

УДК 534.01: 539.6

## МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА, УСТОЙЧИВОСТЬ, КОРОБЛЕНИЕ ГРАФЕНОВЫХ ЛИСТОВ И УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК (ОБЗОР)

Б. Д. Аннин<sup>\*,\*\*</sup>, Ю. А. Баимова<sup>\*\*\*,\*\*\*\*</sup>, Р. Р. Мулюков<sup>\*\*\*,\*\*\*\*</sup>

\* Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия

\*\* Новосибирский национальный исследовательский государственный университет,  
630090 Новосибирск, Россия

\*\*\* Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, 450001 Уфа, Россия

\*\*\*\* Башкирский государственный университет, 450076 Уфа, Россия  
E-mails: abd@hydro.nsc.ru, julia.a.baimova@gmail.com, radik@imsp.ru

Представлен обзор работ, посвященных исследованию механических свойств, устойчивости и выпучивания графена и углеродных нанотрубок. Большая часть приведенных результатов получена методами молекулярной динамики и молекулярной механики, которые позволяют эффективно исследовать механические свойства и устойчивость наноструктур. Представлены данные о прочности графена, проанализированы изгибные моды для графеновых листов “кресло” и “зигзаг”. Проведен анализ устойчивости и изгибных мод собственных колебаний нанотрубок “зигзаг” и “кресло”.

Ключевые слова: графен, нанотрубки, механические свойства, моделирование, углеродные структуры.

DOI: 10.15372/PMTF20200519

### ВВЕДЕНИЕ

В последнее время большое внимание уделяется исследованию наноматериалов, обладающих уникальными по сравнению с традиционными материалами свойствами [1–4]. В отдельную группу можно выделить углеродные наноматериалы: фуллерены, нанотрубки (НТ) и графен. В настоящее время изучение углеродных наноматериалов трансформировалось в отдельную область науки, в которой помимо основных полиморфов углерода (НТ, фуллеренов и графена) исследуются более сложные комплексные структуры на их основе, прогнозируется появление новых углеродных материалов и рассматриваются перспективы их применения [5–11]. Свойства таких наноматериалов во многом определяются свойствами структурных единиц — графена и НТ. При исследовании наноматериалов важной задачей является изучение устойчивости, механических свойств, изгиба и колебаний наноструктур [12, 13].

Среди всех известных полиморфов углерода следует выделить графен и углеродные НТ — структуры, обладающие уникальными свойствами [14–16]. Графен — моноатом-

---

Работа частично выполнена в рамках государственных заданий Института проблем сверхпластичности металлов РАН и Института гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН.

© Аннин Б. Д., Баимова Ю. А., Мулюков Р. Р., 2020

ный слой атомов углерода — представляет собой очень легкий материал: его поверхностная плотность составляет  $0,77 \text{ мг/м}^2$ , в то время как площадь свободной поверхности —  $2600 \text{ м}^2/\text{г}$ .

При исследовании механических свойств углеродных наноструктур широко применяются методы молекулярной динамики (МД) [17–19] и молекулярной механики (ММ) [20–27]. С помощью этих методов были изучены устойчивость, критические нагрузки и деформации различных наноструктур. Для наноструктур большую роль играет описание дискретности среды, что может быть реализовано с помощью метода МД или ММ, при этом механизмы деформирования или разрыва могут быть проанализированы на атомарном уровне [28–31]. В работах [18, 32, 33] предложены модели для исследования устойчивости и изгибного поведения наноструктур, например модель парного моментного взаимодействия, согласно которой каждая частица имеет три степени свободы (две поступательные и одну вращательную). На основе этой модели исследовано распространение плоских волн в графене [34]. Следует отметить, что метод ММ, в отличие от метода МД, при действии консервативных внешних сил позволяет использовать критерии выпучивания наноструктур [20], с высокой точностью определять критические параметры деформирования, формы выпучивания наноструктур, а также частоты и формы собственных колебаний.

## 1. ГРАФЕН И УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ: СТРУКТУРА, МОДЕЛЬ И СВОЙСТВА

**1.1. Графен.** Структура графена представлена на рис. 1. Атомы углерода в решетке уложены в гексагоны (“пчелиные соты”), расстояние между ближайшими атомами равно  $a_0 = 0,142 \text{ нм}$ , постоянная решетки —  $0,246 \text{ нм}$ . Взаимодействие атомов углерода в решетке графена происходит за счет сильной  $\sigma$ -связи через перекрытие  $sp^2$ -орбиталей в плоскости. В графене выделяются два высокосимметричных направления: “кресло” и “зигзаг” (см. рис. 1), вдоль которых свойства графена существенно различаются.

Известно, что поведение электронов в графене подобно поведению релятивистских частиц, не имеющих массы (фермионы Дирака). При малых значениях энергии и больших длинах волн электроны в графене характеризуются не массой, а скоростью их распространения, так называемой скоростью Ферми — Дирака, значение которой составляет порядка  $10^6 \text{ мс}^{-1}$  (приблизительно в 300 раз меньше скорости света). При этом движение электронов в графене описывается релятивистскими волновыми уравнениями.

Обычно графен представляется в виде плоского двумерного листа атомов углерода, однако в действительности на его поверхности имеются складки (изгибные волны). Такие волны возникают на поверхности всех образцов графена толщиной  $40 \div 70 \text{ \AA}$  (так называемая длина Гинзбурга).

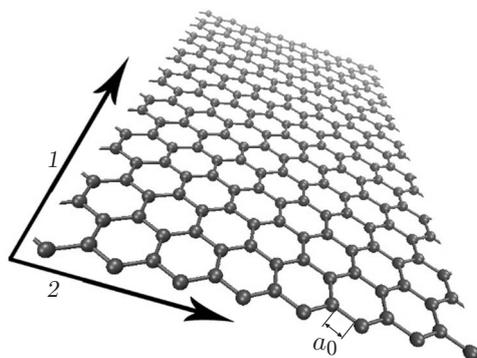


Рис. 1. Структура графена:

1 — направление “кресло”, 2 — направление “зигзаг”

В течение длительного времени считалось, что двумерные материалы, подобные графену, в природе не существуют [35, 36]. Свойства моноатомных слоев графена, осажденных на подложке, определяются как взаимодействием атомов внутри слоя, так и взаимодействием атомов углерода с атомами подложки и поэтому значительно отличаются от свойств однослойного свободного графена. Образование складок может быть вызвано как механическим воздействием подложки, так и термофлуктуациями [37–39]. Появление складок, особенно неупорядоченных, приводит к нарушению симметрии структуры и оказывает существенное влияние на электронные и проводящие свойства графена [40, 41].

