

Зернин Кирилл Дмитриевич, студент
ИжГТУ имени М. Т. Калашникова
Zernin Kirill Dmitrievich

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИИ И РАЗРУШЕНИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF DEFORMATION AND FRACTURE OF CARBON NANOTUBES

Аннотация. Представлены результаты молекулярно-динамического моделирования одноосного растяжения углеродных нанотрубок в LAMMPS с потенциалом AIREBO. Исследованы стадии деформации и разрушения, а также влияние диаметра на прочность. Полученные характеристики подтверждают применимость атомистического подхода для оценки механического поведения углеродных наноструктур.

Abstract. Molecular dynamics simulation results for uniaxial tension of carbon nanotubes in LAMMPS with the AIREBO potential are presented. Deformation and fracture stages and the effect of diameter on strength are studied. The obtained characteristics confirm the applicability of the atomistic approach to evaluating the mechanical behavior of carbon nanostructures.

Ключевые слова: Углеродная нанотрубка, молекулярная динамика, LAMMPS, AIREBO, деформация, разрушение.

Keywords: Carbon nanotube, molecular dynamics, LAMMPS, AIREBO, deformation, fracture.

ВВЕДЕНИЕ

Углеродные нанотрубки относятся к наиболее перспективным объектам современной наномеханики. Сочетание малой плотности, высокой жесткости, значительной прочности, теплопроводности и электрической проводимости определяет интерес к их применению в композиционных материалах, микро- и наноэлектронике, энергетике, сенсорных системах и аэрокосмической технике [1–3]. Практическое использование этих свойств требует понимания механизмов деформации и разрушения материала на атомном уровне.

АКТУАЛЬНОСТЬ, ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ИССЛЕДОВАНИЯ

Экспериментальное определение механических характеристик отдельной нанотрубки связано с существенными трудностями. Наноразмер объекта осложняет его фиксацию, приложение контролируемой нагрузки и прямое измерение локальных деформаций. Результаты испытаний чувствительны к геометрии образца, хиральности, температуре, числу стенок и наличию вакансий или топологических дефектов. Поэтому экспериментальные методы целесообразно дополнять расчетным исследованием, позволяющим проследить движение каждого атома и изменение связей во времени.

Метод молекулярной динамики основан на численном интегрировании уравнений движения системы взаимодействующих атомов. Он обеспечивает прямое описание процессов упругого растяжения, накопления структурных нарушений и окончательного разрыва углеродного каркаса. В отличие от континуальных моделей, атомистический подход учитывает дискретное строение материала и позволяет связать макроскопическую кривую «напряжение–деформация» с конкретными перестройками решетки.

Целью исследования являлось моделирование деформационного поведения и разрушения углеродной нанотрубки при одноосном растяжении. Для достижения цели решались задачи анализа строения и механических свойств нанотрубок; выбора метода и программной среды; построения атомистической модели; задания потенциала межатомного взаимодействия и граничных условий; проведения вычислительного эксперимента; определения напряжения и критической деформации; исследования влияния диаметра и дефектов; сопоставления результатов с опубликованными данными.



Объект исследования – однослойные углеродные нанотрубки. Предмет исследования – закономерности изменения их механического состояния в процессе растяжения и разрушения. Научная значимость работы состоит в согласованном рассмотрении параметров модели, расчетной схемы и атомистического механизма разрушения. Практическая значимость связана с возможностью использования результатов при проектировании высокопрочных наноконструкций и выборе геометрических характеристик армирующих элементов.

Особое внимание уделено воспроизводимости расчета. Параметры интегрирования, температурный режим, способ фиксации краевых атомов и скорость их перемещения должны быть заданы так, чтобы наблюдаемое разрушение определялось свойствами нанотрубки, а не численной неустойчивостью или краевыми эффектами.

СТРОЕНИЕ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОТРУБОК

Однослойную углеродную нанотрубку можно представить как графеновый лист, свернутый в цилиндр. Атомы углерода находятся преимущественно в состоянии sp^2 -гибридизации и образуют гексагональную сетку с прочными ковалентными связями. Геометрия сворачивания задается хиральными индексами (n, m) , определяющими диаметр, симметрию и часть электронных свойств структуры. Различают конфигурации armchair, zigzag и хиральные трубки [2, 4].

