята к публикации 18.10.2024 г.

Исследовано изменение структуры и свойств пучка углеродных нанотрубок (УНТ) под действием одноосной деформации сжатия в рамках квазитрехмерного компьютерного эксперимента. Рассмотрены равновесные конфигурации поперечного сечения пучка УНТ и проанализированы их энергетические свойства. Установлено, что до деформации сжатия 12% деформация пучка развивается почти однородно, в то время как при более высоких деформациях в пучке начинается ряд структурных перестроек и формируются области с различной степенью эллиптичности поперечных сечений УНТ. При достижении деформации сжатия 24% наблюдаются еще более значительные структурные изменения, включая образование коллапсированных УНТ. Представленные результаты раскрывают механизмы поглощения энергии внешних воздействий пучком УНТ, что важно для разработки материалов, демпфирующих ударные и вибрационные нагрузки.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, деформация сжатия, компьютерное моделирование

DOI: 10.31857/S1026351925020071, EDN: ANHTCW

1. Введение. Углеродные нанотрубки (УНТ) представляют собой наноразмерные структуры в виде цилиндрических молекул, состоящих из атомов углерода и организованных в виде однослойных или многослойных трубок [1]. Их удивительная прочность [2, 3], высокая электро- [4–6] и теплопроводность [7, 8] в сочетании с легкостью делают их перспективными для применения в различных областях, включая электронику, материаловедение, энергетику и медицину.

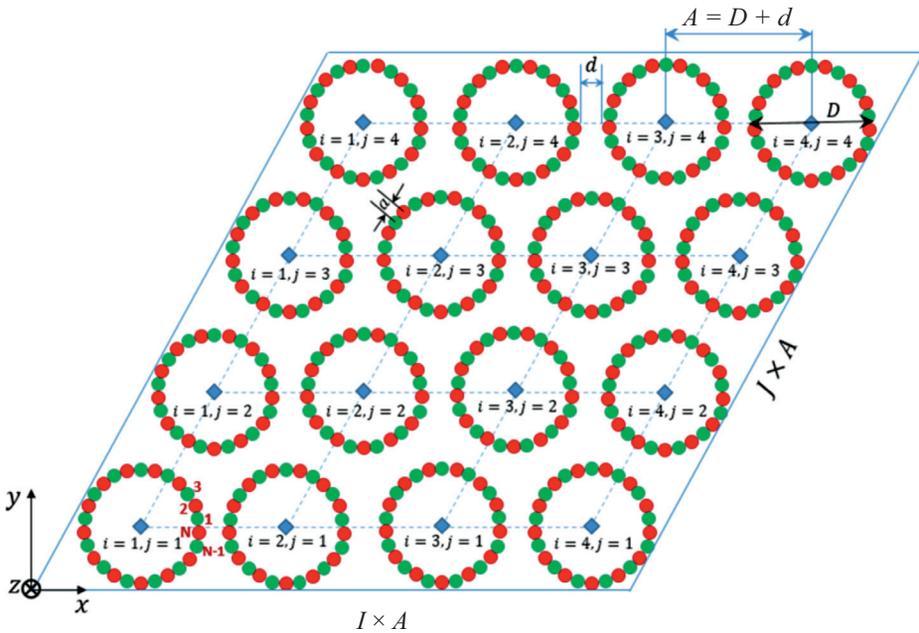


Рис. 1. Структура расчетного блока размером $I \times J \times A2$, где $I, J \in Z$ – число УНТ в ячейке в направлении x и y , A – расстояние между центрами соседних УНТ, D – диаметр УНТ, d – расстояние между стенками соседних УНТ, a – расстояние между атомами С в сечении УНТ.

С помощью пучков однослойных УНТ можно упрочнять материалы, получая таким образом композиты с высокими механическими свойствами, превосходящими свойства составляющих материалов в несколько раз [9–11]. Помимо этого, композиты с добавлением УНТ показывают хорошее поглощение ударных волн [12–15], что может использоваться в разработке бронежилетов, а также вибрационных нагрузок.

Исследования показывают, что однослойные УНТ проявляют поведение, аналогичное линейно-упругим материалам при воздействии давления до 1.5 ГПа [16, 17]. Однако при давлениях, превышающих 5 ГПа, результирующая деформация становится необратимой [18].

В последнее время ведутся поиски геометрии метаматериалов для эффективного торможения быстролетающих предметов [19, 20], при этом оказывается, что материалы с ауксетическими свойствами [21] имеют большой потенциал использования в подобных приложениях. Исследования динамического отклика углеродных наноматериалов показали, что многослойный графен обладает заметно лучшей способностью поглощать ударную энергию по сравнению с обычными материалами, такими как сталь [22]. Кроме того, изучение взаимодействия графена с высокоскоростными частицами подчеркнуло его потенциальную полезность в приложениях, требующих улавливания и преобразования энергии [23, 24].

Целью данной работы является изучение поведения пучка УНТ при различных степенях сжимающей деформации, изменения ее структуры и таких характеристик, как степень эллиптичности и потенциальная энергия.

2. Постановка задачи. В работе в рамках квазитрехмерного компьютерного эксперимента моделируется одноосное сжатие пучка одностенных зигзагообразных УНТ равного диаметра, показанного на рис. 1, в направлении, перпендикулярном стенкам пучка. Поперечные сечения УНТ в пучке формируют плотноупакованный кристалл. В условиях плоской деформации атомы С подвижны в плоскости поперечного сечения пучка, а положения атомов задаются двумя независимыми координатами x и y . Продольная деформация УНТ принимается равной нулю. При формировании расчетного блока учитываются следующие геометрические параметры: a – расстояние между атомами С в стенке УНТ, d – расстояние между стенками соседних УНТ, D – диаметр УНТ, A – расстояние между геометрическими центрами соседних УНТ. Каждый атом С на плоскости (x, y) соответствует жесткой цепочке атомов, ориентированных вдоль оси z . Красным и зеленым цветом показаны атомы С, имеющие различные координаты z .

Исходя из геометрии пучка УНТ, расчетный блок выбран в виде параллелограмма со сторонами $I \times A$ и $J \times A$, на который накладываются периодические граничные условия. I и J – число УНТ в ячейке в направлении x и y соответственно. Положение УНТ, входящей в расчетный блок, задается индексами $i = 1, \dots, I$ и $j = 1, \dots, J$. Положение атома в расчетном блоке задается радиус-вектором

$$r_{ijk} = (x_{ijk}, y_{ijk}), \quad (2.1)$$

где индекс $k = 1, \dots, N$ – номер атома в поперечном сечении УНТ. Атомы С нумеруются против часовой стрелки, начиная с атома с максимальной координатой x . Общее число степеней свободы атомов в блоке равно $2n$, где $n = I \times J \times N$ – полное число атомов в расчетной ячейке. В представленной работе расчетный блок включает $I \times J = 16 \times 16 = 256$ УНТ, каждая из которых содержит в поперечном сечении $N = 26$ атомов.