Изменение электронных свойств графена в состоянии коробления обусловлено изменением межатомного расстояния, вращением  $p_z$ -орбиталей и изменением гибридизации вследствие перестройки  $\pi$ - и  $\sigma$ -связей. В работе [42] показано различие электронных свойств плоских и “смятых” участков графена. Ранее был предложен метод контролируемого формирования слоя графена с ориентированными складками путем термоциклирования графена на подложке [43], позволяющий управлять амплитудой и длиной складок. Параметрами складок (длиной волны, амплитудой и ориентацией) можно также управлять посредством упругой деформации.

Нелинейное взаимодействие волн двух типов не позволяет мембране сжаться, однако принято считать, что в свободном состоянии графен не остается плоским. Если отношение длины образца графена к его ширине достаточно велико (узкая графеновая нанолента), то такая структура начинает самопроизвольно скручиваться. Скручиваясь, ленты графена могут образовывать многослойные графеновые рулоны различного диаметра [5–11].

**1.2. Углеродные нанотрубки.** Свое название углеродные НТ получили вследствие малых поперечных размеров. Углеродные НТ являются уникальными макромолекулярными системами. Очень малый (порядка  $10^{-9}$  м) диаметр и большая (порядка  $10^{-6}$  м) длина НТ свидетельствуют о том, что их структура наиболее близка к структуре идеальных одномерных систем.

Нанотрубка может быть получена сворачиванием графенового листа. В зависимости от характера поперечного среза НТ в направлении хиральности  $(m, 0)$  называются НТ “зигзаг”, а НТ в направлении хиральности  $(m, m)$  — “кресло” (рис. 2). Диаметр углеродных НТ находится в диапазоне от одного до нескольких десятков нанометров, а длина составляет десятки микрометров и постоянно увеличивается по мере совершенствования технологии их получения.

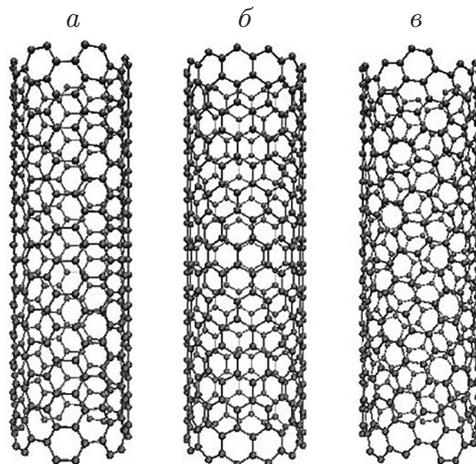


Рис. 2. Типы НТ:

$a$  — НТ “кресло”,  $b$  — НТ “зигзаг”,  $v$  — хиральная НТ

Углеродные НТ исследуются с момента их получения в 1991 г. японским ученым С. Ииджима [15]. Уникальные электрические, тепловые и механические свойства НТ позволяют применять их в нанoeлектронике, при изготовлении сенсоров и при создании композитных материалов [44, 45]. В настоящее время существуют различные способы получения углеродных НТ (арочно-дуговой, метод химического осаждения паров, пиролиз, лазерное испарение графита и др.) [46]. История открытия, способы получения и основные свойства углеродных НТ достаточно полно изложены в работах [45, 47].

Величина теплопроводности многостенных углеродных НТ при комнатной температуре составляет более 3000 Вт/(м·К) [48]. Для одностенной нанотрубки (5, 5) было показано, что теплопроводность пропорциональна длине углеродной НТ  $L$ :  $\kappa \sim L\beta$ , где коэффициент  $\beta$  зависит от температуры  $T$  и изменяется в диапазоне от 0,4 при  $T = 300$  К до 0,26 при  $T = 800$  К. Уменьшение коэффициента  $\beta$  объясняется тем, что при высоких температурах амплитуда поперечных колебаний значительно больше, чем при низких, поэтому сила взаимодействия поперечных и продольных колебаний увеличивается. Аналогичная зависимость теплопроводности от длины обнаружена для одностенной НТ (8, 8). Экспериментально это соотношение было подтверждено для многостенных НТ, для которых коэффициент  $\beta$  варьировался в диапазоне от 0,6 до 0,9 при комнатной температуре.

**1.3. Моделирование поведения наноструктуры.** Для моделирования поведения наноструктуры в рамках уравнений наномеханики можно записать уравнения движения

$$M\ddot{\mathbf{U}} + \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{R}, \quad \mathbf{U}(0) = \mathbf{U}_0, \quad \dot{\mathbf{U}}(0) = \mathbf{V}_0, \quad (1)$$

где  $\mathbf{F}$ ,  $\mathbf{R}$  — векторы внутренних и внешних сил ансамбля атомов соответственно;  $\mathbf{U}$ ,  $\mathbf{U}_0$ ,  $\mathbf{V}_0$  — векторы перемещений и заданных начальных перемещений и скоростей атомов соответственно;  $M$  — диагональная матрица масс с массами атомов на главной диагонали; точка над величиной обозначает частную производную этой величины по времени  $t$ .

Вектор внутренних сил полагается потенциальным:

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \frac{\partial V(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}}.$$

Здесь  $V(\mathbf{U})$  — потенциальная энергия внутренних сил.

С использованием метода ММ уравнения (1) решаются численно с помощью неявной схемы интегрирования Ньюмарка. При пошаговом интегрировании уравнений (1) методом Ньюмарка требуется определение симметричной матрицы касательной жесткости наноструктуры

$$K \equiv \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} = \frac{\partial^2 V(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U} \partial \mathbf{U}},$$

где вектор  $\mathbf{F}$  и матрица  $K$  определяются по формулам

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \sum_{m=1}^M \mathbf{F}^m(\mathbf{U}^m), \quad K(\mathbf{U}) = \sum_{m=1}^M K^m(\mathbf{U}^m),$$

$\mathbf{U}^m$  — вектор перемещений элемента наноструктуры.

В рамках данной модели элементы графена и НТ (элемент состоит из  $N$  атомов) имеют  $N$ -частичные потенциалы, где  $N = 2, 3, 4$  в соответствии с полем потенциальных сил DREIDING [20, 49]. Энергию ковалентных связей атомов углерода в графеноподобных наноструктурах можно описать как вклад энергии  $N$  химических связей и энергии, затраченной на изменение углов между соседними химическими связями.