Высокая прочность связи C–C обеспечивает модуль Юнга порядка 1 ТПа и значительную предельную деформацию. При растяжении идеальной нанотрубки начальный участок диаграммы близок к линейному и соответствует обратимой деформации связей. По мере увеличения нагрузки возрастает нелинейность отклика, изменяются валентные углы и длины связей. После достижения критического состояния локальная неустойчивость вызывает последовательный разрыв связей, образование трещиноподобной области и потерю целостности каркаса [5–7].

Таким образом, механическое поведение нанотрубки является результатом совместного действия атомной структуры, геометрии, дефектности и условий нагружения. Для корректного описания такого комплекса факторов необходим реактивный потенциал, способный учитывать изменение координации атомов и разрыв химических связей.

МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И ПОТЕНЦИАЛ AIREBO

В молекулярной динамике траектории атомов определяются интегрированием второго закона Ньютона: $m_i d^2 r_i / dt^2 = F_i$, где m_i и r_i – масса и радиус-вектор i -го атома, $F_i = -\nabla_i U$ – сила, вычисляемая по потенциальной энергии системы U . Численное решение выполняется с малым временным шагом, достаточным для разрешения быстрых колебаний атомов. В работе использован шаг 0,0005 пс, то есть 0,5 фс.

Расчеты проводились в LAMMPS – программном комплексе для параллельного атомистического моделирования [8]. Его возможности включают работу с большими системами, применение различных межатомных потенциалов, управление ансамблями, задание сложных граничных условий и регистрацию термодинамических параметров. Для обработки выходных данных использовались средства Python, включая NumPy, Pandas и Matplotlib.

Взаимодействие атомов углерода описывалось потенциалом AIREBO. Его полная энергия включает реактивную составляющую REBO, дальнедействующее взаимодействие Леннарда – Джонса и торсионный вклад: $U = U_{REBO} + U_{LJ} + U_{torsion}$. Реактивная часть зависит от локального окружения атомов и позволяет моделировать образование и разрыв связей. Это принципиально важно для исследования предельной стадии растяжения, которую нельзя корректно представить моделью с неизменяемым списком связей [9].

Начальная конфигурация предварительно уравнивалась при температуре 300 К. Центральная область поддерживалась в каноническом ансамбле NVT с термостатом Нозе – Гувера, а движение краевых групп рассчитывалось в ансамбле NVE с дополнительным заданием сил и скоростей. Такое разделение исключало включение механически перемещаемых краев в расчет температуры и уменьшало искажение температурного режима.



Относительная деформация определялась как $\varepsilon = (L - L_0)/L_0$, где L_0 и L – начальная и текущая длины между центрами масс краевых групп. Напряжение рассчитывалось отношением продольной силы к принятой площади поперечного сечения. Поскольку определение эффективной площади полой нанотрубки неоднозначно, абсолютные значения напряжения следует интерпретировать вместе с принятой геометрической моделью сечения.

ПОСТРОЕНИЕ РАСЧЕТНОЙ МОДЕЛИ

Нанотрубка располагалась вдоль оси X в свободной расчетной ячейке. Атомы были разделены на три группы: `cnt_bot` – левый край, `cnt_top` – правый край и `cnt_mid` – центральная рабочая область. Краевые группы использовались для приложения растягивающего воздействия, а центральная часть – для термостатирования и анализа структурных изменений. Межатомные связи не задавались явно, поскольку их текущая конфигурация определялась потенциалом AIREBO.

Исходные данные загружались из файла `breakable.data` в системе единиц `metal` при атомарном стиле представления частиц. После определения координатных границ рабочей области выполнялось формирование групп и, в отдельных расчетах, случайное удаление 2 % атомов из центральной зоны. Ограничение области удаления исключало искусственное возникновение дефектов непосредственно в захватах и позволяло исследовать их влияние на разрушение основной части образца.

Перед нагружением центральной группе назначалось распределение скоростей, соответствующее 300 K, с исключением суммарного поступательного и вращательного движения. Краевые атомы фиксировались, затем система уравнивалась в течение 10000 шагов. Контролировались температура центральной части и полная энергия. Отсутствие направленного дрейфа и стабилизация средних значений служили признаками достижения пригодного начального состояния.