При моделировании исходной конфигурации пучка, межатомное расстояние ρ в стенке УНТ задавалось равным длине валентной связи С=С в графене – 1.418 \AA , после чего недеформированный пучок УНТ подвергался релаксации при температуре 0 К . В результате определялось равновесное межатомное расстояние. Расстояние a между ориентированными вдоль оси z жесткими атомными рядами определяется как

$$a = \rho\sqrt{3}/2 = 1.228 \text{ \AA} \lim_{x \rightarrow \infty}. \quad (2.2)$$

Диаметр УНТ D при $N \gg \pi$ может быть определен как

$$D = \frac{a}{\sin \frac{\pi}{N}} \approx \frac{aN}{\pi} = 10.188 \text{ \AA}. \quad (2.3)$$

Равновесное расстояние между стенками УНТ при нулевом давлении составляет $d = 3.088 \text{ \AA}$, а расстояние между центрами соседних УНТ составляет $A = D + d = 13.276 \text{ \AA}$.

В отсутствие внешних сил окружность оказывается единственно возможной устойчивой формой поперечного сечения УНТ с относительно небольшим диаметром (до 3 нм). Если диаметр превышает 3 нм, то УНТ при поперечном давлении могут приобретать схлопнутую форму, которая сохраняется после разгрузки. В нашем исследовании диаметр УНТ выбран так, что при схлопывании под действием нагрузки они раскрываются после ее снятия. Это позволяет моделировать упругий демпфер пучка УНТ [25].

Деформацию пучка УНТ в процессе поперечного нагружения можно описать гамильтонианом цепной модели [26, 27]

$$H = K + U_B + U_A + U_{vdW}, \quad (2.4)$$

где K , суммарная кинетическая энергия атомов углерода в расчетном блоке, рассчитывается как

$$K = \sum_{i,j,k} \frac{m}{2} (\dot{x}_{ijk}^2 + \dot{y}_{ijk}^2); \quad (2.5)$$

U_B , суммарная энергия валентных связей, вычисляется как

$$U_B = \sum_{i,j,k} V(|r_{ijk+1} - r_{ijk}|) \quad (2.6)$$

и описывается гармоническим потенциалом

$$V(r) = \frac{1}{2}(r - a)^2, \quad (2.7)$$

в котором для обеспечения продольной жесткости графена κ принимается равным 405 Н/м, а длина валентной связи полагается равной a ; U_A — суммарная энергия валентных углов, образованных ближайшими атомами в стенке УНТ,

$$U_A = \sum_{i,j,k} P(\theta_{ijk}) \quad (2.8)$$

и задаваемая ангармоническим потенциалом

$$P(\theta) = \epsilon [\cos(\theta) + 1], \quad (2.9)$$

где

$$\cos(\theta_{ijk}) = \frac{(\vec{r}_{ijk} - \vec{r}_{ijk-1}, \vec{r}_{ijk+1} - \vec{r}_{ijk})}{|\vec{r}_{ijk} - \vec{r}_{ijk-1}| \cdot |\vec{r}_{ijk+1} - \vec{r}_{ijk}|}, \quad (2.10)$$

параметр потенциала ϵ , определяющий жесткость листа графена при изгибе, принимается равным 3.50 эВ; U_{vdW} , энергия взаимодействий Ван-дер-Ваальса между УНТ,

$$U_{vdW} = \sum_{ijk} \sum_{i'j'k'} W \left(\left| \vec{r}_{ijk} - \vec{r}_{i'j'k'} \right| \right), \quad (2.11)$$

определяемая потенциалом Леннарда–Джонса

$$W(r) = \frac{\varepsilon}{6} \left[5 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{11} - 11 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^5 \right], \quad (2.12)$$

где энергия взаимодействия $\varepsilon = 1.66$ мэВ, а равновесная длина связи $\sigma = 3.61$ Å.

В условиях плоской деформации оцениваются механические свойства пучка УНТ при поперечном одноосном сжатии $\varepsilon_{yy} \leq 0$, $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{xy} = 0$. Нагруженное состояние характеризуется абсолютным значением деформации.

Алгоритм моделирования выглядит следующим образом. Добавочная деформация сжатия прикладывается с шагом $\Delta\varepsilon_{yy} = -0.0025$. За каждым приращением деформации следует внесение в кристаллит равномерно распределенных малых термических флуктуаций до значений порядка $= a \cdot 10^{-6}$ и последующая релаксация атомов. При этом если максимальные смещения атомов на текущем шаге релаксации выше некоторого порогового значения, определяемого величиной деформации, то шаг релаксации уменьшался в два раза и более. В том случае, если максимальные смещения оказывались значительно ниже порогового значения, то шаг релаксации увеличивался. Далее потенциальная энергия системы минимизируется градиентным методом до получения равновесной структуры пучка. Предполагается, что минимизация энергии завершена, когда абсолютное значение максимальной силы взаимодействия между атомами соседних УНТ не превышает 10^{-10} эВ/Å.

3. Результаты и обсуждение. В работе рассматриваются изменения структуры пучка УНТ и геометрии отдельных трубок при одноосной деформации сжатия до 40%. Для оценки влияния внешней нагрузки на структуру моделируемого блока УНТ были проанализированы полученные в компьютерном эксперименте равновесные конфигурации и визуализированы: картины распределения атомов в пучке УНТ и их смещений в процессе релаксации (векторы перемещения); геометрия пучка в целом (геометрический центр и центр масс каждой трубки и кристаллическая решетка пучка); картины распределения сил (направление и интенсивность воздействия иллюстрируется штрихами различной длины), действующих на атомы в пучке; распределения УНТ по степени эллиптичности e и картины распределения относительной потенциальной энергии трубок. Здесь и далее под степенью эллиптичности e понимается:

$$e = \left\{ 1 - \frac{d_{\min}}{d_{\max}} \right\}, \quad (3.1)$$

где d_{\min}/d_{\max} – отношение минимального и максимального диаметров УНТ. Соответственно e может варьироваться в пределах от 0 до некоторого значения $e_{\max} < 1.0$.

В результате анализа равновесных структур поперечного сечения пучка УНТ, полученных при моделировании процесса одноосного сжатия пучка,

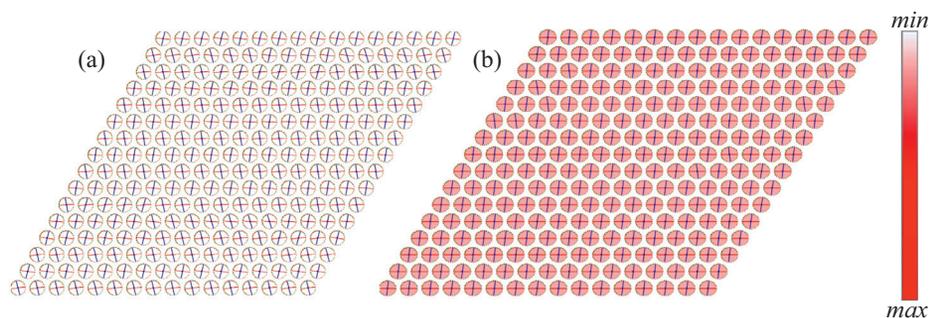


Рис. 2. Равновесные структуры пучка УНТ при деформации (а) 1% и (б) 10%. Справа показана цветовая шкала, отражающая эллиптичность УНТ.