Для определения потенциальной энергии центральных сил взаимодействия атомов атомной пары (рис. 3, *a*) используется потенциал Морзе ( $N = 2$ ):

$$V_b(r_n) \equiv D(e^{-2\alpha(r-r_e)} - 2e^{-\alpha(r-r_e)}).$$

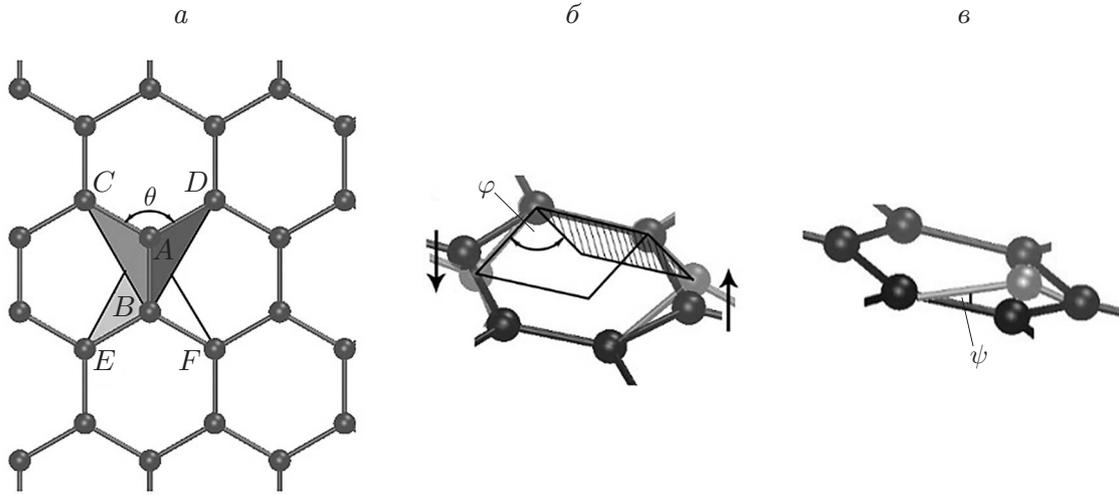


Рис. 3. Углы, соответствующие различным слагаемым в выражении для потенциала:  
*a* — угол  $\theta$  между соседними ковалентными связями, *б* — двугранный угол  $\varphi$ , *в* — угол инверсии  $\psi$

Здесь  $D = 0,603\ 105$  аДж — глубина потенциальной ямы;  $r$  — расстояние между атомами в паре;  $r_e = 0,142$  нм — расстояние между атомами, соответствующее минимальному значению потенциальной энергии;  $\alpha = 26,25\ \text{нм}^{-1}$  — параметр, определяющий форму потенциала.

Энергию, затраченную на изменение угла  $\theta$  между соседними ковалентными связями (см. рис. 3, *a*), выразим через потенциальную функцию ( $N = 3$ ):

$$V_{\theta}(\theta) \equiv 0,5k_{\theta}(\cos \theta - \cos \theta_0)^2 / \sin^2 \theta,$$

где  $k_{\theta} = 0,876$  аДж;  $\theta_0 = 120^\circ$  — начальное значение угла  $\theta$ .

Для графена необходимо учитывать дополнительные степени свободы, обусловленные кручением ковалентной связи и выходом атомов углерода из плоскости, а также силы Ван-дер-Ваальса, возникающие между листами графена.

Энергия, затраченная на изменение двугранного угла  $\varphi$  (рис. 3, *б*) вследствие кручения ковалентной связи ( $N = 4$ ), равна

$$V_{da}(\varphi) \equiv 0,5k_{da}(1 - \cos 2\varphi),$$

где  $k_{da} = 0,174$  аДж — константа.

Энергия, затраченная на изменение угла инверсии  $\psi$  (угла, соответствующего выходу атома из плоскости, проходящей через три соседних атома ( $N = 4$ )) (рис. 3, *в*), определяется по формуле

$$V_{ia}(\psi) \equiv k_{ia}(1 - \cos \psi),$$

где  $k_{ia} = 0,278$  аДж — константа.

На рис. 3 показаны углы в углеродной структуре, соответствующие разным частям потенциала.

Для описания сил Ван-дер-Ваальса используется потенциал Леннарда-Джонса:

$$V_v(r) = \begin{cases} 4\varepsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6], & 0 < r < r_{cof}, \\ 0, & r > r_{cof}, \end{cases}$$

где  $\sigma = 0,3412$  нм,  $\varepsilon = 0,000\ 384$  нН · нм — константы потенциала. Данная часть потенциала может учитываться или не учитываться в зависимости от поставленной задачи.

Взаимодействие атомов в НТ описывается выражением

$$V = \sum_{n=1}^N V_b(r_n) + \sum_{l=1}^L V_\theta(\theta_l - \theta_0^l), \quad (2)$$

где  $V_b(r_n)$  ( $1 \leq n \leq N$ ) — потенциальная энергия  $n$ -й химической связи атомов углерода;  $V_\theta(\theta_l - \theta_0^l)$  ( $1 \leq l \leq L$ ) — энергия, затраченная на изменение угла  $\theta_l$  между соседними ковалентными связями;  $\theta_0^l$  — начальное значение угла  $\theta_l$ . Подробно модель описана в работе [50].

Взаимодействие атомов в графене описывается выражением (2), в которое добавлено выражение, учитывающее изменение двугранного угла и угла инверсии в случае нанопленки с гексагональной укладкой атомов:

$$V = \sum_{n=1}^N V_b(r_n) + \sum_{j=1}^J V_\theta(\theta_j) + \sum_{k=1}^K V_{da}(\varphi_k) + \sum_{l=1}^L V_{ia}(\psi_l). \quad (3)$$

Кроме того, в (3) могут быть включены силы Ван-дер-Ваальса, которые позволяют описать взаимодействие краев листа графена.

Для описания углеродных структур методом МД используется потенциал [51, 52]

$$V = V_1(r) + V_2(\theta) + V_3(\varphi) + V_4(\varphi) + V_5(\varphi).$$

Здесь слагаемые  $V_1(r)$ ,  $V_2(\theta)$  — энергия, затраченная на деформацию и изменение углов между ковалентными связями (см. рис. 3, *a*); слагаемые  $V_3(\varphi)$ ,  $V_4(\varphi)$ ,  $V_5(\varphi)$  — энергия, затраченная на изменение торсионных углов между плоскостями, показанными на рис. 3, *a*.

Энергия валентных связей определяется следующим образом:

$$V_1(r_1, r_2) = \varepsilon_1 [e^{-\alpha_0(r-r_e)} - 1]^2$$

( $\varepsilon_1 = 0,795$  аДж — константа, определяющая энергию связи;  $\alpha_0$  — параметр, определяющий форму потенциала).

