

## Моделирование индентора на основе углеродной нанотрубки

Баркалин В.В., Чашинский А.С.,  
Волков Н.Н., Волков Н.Д.

Белорусский национальный технический университет

Углеродные нанотрубки обладают рекордным значением жесткости и могут использоваться в качестве наконечников зондов атомно-силового микроскопа. Внедрение нанотрубок в технику атомно-силового микроскопа сдерживается сложностью осуществления манипуляций с отдельными нанотрубками субмикронных размеров. В настоящее время широко изучаются особенности деформирования нанотрубки при осевом сжатии и растяжении.

В работе представлены результаты моделирования методом молекулярной динамики взаимодействия зонда из углеродных нанотрубок с поверхностью образца.

Рассматривалась одностенная углеродная нанотрубка (10,10), длиной 11 нм с фуллереновой крышкой. В качестве образца брался нанокристалл алмаза с поверхностью (001). При проведении расчетов нанотрубка была повернута на  $10^\circ$  относительно нормали к подложке. Нанотрубка оставалась неподвижной, а перемещение нанокристалла алмаза происходило с шагом в 1 Å. После каждого шага проводилась оптимизация геометрии до достижения градиента поля 0.01 а.е. Максимальное смещение подложки во время моделирования составило 13 Å.

При оптимизации нижний слой нанокристалла алмаза и верхний открытый конец углеродной нанотрубки оставались неподвижными. Использовалась потенциальная функция взаимодействия между атомами MM+. В результате сближения атомов начинает деформироваться фуллереновая крышка на торце нанотрубки, а затем данная деформация передается на нанотрубку. Перегиб нанотрубки происходит в средней части нанотрубки и смещается к закрепленному концу. Получена зависимость силы, приложенной к концу трубки, от ее нормального смещения.