было выявлено наличие нескольких этапов трансформации структуры. При относительно малых деформациях (менее 12%) поперечные сечения УНТ деформируются незначительно. Картины распределения эллиптичности пучка УНТ при деформации 1 и 10% приведены на рис. 2.

На рис. 3а представлены зависимости максимальной e_{\max} и минимальной e_{\min} эллиптичности УНТ в пучке от деформации. Для выявления специфики деформирования рассматриваемой упаковки УНТ рассчитан относительный разброс эллиптичности УНТ $\Delta e/e_{\max}$ от деформации сжатия $e_{\text{сж}}$, показанный на рис. 3б. Вертикальные пунктирные линии разбивают весь интервал деформации пучка на характерные участки, в пределах которых наблюдаются изменения в структуре пучка.

Среднее значение степени эллиптичности УНТ в пучке e при $e_{\text{сж}}=0\%$ оказывается около 0.0055, а максимальное отклонение d_{\min}/d_{\max} при этом не превышает 0.069%. С ростом деформации степень эллиптичности УНТ сначала растет практически линейно. При деформациях меньше 8% различие между максимальной и минимальной эллиптичностью УНТ в пучке в равновесном состоянии не превышает 11.5%. Можно сказать, что в этом интервале деформации сжатия моделируемый пучок УНТ почти однороден по степени эллиптичности его отдельных нанотрубок.

Дальнейший рост деформации приводит к появлению в равновесной конфигурации пучка все большего различия между минимальным и максимальным значениями эллиптичности УНТ, и достигает уже 20% при деформации 10%. Несмотря на это, сжатие УНТ все еще равномерное, и все они сохраняют форму, близкую к цилиндрической, что можно увидеть на рис. 2б.

На рис. 4 представлены характерные картины разориентации большого и малого диаметров эллиптических УНТ при малых деформациях 1, 4, 7 и 10% (а), а также гистограммы распределения углов разориентации трубок: для расслоившихся упаковок (б) и островковой разориентации (с).

Анализ картин эллиптичности и гистограмм распределений УНТ по углам разориентации θ показал, что наблюдается некоторая анизотропия свойств пучка. В процессе релаксации пучка формируются локальные группы УНТ с близкими углами разориентации. Наблюдаются либо небольшие островки, объединяющие 7–10 УНТ с близкой пространственной ориентацией

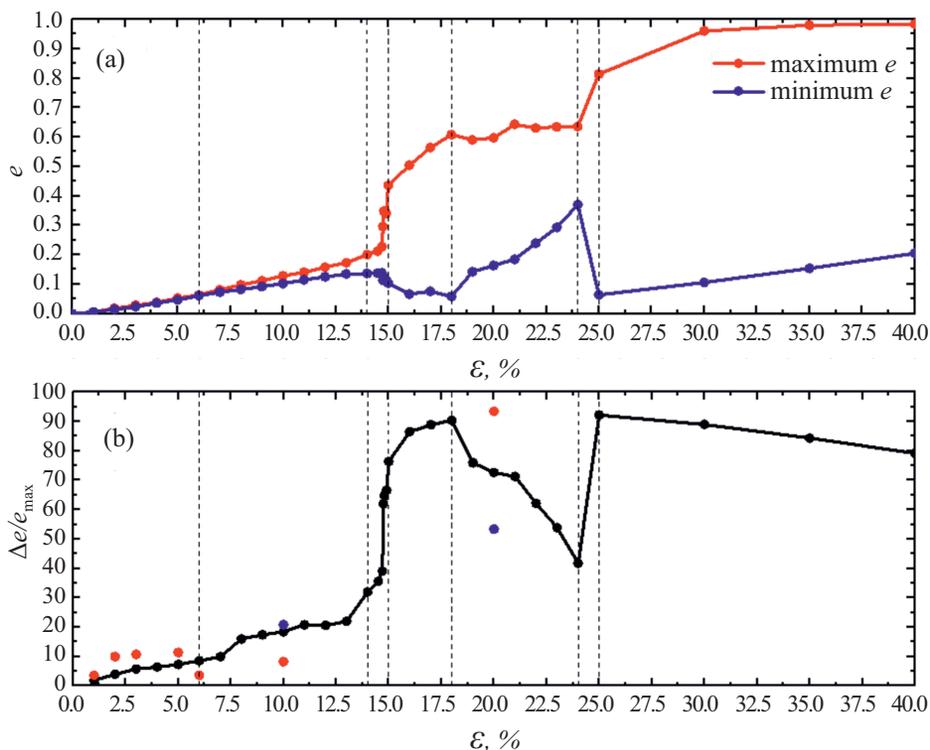


Рис. 3. (а) Зависимость эллиптичности e УНТ от деформации сжатия ϵ ; максимальное и минимальное значения показаны красной и синей кривыми соответственно; (б) относительный разброс эллиптичности УНТ в зависимости от деформации. Красными и синими точками показаны результаты расчетов, в которых получены метастабильные конфигурации пучка.

большого и меньшего диаметров, либо расслоение УНТ в виде горизонтальных или вертикальных зеркально симметричных полос, которые можно увидеть на рис. 4а. Углы разориентации УНТ преимущественно не превышают $3\text{--}5^\circ$. Однако при этом оказывается возможной разориентация отдельных УНТ вплоть до 10° . Кроме того, следует отметить, что при малых деформациях не наблюдаются смещения центров масс УНТ в пучке, при релаксации они сохраняют правильную треугольную решетку.

Дальнейший рост деформации приводит к появлению локальных областей, характеризующихся некоторым порядком в расположении деформированных УНТ. При росте деформации вплоть до 14.5% наблюдается не только увеличение разницы между максимальной и минимальной эллиптичностью УНТ в пучке, но и нарастают смещения атомов, что приводит к сдвигам центров масс отдельных УНТ или их групп относительно первоначальных позиций. То есть, если при сравнительно малых нагружениях наблюдались упругие деформации самих УНТ в кристалле без нарушения кристаллической структуры,

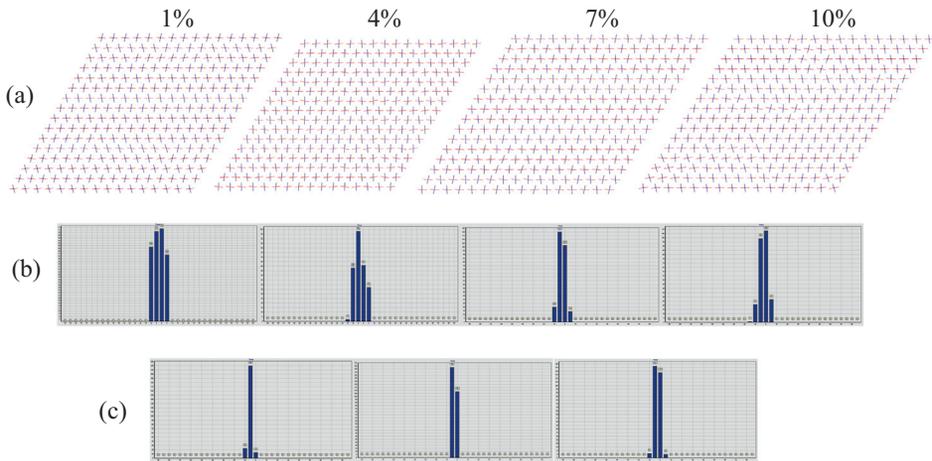


Рис. 4. (а) Характерные картины разориентации диаметров УНТ при малых деформациях 1, 4, 7 и 10%; красные и синие отрезки показывают максимальный и минимальный диаметры УНТ соответственно. Гистограммы распределения углов разориентации трубок для (b) – расслоившихся упаковок, (c) – упаковок с островковой разориентацией.