Потенциал, соответствующий изменению угла между двумя ковалентными связями, принимается в виде

$$V_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \varepsilon_2 (\cos \theta - \cos \theta_0)^2,$$

где  $\varepsilon_2 = 0,21$  аДж — энергия связи.

Для каждой ковалентной связи рассматриваются четыре плоскости (плоскости  $BAE$ ,  $BAF$ ,  $BAC$ ,  $BAD$  на рис. 3, *a*). Энергия, затраченная на изменение шести углов между этими плоскостями, рассчитывается по формуле

$$V_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) = \varepsilon_i (1 - \cos \varphi), \quad i = 3, 4, 5.$$

Здесь  $V_3$  — энергия, затраченная на деформацию углов  $EBAF$  и  $CABD$ ;  $V_4$  — энергия, затраченная на деформацию углов  $EBAD$  и  $CABF$ ;  $V_5$  — энергия, затраченная на деформацию углов  $EBAC$  и  $FBAD$ . Величина энергии  $\varepsilon_4$  близка к  $\varepsilon_3$ , в то время как  $\varepsilon_5 \ll \varepsilon_4$  ( $|\varepsilon_5/\varepsilon_4| < 1/20$ ).

## 2. ГРАФЕН: МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ИЗГИБНЫЕ МОДЫ

**2.1. Механические свойства.** Графен является очень прочным и гибким материалом, обладает уникальными механическими характеристиками. Например, модуль сдвига графена равен 280 ГПа [53], модуль Юнга при растяжении — 1 ТПа [54, 55], прочность — приблизительно 100 ГПа [17], продольная скорость звука — 20 км/с [56]. Недеформированный графен является изотропной упругой средой, а однородно деформированный графен

в целом анизотропен. Графен остается изотропным только при гидростатическом сжатии:  $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} \neq 0$ ,  $\varepsilon_{xy} = 0$ , а в случае ненулевой сдвиговой деформации:  $\varepsilon_{xy} \neq 0$  и ненулевых компонент:  $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} \neq 0$  графен является ортотропным. Достаточно полно механические свойства графена описаны в работах [57, 58].

Бездефектный слой графена имеет большую прочность на растяжение и жесткость, близкую к жесткости графита. Одним из методов определения механических свойств является исследование фононных частот при растягивающих и сжимающих деформациях [59–61]. Для исследования фононных частот при однородном растяжении и гидростатическом давлении применяется метод рамановской спектроскопии [62]. Показано, что в случае растягивающих напряжений фононные частоты уменьшаются, в то время как в случае сжимающих напряжений они увеличиваются.

Основным экспериментальным методом изучения механических свойств однослойного или многослойного графена является атомно-силовая микроскопия (АСМ). В работе [63] метод АСМ использовался при исследовании упругих свойств многослойных (с числом слоев не менее пяти) графеновых систем на подложке из диоксида кремния. Модуль Юнга многослойной системы составил 0,5 ТПа. Аналогичный эксперимент был проведен с монослоем графена [54], модуль Юнга которого составил порядка 1 ТПа. Другим методом определения прочности графена является наноиндентирование [64, 65].

В настоящее время для изучения прочности графена в основном используются методы моделирования, поскольку реализация эксперимента затруднена. В работе [63] методом МД исследовано одноосное растяжение графена в различных хиральных направлениях. В зависимости от угла хиральности критическая деформация разрушения изменяется в диапазоне от 0,178 до 0,283, при этом изменение разрушающего напряжения невелико:  $30,5 \div 35,6$  Н/м. Графен является более прочным в направлении “зигзаг” и менее прочным в направлении “кресло”. Экспериментально получены критическое значение напряжения 42 Н/м ( $(130 \pm 10)$  ГПа) и модуль Юнга, равный 1 ТПа, для подвешенных листов графена при изотропной деформации [54].

Близкие значения модулей упругости, составляющие  $(0,95 \pm 0,05)$  ТПа, найдены в работе [66]. Методом МД [17] получены значения модулей упругости  $(1,01 \pm 0,01)$  ТПа, напряжения на разрыв (90 и 107 ГПа) и величины критической деформации (0,13 и 0,20) в направлениях “кресло” и “зигзаг” соответственно. Кроме того, в результате исследования влияния температуры на величину критических напряжений установлено, что критические напряжения и деформации уменьшаются с ростом температуры [17, 67–69].

В работе [70] изучена пластическая деформация сжатия для листа графена без подложки. Показано, что сжатие вдоль направления “зигзаг” ослабляет края листа графена, расположенные параллельно этому направлению, вследствие локального разрушения вдоль нижнего и верхнего ребер листа ячеистой гексагональной структуры. При сжатии вдоль направления “зигзаг” лист графена сохраняет целостность, утратив при этом лишь небольшое количество атомов.

В направлении “кресло” лист графена не способен выдерживать очень большие напряжения сжатия: даже при небольших деформациях возникают трещины в направлении “зигзаг”. Ряд работ посвящен исследованию упругих свойств двумерных гексагональных кристаллов, в том числе графена [71]. Во многих работах, также посвященных изучению механизмов разрушения листов графена, описан трикотажеподобный механизм разрыва [72].

**2.2. Область устойчивости.** Метод МД применим также для определения области устойчивости графена. Например, в работах [73–75] изучалась неустойчивость плоской решетки графена по отношению ко всем  $3(N - 1) + 3$  модам линейных колебаний ( $N$  — число атомов системы с периодическими граничными условиями). Целесообразно рассмат-

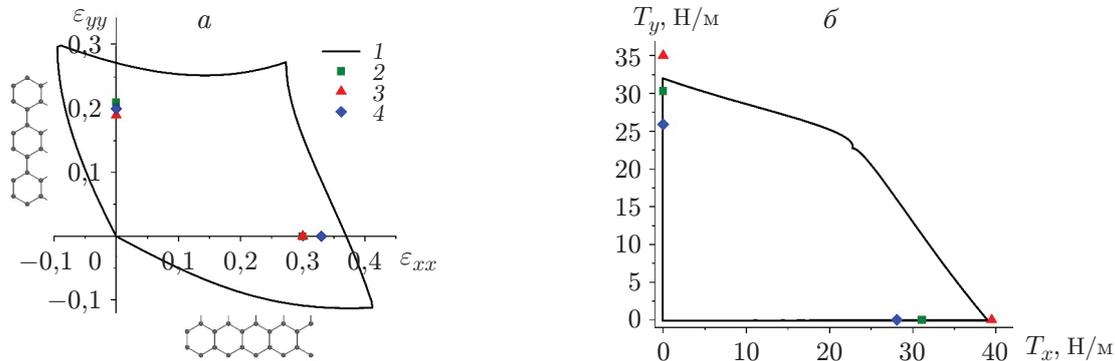


Рис. 4. Области устойчивости графена в плоскости  $(\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy})$  (а) и в плоскости мембранных сил  $(T_x, T_y)$  (б):