После релаксации краевым группам сообщались противоположно направленные скорости вдоль оси X . В основном варианте модели использовались скорости $\pm 0,25$ Å/пс; в методической части также анализировалась схема $\pm 0,75$ Å/пс. Растяжение выполнялось в течение 30000 шагов. Каждые 100 шагов сохранялись длина, сила, температура, энергия, деформация и напряжение. Координаты атомов и изображения конфигурации записывались с интервалом 500 шагов.

Алгоритм вычислительного эксперимента включал пять этапов: построение и проверку структуры; температурное уравнивание; контролируемое растяжение; регистрацию параметров; анализ момента разрушения. Критериями корректности являлись устойчивость интегрирования, сохранение температурного режима, линейный характер начального участка диаграммы, локализация разрыва вне краевых групп и физически правдоподобная последовательность атомных перестроек.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Полученная зависимость напряжения от относительной деформации содержит несколько характерных стадий. На начальном участке наблюдается практически линейный рост напряжения, соответствующий упругому удлинению связей. Структура сохраняет цилиндрическую форму, а после снятия небольшой нагрузки способна вернуться к исходному состоянию. Далее наклон кривой изменяется, что свидетельствует о переходе к нелинейному отклику углеродной сетки.

При дальнейшем растяжении возрастают межатомные расстояния и неоднородность распределения локальных деформаций. Отдельные участки становятся потенциальными центрами разрыва. Вблизи максимума напряжения изменение геометрии ускоряется, а нагрузка концентрируется на ограниченном числе связей. После достижения предельного состояния происходит резкое падение силы, сопровождаемое разрывом связей C–C и нарушением целостности нанотрубки.



Для основной расчетной модели максимальное напряжение составило около 401 ГПа, а критическая деформация – 24,3 %. Число атомов в рассматриваемой конфигурации равнялось 476. Полученная величина модуля Юнга находилась около 1 ТПа. Следует учитывать, что значение напряжения зависит от способа определения площади сечения, геометрии модели, скорости нагружения и дефектности, поэтому наиболее надежными являются совместный анализ диаграммы и наблюдаемого атомистического механизма.

Полная энергия системы на стадии растяжения плавно возрастала по мере накопления энергии деформации. Отсутствие нерасчетных скачков до предельной стадии подтверждает устойчивость численного интегрирования. В момент разрушения характер энергетической зависимости изменялся вследствие перестройки и разрыва связей. Температура центральной области колебалась преимущественно в диапазоне 270–330 К около заданного значения 300 К.

Атомистические конфигурации подтверждают хрупкий характер разрушения. До достижения критической нагрузки нанотрубка сохраняет общую целостность, однако затем локальный дефект быстро развивается в поперечный разрыв. Наблюдаемое падение напряжения, изменение энергии и потеря связности происходят согласованно и образуют комплексный критерий разрушения.

ВЛИЯНИЕ ДИАМЕТРА И ДЕФЕКТОВ

Для оценки геометрического фактора были сопоставлены однослойные нанотрубки armchair с индексами (8,8), (10,10) и (12,12). Их диаметры составляли соответственно 1,085; 1,356 и 1,627 нм. Все варианты рассчитывались при одинаковой температуре 300 К, одинаковом шаге интегрирования и единой схеме нагружения, что позволяло выделить влияние диаметра.

Максимальное напряжение для трубки (8,8) составило 300,434 ГПа, для (10,10) – 244,462 ГПа, для (12,12) – 200,944 ГПа. Таким образом, увеличение диаметра от 1,085 до 1,627 нм сопровождалось уменьшением регистрируемой прочности приблизительно на 33 %. Результат указывает на выраженную зависимость предельного напряжения от кривизны и геометрии стенки в рамках принятой расчетной схемы.

Критическая деформация изменилась существенно меньше: 25,898 % для (8,8), 26,112 % для (10,10) и 26,428 % для (12,12). Разница между крайними вариантами не превышала 0,53 процентного пункта. Следовательно, диаметр заметно влияет на уровень напряжения, но механизм достижения предельного удлинения остается близким для всех исследованных armchair-конфигураций.