то здесь уже проявляются малые искажения решетки и изменение геометрии пучка УНТ. В итоге формируются чередующиеся локальные области с различной степенью деформации и характерным расположением упруго-сжатых трубок.

На рис. 5 проиллюстрирована эволюция структуры пучка УНТ в интервале деформации сжатия от 10 до 14.8%. При деформации около 14% начинает появляться неоднородность структуры пучка УНТ, с образованием областей с большей и меньшей эллиптичностью УНТ.

Выявлено, что во всем исследуемом диапазоне деформаций возможно существование метастабильных состояний пучка, отличающихся количеством УНТ с различной эллиптичностью, угловой ориентацией и энергией. При малых деформациях все УНТ имеют одинаковые поперечные сечения, то есть деформация однородна. При деформации пучка выше 14.5% различные УНТ имеют разную степень эллиптичности и угловую ориентацию.

На рис. 6 представлены картины поперечных сечений УНТ, полученные при деформациях от 14 до 40%. Цветом показана потенциальная энергия на атом для каждой УНТ, при этом красный (синий) цвет соответствует минимальной (максимальной) потенциальной энергии.

В процессе релаксации формируется либо островная (кластерная) структура пучка, либо слоистая. В первом случае кластеры УНТ представляют собой локальные области, объединяющие слабо эллиптичные УНТ и УНТ с большей эллиптичностью. Во втором – получаемые картины распределения трубок в пучке УНТ отличаются большей вариативностью, что можно увидеть на рис. 6с. Расслоение пучка УНТ может быть как в вертикальном, так и в горизонтальном направлениях, при этом наблюдается чередование

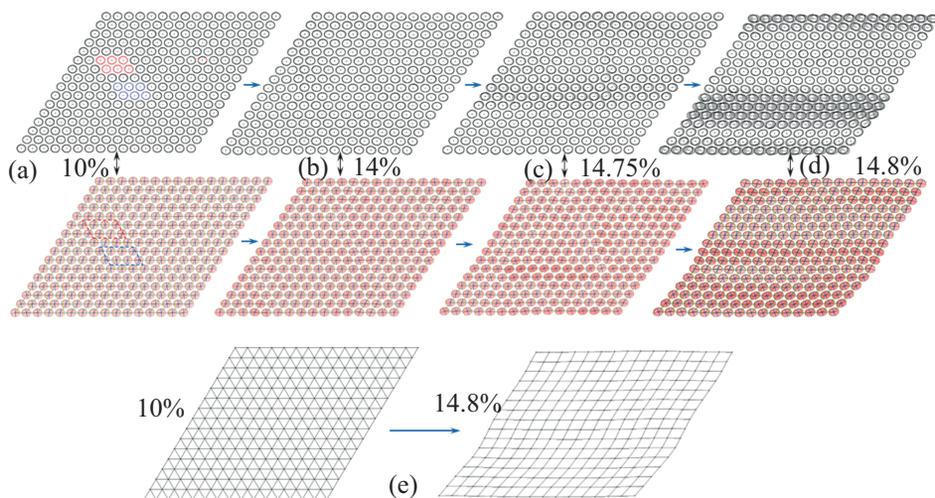


Рис. 5. Эволюция структуры пучка УНТ в интервале деформации сжатия от 10 до 14,8%: (а) 10,0%, (б) 14,0%, (с) 14,75% и (д) 14,8%. Смещения показаны отрезками, длина и направление которых иллюстрируют, как изменилось положение атома и центров масс УНТ в пучке. При деформации порядка 10% на рисунке красным и синим цветом выделены два блока УНТ с различным направлением смещения их центров масс. На (е) показано изменение геометрии пучка УНТ.

слоев, объединяющих одинаково ориентированные и сжатые УНТ. Однако, если внутри слоя степень эллиптичности УНТ одинаковая, то от слоя к слою эллиптичность УНТ может изменяться. Помимо этого, вплоть до деформации пучка 23–24% могут формироваться метастабильные конфигурации смешанного типа, в которых наблюдаются оба типа структур. Отметим, что УНТ с меньшей степенью эллиптичности имеют меньшую энергию.

Еще одна особенность нагружения пучка УНТ начинает проявляться при деформациях около 24%. На рис. 6е и рис. 6ф хорошо видно, что в метастабильных состояниях в структуре пучка возникают единичные сильно сжатые, коллапсированные УНТ, окруженные УНТ со сравнительно с малой степенью эллиптичности. Формирование коллапсированной УНТ приводит к разгрузке и уменьшению эллиптичности соседних УНТ, что и дает движущую силу процессу коллапсирования. Анализ картин деформации трубок в пучке при сжатии от 24–25% показывает, что деформация 24% является еще одной точкой бифуркации. Такое поведение пучка УНТ может быть обусловлено тем, что одностенные УНТ имеют различные устойчивые конфигурации, отличающиеся степенью сжатия и углами разориентации [28–33].

На рис. 7 приведена зависимость удельной потенциальной энергии пучка от деформации сжатия (синяя кривая), разбитая на вклады, вносимые парными взаимодействиями атомов углерода (пурпурная кривая) а также вклады от деформации валентных связей и углов (черная и зеленая кривые). Вертикальные пунктирные линии показывают значения деформаций, при которых качественно изменяется структура пучка.