1 — данные, полученные авторами настоящей работы методом МД с использованием стандартного набора межатомных потенциалов, 2 — данные, полученные методом DFT, 3 — данные, полученные методом МД с использованием потенциала AIREBO, 4 — данные, полученные методом МД с использованием потенциала REBO

ривать  $3(N - 1)$  фоновые колебательные моды отдельно от трех мод, соответствующих однородной деформации отдельной ячейки решетки графена. Критерием неустойчивости по отношению к фоновым колебательным модам является обращение в нуль частоты какой-либо колебательной моды в пределах первой зоны Бриллюэна. Исследование устойчивости графена по отношению к трем модам однородной деформации сводится к рассмотрению второй вариации потенциальной энергии кристалла относительно малых приращений компонент однородной деформации. Неустойчивость возникает в том случае, когда матрица коэффициентов трех соответствующих линейных уравнений перестает быть положительно-определенной.

Область устойчивости графена показана на рис. 4, а в плоскости  $(\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy})$ . Точками показаны результаты расчетов, проведенных методом функционала плотности или методом МД с другими потенциалами межатомного взаимодействия, использованными в работе [76]. Подробное сравнение различных потенциалов проведено в работе [77].

Достаточно просто структурное состояние можно охарактеризовать с использованием не деформаций, а мембранных сил  $T_x$  и  $T_y$ , поскольку в этом случае область устойчивости располагается в первом квадранте плоскости  $(T_x, T_y)$  (рис. 4, б), что означает невозможность сохранения плоской формы листа графена при наличии отрицательных (сжимающих) компонент усилий (из рис. 4, б следует, что графен является устойчивым только при  $T_x \geq 0$  и  $T_y \geq 0$ ). При отрицательных (сжимающих) компонентах мембранных сил графен теряет плоскую форму вследствие нулевой изгибной жесткости. Максимальные усилия при одноосном растяжении графена равны  $T_x \approx 39$  Н/м (117 ГПа) и  $T_y \approx 32$  Н/м (96 ГПа).

**2.3. Собственные колебания и выпучивание графеновых листов.** В работах [50, 78, 79] рассматривались механические свойства наноструктур, в том числе графеновых листов. В частности, для дискретных упругих систем, подвергнутых внешним воздействиям, был использован известный критерий неустойчивости, в котором учитывалась возможность поиска некоторых критических параметров.

Важную роль в изучении потери устойчивости и выпучивания графенового листа играют граничные условия (ГУ). В работах [78, 79] рассматривались ГУ двух типов: 1) атомы на краю листа закреплены частично; 2) на краю листа все атомы закреплены.

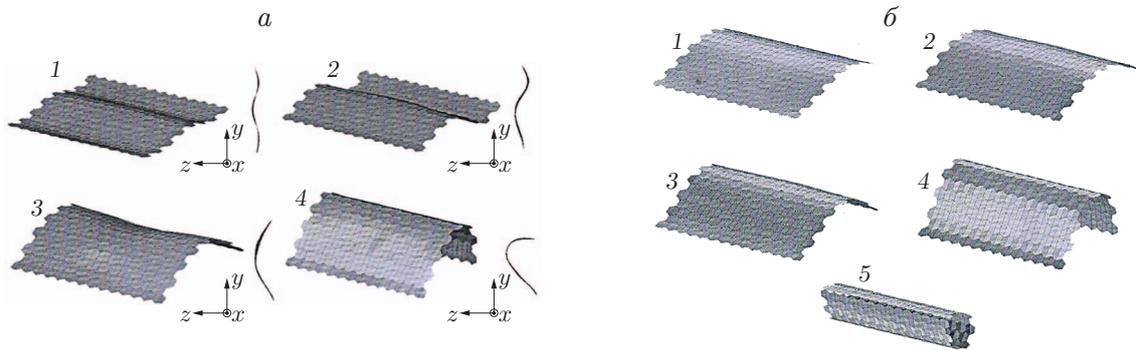


Рис. 5. Послекритические деформированные конфигурации сжатого графенового листа при его деформировании заданными движениями атомов на границе со скоростью  $\dot{u} = 0,05$  нм/нс (*а*) и  $\dot{u} = 0,005$  нм/нс (*б*) при различных значениях перемещения  $u$  [78, 79]:

1 —  $u = 0,115$  нм, 2 —  $u = 0,225$  нм, 3 —  $u = 0,310$  нм, 4 —  $u = 1,235$  нм, 5 —  $u = 3,266$  нм

Для того чтобы определить граничные условия для листа графена, можно использовать решение задачи о потере устойчивости сжатой квадратной тонкой пластины в условиях плоского изгиба.

В работах [78, 79] с использованием методов ММ решен ряд задач о собственных колебаниях графеновых листов и получены решения задач о выпучивании графенового листа при различных условиях закрепления атомов на его границе (рис. 5, 6). Атомы, расположенные на краях листа, параллельных оси  $y$ , полагались свободными. Атомы, расположенные на одном из краев, параллельных оси  $x$ , закреплены, на другом крае заданы перемещения с постоянными скоростями сжатия листа. Для вывода листа из плоскости  $(x, y)$  задавались постоянные во времени силы (0,001 нН), приложенные к шести атомам, расположенным в середине графенового листа. На рис. 5 приведены формы выпучивания графенового листа в случае, когда скорость движения атомов на его границе равна  $\dot{u} = 0,05$  нм/нс. Лист начинает выпучиваться в тот момент, когда перемещения атомов на границе достигают значения, равного 0,105 нм. При этом образуются три полуволны в направлении оси  $y$ .

На рис. 6, *а* представлены формы выпучивания графенового листа в случае, когда скорость движения атомов на его границе равна  $\dot{u} = 0,005$  нм/нс [80]. В этом случае лист начинает выпучиваться в тот момент, когда перемещения атомов на границе достигают значения, равного 0,031 25 нм. При этом образуется одна полуволна в направлении оси  $y$ .

Следует отметить влияние сил Ван-дер-Ваальса на изгибные моды графена. Действие сил Ван-дер-Ваальса приводит к сближению краев листа графена, при этом формируется конфигурация, подобная НТ (поперечное сечение в форме окружности). В отсутствие сил Ван-дер-Ваальса равновесная конфигурация представляет собой цилиндр с поперечным сечением в форме капли.

