

СОЕДИНЕНИЯ "НАНОАЛМАЗ-НАНОТРУБА": КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ, ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ И МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ.

Бец К.В., Чернозатонский Л.А.

Чернозатонскому Л.А. 119934 Москва ул.Косыгина 4, ИБХФ РАН (для Бец К)

В последнее время большое внимание исследователей обращается на механические свойства углеродных нанотрубных структур. Это - возможность их использования в механоэлектрических наносистемах (МЭМ), а также как компонент полимерных композитов для существенного улучшения упругих и прочностных свойств. Как правило, моделирование подобных структур из большого (1000 атомов) проводится методами молекулярной динамики (МД), позволяющими проводить численные эксперименты по воздействию температуры и давления на такие объекты за достаточно обозримое время на персональном компьютере.

В данном докладе рассматривается программа МД моделирования углеродных наноструктур с эмпирическим потенциалом Бреннера. Приводятся результаты МД моделирования новых углеродных структур типа сеток из соединений наноалмазного кластера с несколькими углеродными нанотрубками. Показано их высокая стабильность по отношению к воздействию температуры и давления, а данные по их уникальным упругим характеристикам позволяют предсказать их широкое использование в наномеханических системах.