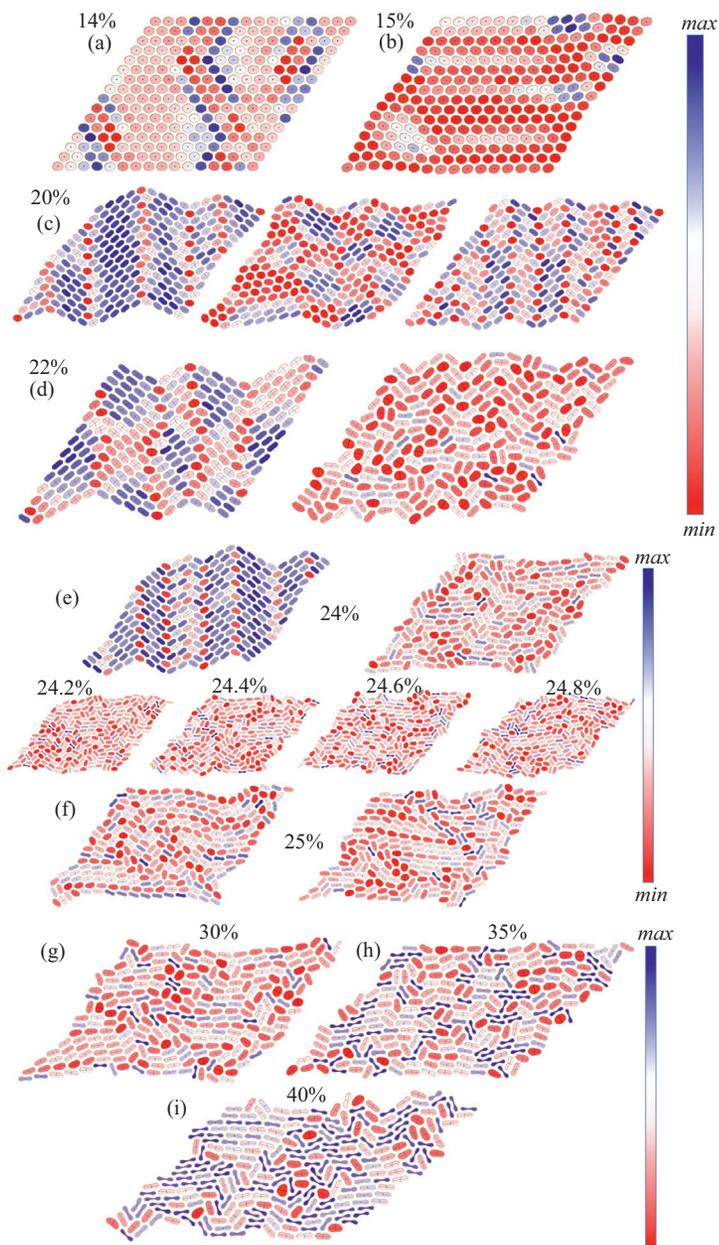


Рис. 6. Картины распределения эллиптичности и потенциальной энергии в пучке УНТ, полученные при деформациях: (а) 14%, (b) 15%, (с) 20%, (d) 22%, (e) 24–24.8%, (f) 25%, (g) 30%, (h) 35%, (i) 40%. Справа показаны шкалы, иллюстрирующие относительную потенциальную энергию каждой УНТ. Синий цвет соответствует максимальной энергии, красный – минимальной.

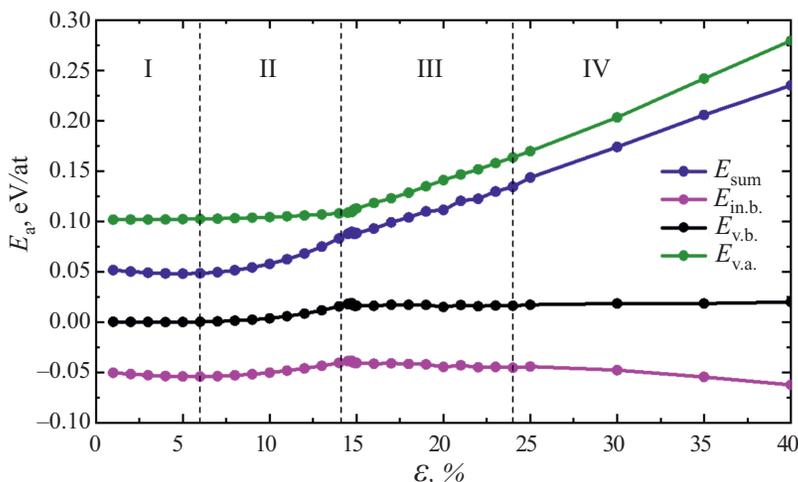


Рис. 7. Зависимость удельной потенциальной энергии $E_a = E/n$ пучка УНТ от относительной деформации пучка. Синяя кривая показывает зависимость суммарной удельной энергии пучка, пурпурная – вклад парных ван-дер-ваальсовых взаимодействий атомов, черная и зеленые кривые иллюстрируют вклад в энергию валентных связей и валентных углов соответственно. Вертикальные пунктирные линии показывают деформации, при которых в структуре пучка проявляются качественные изменения (точки бифуркации).

В области I по мере роста деформации энергия пучка практически изменяется очень слабо и поперечные сечения УНТ сохраняют форму, близкую к окружностям. В области II наблюдается упругая однородная деформация УНТ. Когда деформация достигает примерно 14% (начало области III), УНТ приобретают эллиптическое поперечное сечение, деформация становится неоднородной и проявляется мультистабильность состояний. В области IV, после достижения деформации около 24%, дальнейшее сжатие приводит к схлопыванию некоторых УНТ, что сопряжено с уменьшением эллиптичности соседних УНТ. Наблюдается монотонное увеличение доли коллапсированных УНТ. Удельная суммарная энергия пучка УНТ при этом линейно увеличивается.

4. Заключение. В данной работе исследованы изменения структуры пучка УНТ при одноосной поперечной деформации сжатия до 40%. Установлено, что при деформациях до 12% степень эллиптичности УНТ в пучке распределена практически однородно. Среднее значение степени эллиптичности УНТ составляет около 0.0055, с максимальным отклонением не выше 0.07%.

Выявлено, что с увеличением нагрузки наблюдается значительное увеличение вариаций эллиптичности, что указывает на начало формирования сложной структуры с различной степенью сжатия в пучке. В дальнейшем, при деформациях около 14–15%, проявляется неоднородность деформации, образуются области УНТ с низкой и высокой эллиптичностью и начинают формироваться кластеры с различной ориентацией эллиптических УНТ в поперечном сечении.

При деформациях более 24% наблюдаются ярко выраженные изменения в структуре пучков, включая появление метастабильных конфигураций, где сильно сжатые УНТ коллапсируют под действием сжимающих нагрузок, при

этом эллиптичность соседних УНТ уменьшается, что приводит к выигрышу полной потенциальной энергии системы. С ростом деформации сжатия доля коллапсированных УНТ увеличивается, структура пучка изменяется, влияя на его механические свойства.

Анализ зависимостей удельной потенциальной энергии пучка показывает, что энергия возрастает монотонно при небольших деформациях, однако при достижении 14% и далее она начинает изменяться немонотонно, что связано с качественными изменениями в структуре взаимодействующих УНТ. Скачки потенциальной энергии, наблюдаемые в области метастабильной деформации, могут служить индикатором предельных состояний, при которых происходит изменение структуры и механических свойств пучка.

В последующих работах предполагается изучить структурные перестройки в пучках многостенных УНТ [34–36].