Сравнение результатов исследования динамического выпучивания графенового листа показывает, что и критические значения перемещений, и формы выпучивания существенно зависят от скорости заданных перемещений края листа [78, 79]. При малой скорости заданных перемещений форма выпучивания листа близка к классической эйлеровой форме выпучивания упругого стержня в условиях статического деформирования, а при достаточно большой скорости заданных перемещений на начальной стадии послекритического деформирования реализуются формы выпучивания с высшими гармониками, характерными для динамического выпучивания упругого стержня [81].

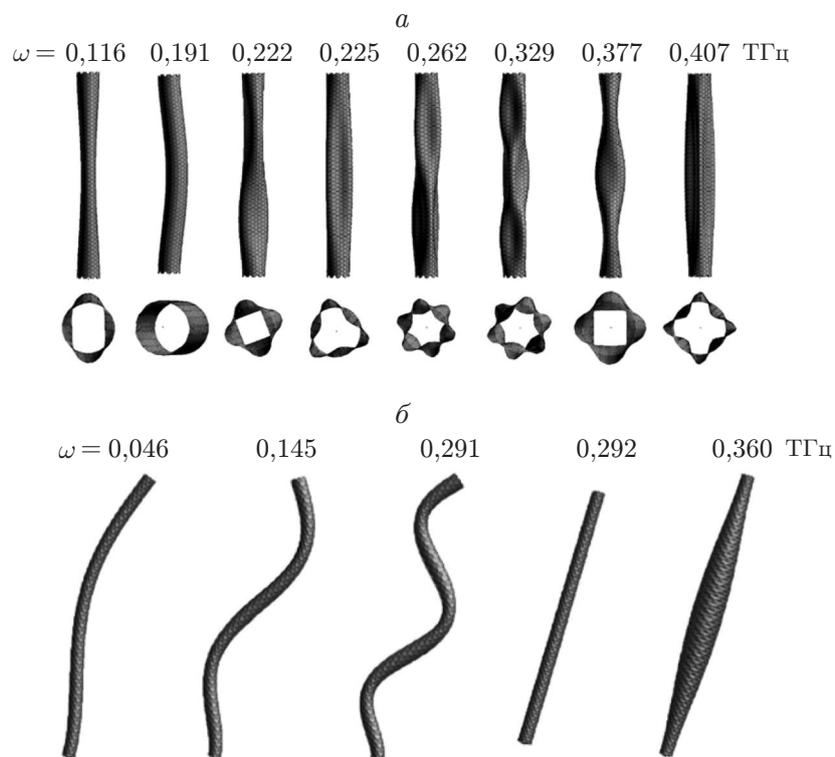


Рис. 6. Нижние частоты и соответствующие им формы собственных колебаний НТ “кресло” (а) и “зигзаг” (б) [80]

### 3. УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ: МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА, УСТОЙЧИВОСТЬ И ИЗГИБНЫЕ МОДЫ

**3.1. Механические свойства.** В теории упругости однослойная углеродная НТ может быть представлена в качестве тонкой цилиндрической оболочки. При этом вряд ли возможно полное подобие поведения макроскопических оболочек, геометрия которых аналогична геометрии углеродной НТ, которая в отличие от макроскопической системы, во-первых, не имеет сплошной стенки, а во-вторых, характеризуется толщиной порядка размера атома. Упругие и механические свойства протяженной цилиндрической оболочки характеризуются набором параметров (модулей упругости), представляющих собой коэффициенты пропорциональности между напряжением и деформацией такой оболочки в определенном направлении.

Значения модуля Юнга углеродных НТ обычно находятся в диапазоне  $1,0 \div 1,3$  ТПа. Модули упругости для однослойных и многослойных НТ могут существенно различаться. Например, значения модуля упругости для многослойных НТ составляют  $(810 \pm 410)$  ГПа. Максимальная прочность однослойных НТ варьируется в диапазоне  $13 \div 52$  ГПа при значениях модуля упругости  $320 \div 1470$  ГПа. Для многослойных НТ получены значения сопротивления разрыву  $11 \div 63$  ГПа, значения модуля упругости  $270 \div 950$  ГПа и максимальное удлинение, равное 12 %. Полученные различными методами значения модулей упругости и прочности углеродных НТ могут различаться. Поскольку определение многих параметров в экспериментах затруднено, проводятся расчеты с использованием аналитических или численных методов. Например, на основе эмпирических моделей получено значение объемного модуля упругости НТ, составляющее 0,191 ТПа, значение модуля Юнга 0,97 ТПа, значение модуля сдвиговой деформации, приближенно равное 0,46 ТПа, и значение коэф-

фициента Пуассона, составляющее 0,28. Механические свойства НТ подробно описаны в работах [58, 76, 82].

Выявлена аномально высокая пластичность углеродных НТ. При повышенных температурах (порядка 2000 К) максимальная величина растяжения на разрыв однослойных НТ может достигать нескольких сотен процентов, при этом диаметр углеродной НТ значительно уменьшается. Данное свойство может быть использовано при создании новых композитных материалов. Значение изгибной прочности многослойных НТ равно  $(14,2 \pm 0,8)$  ГПа, что приблизительно в 15 раз превышает соответствующее значение (1 ГПа) для графеновых нитей.

**3.2. Устойчивость и собственные колебания однослойных углеродных нанотрубок.** В работах [80, 83–85] рассматриваются устойчивость и собственные колебания НТ “кресло” (10, 10) радиусом  $R = 0,6792$  нм и длиной  $L = 12,2919$  нм и НТ “зигзаг” (10, 0) радиусом  $R = 0,6792$  нм и длиной  $L = 12,2919$  нм. При решении задачи о собственных колебаниях перемещения атомов по всем степеням свободы запрещены. При решении задачи о выпучивании трубки запрещены перемещения атомов на обоих торцах трубки в осевом направлении, а для остальных степеней свободы задаются перемещения атомов по окружности радиусом  $R$ . Процедура численных решений задач динамического деформирования и выпучивания наноструктур приведена в работах [80, 83–85].

На рис. 6 приведены значения нижних критических частот и соответствующие им формы собственных колебаний НТ “кресло” и “зигзаг”, полученные методом ММ.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнен обзор работ, посвященных решению задач устойчивости, определению механических свойств и изгибных мод графена и углеродных нанотрубок методами молекулярной механики и молекулярной динамики. Граница области устойчивости графена в пространстве усилий располагается в первом квадранте, что означает невозможность сохранения плоской формы листа графена при наличии отрицательных (сжимающих) компонент усилий. Максимальные усилия, выдерживаемые графеном при одноосном растяжении, составляют  $T_x \approx 39$  Н/м (117 ГПа) и  $T_y \approx 32$  Н/м (96 ГПа), что хорошо согласуется с известными результатами расчетов [73–76].