Оценка модуля Юнга дала 0,97 ТПа для (8,8), 1,01 ТПа для (10,10) и 1,04 ТПа для (12,12). Небольшой рост модуля с диаметром согласуется с уменьшением роли кривизны: при большем радиусе локальная структура приближается к плоскому графеновому листу. Все значения соответствуют характерному для однослойных углеродных нанотрубок диапазону порядка 1 ТПа [5–7].

Вакансионные дефекты снижали несущую способность структуры и определяли место зарождения разрушения. Удаление атомов нарушает равномерное распределение сил и создает локальную концентрацию напряжений. В результате критический разрыв возникает раньше, чем в идеальной решетке. Этот эффект необходимо учитывать при переносе расчетных характеристик на реальные наноматериалы, всегда содержащие структурные несовершенства.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Рассчитанные механические характеристики находятся в диапазоне результатов атомистических исследований углеродных нанотрубок, хотя абсолютные значения в публикациях существенно различаются. Разброс обусловлен хиральностью, диаметром, длиной модели, температурой, скоростью деформирования, выбранным потенциалом и способом определения площади поперечного сечения [5–7, 10]. Поэтому прямое сравнение одной величины предела прочности без анализа расчетной методики недостаточно.



Полученное в основной модели значение около 401 ГПа выше ряда экспериментальных оценок. Одной из причин является идеализированная атомистическая постановка и высокая скорость нагружения, характерная для доступного временного масштаба молекулярной динамики. Дополнительный вклад вносит использование площади сплошного кругового сечения. Для полый однослойной оболочки возможны другие определения эффективной площади, приводящие к иному численному напряжению при той же продольной силе.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом молекулярной динамики в LAMMPS исследовано одноосное растяжение однослойных углеродных нанотрубок. Реактивный потенциал AIREBO обеспечил описание нелинейной деформации и разрыва связей C–C. Расчетная схема включала разделение структуры на краевые и центральную группы, термостатирование рабочей области при 300 К, предварительное уравнивание и контролируемое перемещение краев.

Установлена последовательность стадий механического отклика: упругая деформация, нелинейное растяжение, локализация структурных нарушений и хрупкое разрушение. Для основной модели максимальное напряжение составило около 401 ГПа, критическая деформация – 24,3 %, модуль Юнга – порядка 1 ТПа. Для трубок (8,8), (10,10) и (12,12) увеличение диаметра сопровождалось снижением максимального напряжения с 300,434 до 200,944 ГПа, тогда как критическая деформация оставалась около 26 %.

Результаты подтверждают высокую продольную жесткость углеродных нанотрубок и чувствительность их прочности к геометрии и дефектам. Разработанный подход пригоден для сравнительной оценки наноструктур и дальнейшего исследования влияния хиральности, температуры, скорости нагружения и межфазного взаимодействия в композитах.

Список литературы:

1. Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon // Nature. 1991. Vol. 354. P. 56–58.
2. Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Eklund P. C. Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes. San Diego: Academic Press, 1996. 965 p.
3. Popov V. N. Carbon nanotubes: properties and application // Materials Science and Engineering R. 2004. Vol. 43. P. 61–102.
4. Saito R., Dresselhaus G., Dresselhaus M. S. Physical Properties of Carbon Nanotubes. London: Imperial College Press, 1998. 259 p.
5. Treacy M. M. J., Ebbesen T. W., Gibson J. M. Exceptionally high Young modulus observed for individual carbon nanotubes // Nature. 1996. Vol. 381. P. 678–680.
6. Yu M.-F. et al. Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load // Science. 2000. Vol. 287. P. 637–640.
7. Yakobson B. I., Brabec C. J., Bernholc J. Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear response // Physical Review Letters. 1996. Vol. 76. P. 2511–2514.
8. Thompson A. P. et al. LAMMPS – a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // Computer Physics Communications. 2022. Vol. 271. Art. 108171.
9. Stuart S. J., Tutein A. B., Harrison J. A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions // Journal of Chemical Physics. 2000. Vol. 112. P. 6472–6486.
10. Mielke S. L. et al. The role of vacancy defects and holes in the fracture of carbon nanotubes // Chemical Physics Letters. 2004. Vol. 390. P. 413–420.

