

**Молекулярная динамика углеродной нанотрубки  
в качестве зонда АСМ**

Баркалин В.В., Бабичева В. М., Чижик С.А.

Белорусский национальный технический университет

Применение углеродных нанотрубок (УНТ) в качестве зондов-манипуляторов в атомно-силовой микроскопии (АСМ) позволяет повысить разрешающие возможности метода, а также реализовать новые методики в наноиндентировании и манипулировании нанообъектами.

В работе выполнено моделирование процесса касания торцом нанотрубки исследуемого объекта, т. е. наноиндентирования. Модель базируется на подходах метода молекулярной динамики. В качестве моделируемого зонда-индентора рассматривалась одностенная углеродная нанотрубка с закрытым концом. Учитывается атомарная структура УНТ. Поверхность образца предполагалась абсолютно жесткой и рассматривались только особенности деформирования нанотрубки. Позиционирование индентора согласовывалось с геометрическими схемами АСМ. Процесс сближения УНТ индентора с поверхностью образца дискретизировался во времени.

Выделены два этапа деформирования УНТ: упругий изгиб и деформирование с потерей устойчивости. Показано, что положение точки потери устойчивости существенно зависит от геометрических размеров и атомарной структуры УНТ, например, от ее длины и диаметра, который определяется хиральным устройством УНТ.

На упругом участке кривой деформирования были вычислены значения модуля упругости УНТ, который составил около 1 ТПа без существенной зависимости от хиральности УНТ. Данный результат согласуется с известными литературными данными. Моделирование процесса деформирования в наиболее «жестких» условиях торцевого контакта позволило оценить предельную прочность УНТ в условиях осевого сжатия.

Полученные данные могут быть использованы при характеристике углеродных наноструктур, а также при развитии методов наноиндентирования на базе АСМ.