Рассмотренные модели могут быть использованы при исследовании других наноструктур в виде монослоев или нанотрубок, которые были получены в последнее время.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Принц В. Я., Голод С. В.** Упругие нанооболочки на основе кремниевых пленок: формирование, свойства и практическое применение // ПМТФ. 2006. Т. 47, № 6. С. 114–128.
2. **Фрицлер К. Б., Принц В. Я.** Методы трехмерной печати микро- и наноструктур // Успехи физ. наук. 2019. Т. 189. С. 55–71.
3. **Mojumder S., Al Amin A., Islam M. M.** Mechanical properties of stanene under uniaxial and biaxial loading: A molecular dynamics study // J. Appl. Phys. 2015. V. 118. 124305.
4. **Roman R. E., Cranford S. W.** Mechanical properties of silicone // Comput. Materials Sci. 2014. V. 82. P. 50–55.
5. **Savin A. V., Mazo M. A.** 2D chain models of nanoribbon scrolls // Problems of nonlinear mechanics and physics of materials. Cham: Springer, 2019. (Adv. Structur. Materials; V. 94).
6. **Savin A. V., Sakovich R. A., Mazo M. A.** Using spiral chain models for study of nanoscroll structures // Phys. Rev. B. 2018. V. 97. 165436.

7. **Alekseev A. V., Dubov D. Y., Predtechenskiy M. R.** Influence of carbon nanotubes on mechanical properties of cast aluminum, grade A5 // *Inorganic Materials: Appl. Res.* 2018. V. 9, N 2. P. 270–278.
8. **Пат. 2573873 RU, С 1.** Структура из углеродных нанотрубок / М. Р. Предтеченский, Ю. Д. Варламов, И. Ю. Коваль. № 2014148224/05; Заявл. 28.11.2014; Оpubл. 27.01.2016.
9. **Krause B., Pötschke P., Ilin E., Predtechenskiy M.** Melt mixed SWNT-polypropylene composites with very low electrical percolation // *Polymer.* 2016. V. 98. P. 45–50.
10. **Галков М. С., Степина Н. П., Предтеченский М. Р. и др.** Транспортные свойства ориентированной и изотропной бумаги из одностенных углеродных нанотрубок // *Изв. вузов. Материалы электрон. техники.* 2019. Т. 22, № 2. С. 104–111.
11. **Shi X., Pugno N. M., Gao H.** Constitutive behavior of pressurized carbon nanoscrolls // *Intern. J. Fracture.* 2010. V. 171, N 2. P. 163–168.
12. **Ильгамов М. А.** Влияние поверхностных эффектов на изгиб и колебания нанопленок // *Физика твердого тела.* 2019. Т. 61, вып. 10. С. 1825–1830.
13. **Иванова Е. А., Индейцев Д. А., Морозов Н. Ф.** К вопросу об определении параметров жесткости нанообъектов // *Журн. техн. физики.* 2006. Т. 76, вып. 10. С. 74–80.
14. **Geim A. K., Novoselov K. S.** The rise of graphene // *Nature Materials.* 2007. V. 6. P. 183–191.
15. **Iijima S.** Helical microtubules of graphitic carbon // *Nature.* 1991. V. 354. P. 56–58.
16. **Bunch J. S., van der Zande A. M., Verbridge S. S., et al.** Electromechanical resonators from graphene sheets // *Science.* 2007. V. 315, N 490. P. 490–493.
17. **Zhao H., Min K., Aluru N. R.** Size and chirality dependent elastic properties of graphene nanoribbons under uniaxial tension // *Nano Lett.* 2009. V. 9. P. 3012–3015.
18. **Кривцов А. М.** Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: Физматлит, 2007.
19. **Zhao H., Alurua N. R.** Temperature and strain-rate dependent fracture strength of graphene // *J. Appl. Phys.* 2010. V. 108. 064321.
20. **Wackerfus J.** Molecular mechanics in the context of the finite element method // *Intern. J. Numer. Methods Engng.* 2009. V. 77. P. 969–997.
21. **Головнев И. Ф., Головнева Е. И., Фомин В. М.** Молекулярно-динамические исследования поверхности в процессе разрушения наноструктур // *Физ. мезомеханика.* 2014. Т. 17, № 6. С. 45–51.
22. **Case D. A., Cheatham T. E., Darden T., et al.** The amber biomolecular simulation programs // *J. Comput. Chem.* 2005. V. 26, N 16. P. 1668–1688.
23. **Ponder J. W., Case D. A.** Force fields for protein simulations // *Adv. Protein Chem.* 2003. V. 66. P. 27–85.
24. **Scarpa F., Adhikari S., Srikantha Phani A.** Effective elastic mechanical properties of single layer graphene sheets // *Nanotechnol.* 2009. V. 20. 065709.
25. **Sears A., Batra R. C.** Macroscopic properties of carbon nanotubes from molecular-mechanics simulations // *Phys. Rev. B.* 2004. V. 69, N 23. 235406.
26. **Вахрушев А. В., Липанов А. М.** Численный анализ атомной структуры и формы металлических наночастиц // *Журн. вычисл. математики и мат. физики.* 2007. Т. 47, № 10. С. 1774–1783.
27. **Gupta S. S., Batra R. C.** Elastic properties and frequencies of free vibrations of single-layer graphene sheets // *J. Comput. Theor. Nanosci.* 2010. V. 7, N 10. P. 2151–2164.
28. **Ansari R., Rouhi S.** Atomistic finite element model for axial buckling of single-walled carbon nanotubes // *Physica E.* 2010. V. 43. P. 58–69.