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания Уфимского университета науки и технологий (№ 075-03-2024-123/1) Молодежной научно-исследовательской лаборатории “Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Galiakhmetova L.Kh., Bachurin D.V., Korznikova E.A., Bayazitov A.M., Kudreyko A.A., Dmitriev S.V.* Shock loading of carbon nanotube bundle // *Mech. Mater.* 2022. V. 174. 104460.
<https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2022.104460>
2. *Dongju L. et al.* Ultrahigh strength, modulus, and conductivity of graphitic fibers by macromolecular coalescence // *Sci. Adv.* 2022. V. 8. № 16.
<https://doi.org/10.1126/sciadv.abn0939>
3. *Zhan H., Lin J.H., Shi H.L., Wang J.N.* Construction of carbon nanotubes/bismaleimide composite films with superior tensile strength and toughness // *Compos. Sci. Technol.* 2021. V. 214. P. 108975.
<https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2021.108975>
4. *Hennequin T., Manghi M., Noury A., Henn F., Jourdain V., Palmeri J.* Influence of the quantum capacitance on electrolyte conductivity through carbon nanotubes // *J. Phys. Chem. Lett.* 2024. V. 15. № 8. P. 2177–2183.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.3c03248>
5. *Wiśniewska M., Laptev A., Marczewski M. et al.* Influence of carbon nanotubes on thermal and electrical conductivity of zirconia-based composite // *Ceram. Int.* 2023. V. 49. № 10. P. 15442–15450.
<https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2023.01.129>
6. *Oluwalowo A., Nguyen N., Zhang S., Park J.G., Liang R.* Electrical and thermal conductivity improvement of carbon nanotube and silver composites // *Carbon.* 2019. V. 146. P. 224–231.
<https://doi.org/10.1016/j.carbon.2019.01.073>
7. *Jia Q., Zhou Y. et al.* Differential multi-probe thermal transport measurements of multi-walled carbon nanotubes grown by chemical vapor deposition // *Int. J. Heat Mass Transfer.* 2023. V. 216. P. 124535.
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.124535>

8. *Jie W., Duan X., Gong L., Nie S.* Interfacial and filler size effects on mechanical/thermal/electrical properties of CNTs-reinforced nanocomposites // *Polymers*. 2024. V. 16. № 6. P. 808.
<https://doi.org/10.3390/polym16060808>
9. *Wang X., Wang D., Ma S. et al.* Enhanced toughness of boron carbide by single-wall carbon nanotube bundles // *Mater. Today Commun.* 2023. V. 35. P. 105651.
<https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.105651>
10. *Ushakov I.V., Safronov I.S.* Directed changing properties of amorphous and nanostructured metal alloys with help of nanosecond laser impulses // *CIS Iron and Steel Review*. 2021. № 2. P. 77–81.
<https://doi.org/10.17580/cisr.2021.02.14>
11. *Ushakov I.V., Safronov I.S., Oshorov A.D., Zhiqiang W., Muromtsev D.Y.* Physics of the effect of high-temperature pulse heating on defects in the surface layer of a metal alloy // *Metallurgist*. 2023. V. 67. P. 986–994.
<https://doi.org/10.1007/s11015-023-01588-z>
12. *Moumen A., Tarfaoui M., Nachtane M., Lafdi K.* Carbon nanotubes as a player to improve mechanical shock wave absorption // *Compos. B Eng.* 2019. V. 164. P. 67–71.
<https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2018.11.072>
13. *Qiao J., Ushakov I.V., Safronov I.S. et al.* Physical mechanism of nanocrystalline composite deformation responsible for fracture plastic nature at cryogenic temperatures // *Nanomaterials*. 2024. V. 14. № 8. P. 723.
<https://doi.org/10.3390/nano14080723>
14. *Wang Z., Ushakov I.V., Safronov I.S., Zuo J.* Physical mechanism of selective healing of nanopores in condensed matter under the influence of laser irradiation and plasma // *Nanomaterials*. 2024. V. 14. № 2. P. 139.
<https://doi.org/10.3390/nano14020139>
15. *Safronov I.S., Ushakov I.V.* Targeted alternation in properties of solid amorphous-nanocrystalline material in exposing to nanosecond laser radiation // *DDF*. 2021. V. 410. P. 469–474.
<https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.410.469>
16. *Tang J., Qin L.-C., Sasaki T., Yudasaka M., Matsushita A., Iijima S.* Compressibility and polygonization of single-walled carbon nanotubes under hydrostatic pressure // *Phys. Rev. Lett.* 2000. V. 85. P. 1887–1889.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.85.1887>
17. *Ilgamov M.A., Aitbaeva A.A., Pavlov I.S., Dmitriev S.V.* Carbon nanotube under pulsed pressure // *FU Mech. Eng.* 2024. V. 22. № 2. P. 275–292.
<https://doi.org/10.22190/FUME230820049I>
18. *Karmakar S., Sharma S.M., Teredesai P.V., Muthu D.V.S., Govindaraj A., Sikka S.K., Sood A.K.* Structural changes in single-walled carbon nanotubes under non-hydrostatic pressures: X-ray and Raman studies // *New J. Phys.* 2003. V. 5. P. 143.
<https://doi.org/10.1088/1367-2630/5/1/143>
19. *Ivanova S.Yu., Osipenko K.Yu., Demin A.I., Banichuk N.V., Lisovenko D.S.* Studying the properties of metamaterials with a negative Poisson's ratio when punched by a rigid impactor // *Mech. Solids*. 2023. V. 58. P. 1536–1544.
<https://doi.org/10.3103/S0025654423600897>
20. *Ivanova S.Yu., Osipenko K.Yu., Kuznetsov V.A., Solovyov N.G., Banichuk N.V., Lisovenko D.S.* Experimental investigation of the properties of auxetic and non-auxetic metamaterials made of metal during penetration of rigid strikers // *Mech. Solids*. 2023. V. 58. P. 524–528.
<https://doi.org/10.3103/S0025654422601616>

21. *Lisovenko D.S., Baimova J.A., Rysaeva L.K., Gorodtsov V.A., Rudskoy A.I., Dmitriev S.V.* Equilibrium diamond-like carbon nanostructures with cubic anisotropy: Elastic properties // *Phys. Status Solidi (B) Basic Res.* 2016. V. 253. № 7. P. 1295–1302.
<https://doi.org/10.1002/pssb.201600049>
22. *Lee J.-H., Loya P., Lou J., Thomas E.* Dynamic mechanical behavior of multilayer graphene via supersonic projectile penetration // *Science.* 2014. V. 346. № 6213. P. 1092–1096.
<https://doi.org/10.1126/science.1258544>
23. *Lin Y., Liyong T.* Suspended monolayer graphene traps high-speed single-walled carbon nanotube // *Carbon.* 2016. V. 107. P. 689–695.
<https://doi.org/10.1016/j.carbon.2016.06.041>
24. *Shepelev I.A., Chetverikov A.P., Dmitriev S.V., Korznikova E.A.* Shock waves in graphene and boron nitride // *Comput. Mater. Sci.* 2020. V. 177. P. 109549.
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109549>
25. *Rysaeva L.K., Korznikova E.A., Murzaev R.T. et al.* Elastic damper based on the carbon nanotube bundle // *FU Mech. Eng.* 2020. V. 18. № 1. P. 1–12.
<https://doi.org/10.22190/FUME200128011R>
26. *Korznikova E.A., Rysaeva L.K., Savin A.V., et al.* Chain model for carbon nanotube bundle under plane strain conditions // *Materials.* 2019. V. 12. № 23. P. 3951.
<https://doi.org/10.3390/ma12233951>
27. *Savin A.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V.* Scroll configurations of carbon nanoribbons // *Phys. Rev. B.* 2015. V. 92. P. 035412.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.035412>
28. *Савин А.В., Савина О.И.* Упругие и пластические деформации многослойных упаковок углеродных нанотрубок на плоской подложке // *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики.* 2022. Т. 161. № 1. С. 75–85.
<https://doi.org/10.31857/S0044451022010072>
29. *Rysaeva L.K., Bachurin D.V., Murzaev R.T., et al.* Evolution of the carbon nanotube bundle structure under biaxial and shear strains // *FU Mech. Eng.* 2020. V. 18. № 4. P. 525–536.
<https://doi.org/10.22190/FUME201005043R>
30. *Савин А.В., Савина О.И.* Динамика цепочек углеродных нанотрубок, расположенных на плоских подложках // *Физика твердого тела.* 2021. Вып. 1. С. 137.
<https://doi.org/10.21883/FTT.2021.01.50412.183>
31. *Савин А.В., Корзников Е.А., Дмитриев С.В.* Моделирование складчатых и рулонных упаковок углеродных нанолент // *Физика твердого тела.* 2015. Т. 57. № 11. С. 2278–2285.
32. *Savin A.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V.* Dynamics of surface graphene ripplocations on a flat graphite substrate // *Phys. Rev. B.* 2019. V. 99. P. 235411.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.235411>
33. *Dmitriev S.V., Morkina A.Y., Tarov D.V. et al.* Effect of repetitive high-density current pulses on plastic deformation of copper wires under stepwise loading // *Spec. Mech. Eng. Oper. Res.* 2024. V. 1. № 1. P. 27–43.
<https://doi.org/10.31181/smeor1120243>
34. *Liew K.M., Wong C.H., He X.Q., Tan M.J., Meguid S.A.* Nanomechanics of single and multiwalled carbon nanotubes // *Phys. Rev. B.* 2004. V. 69. № 11. P. 115429.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.115429>
35. *Safaei B., Naseradinmousavi P., Rahmani A.* Development of an accurate molecular mechanics model for buckling behavior of multi-walled carbon nanotubes under axial compression // *J. Mol. Graph. Model.* 2016. V. 65. P. 43–60.
<https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2016.02.001>

36. *Chang W., Liu F., Liu Y. et al.* Smallest carbon nanowires made easy: Long linear carbon chains confined inside single-walled carbon nanotubes // *Carbon*. 2021. V. 183. P. 571–577.
<https://doi.org/10.1016/j.carbon.2021.07.037>

EVOLUTION OF THE SINGLE-WALL CARBON NANOTUBES BUNDLE STRUCTURE UNDER COMPRESSIVE DEFORMATION

O. V. Andrukhova^a, A. A. Ovcharov^b, T. V. Andrukhova^c, A. Y. Morkina^{d, e, *}

^a*National University of Science and Technology MISIS, Moscow, Russia*

^b*LLC “GPB-ITI”, Moscow, Russia*

^c*Altai State University, Barnaul, Russia*

^d*Institute for Metals Superplasticity Problems of the RAS, Ufa, Russia*

^e*Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russia*

*E-mail: alinamorkina@yandex.ru

The change in the structure and properties of a carbon nanotube (CNT) bundle under the action of uniaxial compression deformation in the framework of a quasi-three-dimensional computer experiment is investigated. The equilibrium configurations of the CNT bundle cross section are considered and their energetic properties are analyzed. It is found that up to a compression strain of 12% the bundle deformation develops almost homogeneously, while at higher strains a number of structural rearrangements begin in the bundle and regions with different degrees of ellipticity of CNT cross sections are formed. When the compression strain reaches 24%, even more significant structural changes are observed, including the formation of collapsed CNTs. The presented results reveal the mechanisms of absorption of external impact energy by the CNT bundle, which is important for the development of materials damping shock and vibration loads.

Keywords: carbon nanotubes, compressive deformation, computer modeling

REFERENCES

1. *Galiakhmetova L.Kh., Bachurin D.V., Korznikova E.A., Bayazitov A.M., Kudreyko A.A., Dmitriev S.V.* Shock loading of carbon nanotube bundle // *Mech. Mater.* 2022. V. 174. 104460.
<https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2022.104460>
2. *Dongju L. et al.* Ultrahigh strength, modulus, and conductivity of graphitic fibers by macromolecular coalescence // *Sci. Adv.* 2022. V. 8. № 16.
<https://doi.org/10.1126/sciadv.abn0939>
3. *Zhan H., Lin J.H., Shi H.L., Wang J.N.* Construction of carbon nanotubes/bismaleimide composite films with superior tensile strength and toughness // *Compos. Sci. Technol.* 2021. V. 214. P. 108975.
<https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2021.108975>

4. *Hennequin T., Manghi M., Noury A., Henn F., Jourdain V., Palmeri J.* Influence of the quantum capacitance on electrolyte conductivity through carbon nanotubes // *J. Phys. Chem. Lett.* 2024. V. 15. № 8. P. 2177–2183.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.3c03248>
5. *Wiśniewska M., Laptev A., Marczewski M., et al.* Influence of carbon nanotubes on thermal and electrical conductivity of zirconia-based composite // *Ceram. Int.* 2023. V. 49. № 10. P. 15442–15450.
<https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2023.01.129>
6. *Oluwalowo A., Nguyen N., Zhang S., Park J.G., Liang R.* Electrical and thermal conductivity improvement of carbon nanotube and silver composites // *Carbon.* 2019. V. 146. P. 224–231.
<https://doi.org/10.1016/j.carbon.2019.01.073>
7. *Jia Q., Zhou Y. et al.* Differential multi-probe thermal transport measurements of multi-walled carbon nanotubes grown by chemical vapor deposition // *Int. J. Heat Mass Transfer.* 2023. V. 216. P. 124535.
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.124535>
8. *Jie W., Duan X., Gong L., Nie S.* Interfacial and filler size effects on mechanical/thermal/electrical properties of CNTs-reinforced nanocomposites // *Polymers.* 2024. V. 16. № 6. P. 808.
<https://doi.org/10.3390/polym16060808>
9. *Wang X., Wang D., Ma S. et al.* Enhanced toughness of boron carbide by single-wall carbon nanotube bundles // *Mater. Today Commun.* 2023. V. 35. P. 105651.
<https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.105651>
10. *Ushakov I.V., Safronov I.S.* Directed changing properties of amorphous and nanostructured metal alloys with help of nanosecond laser impulses // *CIS Iron and Steel Review.* 2021. № 2. P. 77–81.
<https://doi.org/10.17580/cisisr.2021.02.14>
11. *Ushakov I.V., Safronov I.S., Oshorov A.D., Zhiqiang W., Muromtsev D.Y.* Physics of the effect of high-temperature pulse heating on defects in the surface layer of a metal alloy // *Metallurgist.* 2023. V. 67. P. 986–994.
<https://doi.org/10.1007/s11015-023-01588-z>
12. *Moumen A., Tarfaoui M., Nachtane M., Lafdi K.* Carbon nanotubes as a player to improve mechanical shock wave absorption // *Compos. B Eng.* 2019. V. 164. P. 67–71.
<https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2018.11.072>
13. *Qiao J., Ushakov I.V., Safronov I.S. et al.* Physical mechanism of nanocrystalline composite deformation responsible for fracture plastic nature at cryogenic temperatures // *Nanomaterials.* 2024. V. 14. № 8. P. 723.
<https://doi.org/10.3390/nano14080723>
14. *Wang Z., Ushakov I.V., Safronov I.S., Zuo J.* Physical mechanism of selective healing of nanopores in condensed matter under the influence of laser irradiation and plasma // *Nanomaterials.* 2024. V. 14. № 2. P. 139.
<https://doi.org/10.3390/nano14020139>
15. *Safronov I.S., Ushakov I.V.* Targeted alternation in properties of solid amorphous-nanocrystalline material in exposing to nanosecond laser radiation // *DDF.* 2021. V. 410. P. 469–474.
<https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.410.469>
16. *Tang J., Qin L.-C., Sasaki T., Yudasaka M., Matsushita A., Iijima S.* Compressibility and polygonization of single-walled carbon nanotubes under hydrostatic pressure // *Phys. Rev. Lett.* 2000. V. 85. P. 1887–1889.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.85.1887>

17. *Ilgamov M.A., Aitbaeva A.A., Pavlov I.S., Dmitriev S.V.* Carbon nanotube under pulsed pressure // *FU Mech. Eng.* 2024. V. 22. № 2. P. 275–292.
<https://doi.org/10.22190/FUME230820049I>
18. *Karmakar S., Sharma S.M., Teredesai P.V., Muthu D.V.S., Govindaraj A., Sikka S.K., Sood A.K.* Structural changes in single-walled carbon nanotubes under non-hydrostatic pressures: X-ray and Raman studies // *New J. Phys.* 2003. V. 5. P. 143.
<https://doi.org/10.1088/1367-2630/5/1/143>
19. *Ivanova S.Yu., Osipenko K.Yu., Demin A.I., Banichuk N.V., Lisovenko D.S.* Studying the properties of metamaterials with a negative Poisson's ratio when punched by a rigid impactor // *Mech. Solids.* 2023. V. 58. P. 1536–1544.
<https://doi.org/10.3103/S0025654423600897>
20. *Ivanova S.Yu., Osipenko K.Yu., Kuznetsov V.A., Solovyov N.G., Banichuk N.V., Lisovenko D.S.* Experimental investigation of the properties of auxetic and non-auxetic metamaterials made of metal during penetration of rigid strikers // *Mech. Solids.* 2023. V. 58. P. 524–528.
<https://doi.org/10.3103/S0025654422601616>
21. *Lisovenko D.S., Baimova J.A., Rysaeva L.K., Gorodtsov V.A., Rudskoy A.I., Dmitriev S.V.* Equilibrium diamond-like carbon nanostructures with cubic anisotropy: Elastic properties // *Phys. Status Solidi (B) Basic Res.* 2016. V. 253. № 7. P. 1295–1302.
<https://doi.org/10.1002/pssb.201600049>
22. *Lee J.-H., Loya P., Lou J., Thomas E.* Dynamic mechanical behavior of multilayer graphene via supersonic projectile penetration // *Science.* 2014. V. 346. № 6213. P. 1092–1096.
<https://doi.org/10.1126/science.1258544>
23. *Lin Y., Liyong T.* Suspended monolayer graphene traps high-speed single-walled carbon nanotube // *Carbon.* 2016. V. 107. P. 689–695.
<https://doi.org/10.1016/j.carbon.2016.06.041>
24. *Shepelev I.A., Chetverikov A.P., Dmitriev S.V., Korznikova E.A.* Shock waves in graphene and boron nitride // *Comput. Mater. Sci.* 2020. V. 177. P. 109549.
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109549>
25. *Rysaeva L.K., Korznikova E.A., Murzaev R.T., et al.* Elastic damper based on the carbon nanotube bundle // *FU Mech. Eng.* 2020. V. 18. № 1. P. 1–12.
<https://doi.org/10.22190/FUME200128011R>
26. *Korznikova E.A., Rysaeva L.K., Savin A.V., et al.* Chain model for carbon nanotube bundle under plane strain conditions // *Materials.* 2019. V. 12. № 23. P. 3951.
<https://doi.org/10.3390/ma12233951>
27. *Savin A.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V.* Scroll configurations of carbon nanoribbons // *Phys. Rev. B.* 2015. V. 92. P. 035412.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.035412>
28. *Savin A.V., Savina O.I.* Elastic and plastic deformations of multilayer packings of carbon nanotubes on a flat substrate // *Journal of Experimental and Theoretical Physics.* 2022. P. 75–85.
<https://doi.org/10.31857/S0044451022010072>
29. *Rysaeva L.K., Bachurin D.V., Murzaev R.T., et al.* Evolution of the carbon nanotube bundle structure under biaxial and shear strains // *FU Mech. Eng.* 2020. V. 18. № 4. P. 525–536.
<https://doi.org/10.22190/FUME201005043R>

30. *Savin A.V., Savina O.I.* Dynamics of Carbon Nanotube Chains Located on Flat Substrates // *Solid State Physics*. 2021. P. 137.
<https://doi.org/10.21883/FTT.2021.01.50412.183>
31. *Savin A.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V.* Modeling of Folded and Rolled Packings of Carbon Nanoribbons // *Solid State Physics*. 2015. P. 2278.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.235411>
32. *Savin A.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V.* Dynamics of surface graphene ripplocations on a flat graphite substrate // *Phys. Rev. B*. 2019. V. 99. P. 235411.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.235411>
33. *Dmitriev S.V., Morkina A.Y., Tarov D.V. et al.* Effect of repetitive high-density current pulses on plastic deformation of copper wires under stepwise loading // *Spec. Mech. Eng. Oper. Res.* 2024. V. 1. № 1. P. 27–43.
<https://doi.org/10.31181/smeor1120243>
34. *Liew K.M., Wong C.H., He X.Q., Tan M.J., Meguid S.A.* Nanomechanics of single and multiwalled carbon nanotubes // *Phys. Rev. B*. 2004. V. 69. № 11. P. 115429.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.115429>
35. *Safaei B., Naseradinmousavi P., Rahmani A.* Development of an accurate molecular mechanics model for buckling behavior of multi-walled carbon nanotubes under axial compression // *J. Mol. Graph. Model.* 2016. V. 65. P. 43–60.
<https://doi.org/10.1016/j.jmglm.2016.02.001>
36. *Chang W., Liu F., Liu Y. et al.* Smallest carbon nanowires made easy: Long linear carbon chains confined inside single-walled carbon nanotubes // *Carbon*. 2021. V. 183. P. 571–577.
<https://doi.org/10.1016/j.carbon.2021.07.037>