29. **Huang X., Yuan H., Liang W., Zhang S.** Mechanical properties and deformation morphologies of covalently bridged multi-walled carbon nanotubes: Multiscale modeling // *J. Mech. Phys. Solids*. 2010. V. 58. P. 1847–1862.
30. **Khoei A. R., Ban E., Banihashemi P., Abdolhosseini Qomi M. J.** Effects of temperature and torsion speed on torsional properties of single-walled carbon nanotubes // *Materials Sci. Engng. C*. 2011. V. 31. P. 452–457.
31. **Sakhaee-Pour A.** Elastic buckling of single-layered graphene sheet // *Comput. Materials Sci*. 2009. V. 45. P. 266–270.
32. **Иванова Е. А., Кривцов А. М., Морозов Н. Ф., Фирсова А. Д.** Учет моментного взаимодействия при расчете изгибной жесткости наноструктур // *Докл. АН*. 2003. Т. 391, № 6. С. 764–768.
33. **Иванова Е. А., Кривцов А. М., Морозов Н. Ф.** Получение макроскопических соотношений упругости сложных кристаллических решеток с учетом моментных взаимодействий на микроуровне // *Прикл. математика и механика*. 2007. Т. 71, вып. 4. С. 595–615.
34. **Товстик П. Е., Товстик Т. П.** Статический и динамический анализ двумерных решеток графита // *Изв. РАН. Механика твердого тела*. 2012. № 5. С. 35–43.
35. **Shahabi A., Ghassemi M., Mirnouri Langroudi S. M., et al.** Effect of defect and C60s density variation on tensile and compressive properties of peapod // *Comput. Materials Sci*. 2010. V. 50. P. 586–594.
36. **Лифшиц Е. М.** Теоретическая физика: В 10 т. / Е. М. Лифшиц, Л. Д. Ландау. М.: Физматлит, 2002. Т. 1.
37. **Katsnelson M. I., Fasolino A.** Graphene as a prototype crystalline membrane // *Accounts Chem. Res*. 2012. V. 46, N 1. P. 97–105.
38. **Meyer J. C., Geim A. K., Katsnelson M. I., et al.** The structure of suspended graphene sheets // *Nature*. 2007. V. 446, N 7131. P. 60–63.
39. **Lee V., Park C., Jaye C., et al.** Substrate hybridization and rippling of graphene evidenced by near-edge x-ray absorption fine structure spectroscopy // *J. Phys. Chem. Lett*. 2010. V. 1, N 8. P. 1247–1253.
40. **Guinea F., Horovitz B., Le Doussal P.** Gauge field induced by ripples in graphene // *Phys. Rev. B*. 2008. V. 77. 205421.
41. **Atanasov V., Saxena A.** Tuning the electronic properties of corrugated graphene: Confinement, curvature, and band-gap opening // *Phys. Rev. B*. 2010. V. 81. 205409.
42. **Xu K., Cao P., Heath J. R.** Scanning tunneling microscopy characterization of the electrical properties of wrinkles in exfoliated graphene monolayers // *Nano Lett*. 2009. V. 9, N 12. P. 4446–4451.
43. **Bao W., Miao F., Chen Z., et al.** Controlled ripple texturing of suspended graphene and ultrathin graphite membranes // *Nature Nanotechnol*. 2009. V. 4, N 9. P. 562–566.
44. **Khan S., Tripathi K. N., Aggarwal M., et al.** Field emission properties of Fe70Pt30 catalysed multiwalled carbon nanotubes // *J. Experiment. Nanosci*. 2007. V. 2, N 3. P. 215–228.
45. **Paradise M., Goswami T.** Carbon nanotubes production and industrial applications // *Materials Design*. 2007. V. 28, N 5. P. 1477–1489.
46. **Харрис П.** Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века. М.: Техносфера, 2003.
47. **Dobardzic E., Milovsevic I., Nikolic B., et al.** Single-wall carbon nanotubes phonon spectra: Symmetry-based calculations // *Phys. Rev. B*. 2003. V. 68, N 4. 045408.
48. **Salaway R. N., Zhigilei L. V.** Molecular dynamics simulations of thermal conductivity of carbon nanotubes: Resolving the effects of computational parameters // *Intern. J. Heat Mass Transfer*. 2014. V. 70. P. 954–964.

49. Mayo S. L., Olafson B. D., Goddard W. A. DREIDING: a generic force field for molecular simulations // *J. Phys. Chem.* 1990. V. 94, N 26. P. 8897–8909.
50. Korobeynikov S. N., Alyokhin V. V., Annin B. D., Babichev A. V. Quasi-static buckling simulation of single-layer graphene sheets by the molecular mechanics method // *Math. Mech. Solids.* 2015. V. 20, N 7. P. 836–870.
51. Savin A. V., Kivshar Yu. S., Hu B. Suppression of thermal conductivity in graphene nanoribbons with rough edges // *Phys. Rev. B.* 2010. V. 82. 195422.
52. Savin A. V., Hu B., Kivshar Yu. S. Thermal conductivity of single-walled carbon nanotubes // *Phys. Rev. B.* 2009. V. 80. 195423.
53. Viola Kusminskiy S., Campbell D. K., Castro Neto A. H. Lenosky's energy and the phonon dispersion of graphene // *Phys. Rev. B.* 2010. V. 80, N 3. 035401.
54. Lee C., Wei X., Kysar J. W., Hone J. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene // *Science.* 2008. V. 321, N 5887. P. 385–388.
55. Gillen R., Mohr M., Maultzsch J. Raman-active modes in graphene nanoribbons // *Phys. Stat. Solidi. B.* 2010. V. 247. P. 2941–2944.
56. Novoselov K. S. Electric field effect in atomically thin carbon films // *Science.* 2004. V. 306, N 5696. P. 666–669.
57. Галашев А. Е., Рахманова О. Р. Устойчивость графена и материалов на его основе при механических и термических воздействиях // *Успехи физ. наук.* 2014. Т. 184, № 10. С. 1045–1065.
58. Елецкий А. В. Механические свойства углеродных наноструктур и материалов на их основе // *Успехи физ. наук.* 2007. Т. 177, № 3. С. 233–274.
59. Yu T., Ni Z., Du C., et al. Raman mapping investigation of graphene on transparent flexible substrate: The strain effect // *J. Phys. Chem. C.* 2008. V. 112, N 33. P. 12602–12605.
60. Ni Z. H., Chen W., Fan X. F., et al. Raman spectroscopy of epitaxial graphene on a SiC substrate // *Phys. Rev. B.* 2008. V. 77. 115416.
61. Ni Z. H., Wang H. M., Ma Y., et al. Tunable stress and controlled thickness modification in graphene by annealing // *ACS Nano.* 2008. V. 2, N 5. P. 1033–1039.
62. Ni Z. H., Yu T., Lu Y. H., et al. Uniaxial strain on graphene: Raman spectroscopy study and band-gap opening // *ACS Nano.* 2008. V. 2, N 11. P. 2301–2305.
63. Lu Q., Huang R. Nonlinear mechanics of single-atomic-layer graphene sheets // *Intern. J. Appl. Mech.* 2009. V. 1, N 3. P. 443–467.
64. Frank I. W., Tanenbaum D. M., van der Zande A. M., McEuen P. L. Mechanical properties of suspended graphene sheets // *J. Vacuum Sci. Technol. B.* 2007. V. 25, N 6. 2558.
65. Poot M., van der Zant H. S. J. Nanomechanical properties of few-layer graphene membranes // *Appl. Phys. Lett.* 2008. V. 92, N 6. P. 63–111.
66. Bunch J. S., Verbridge S. S., Alden J. S., et al. Impermeable atomic membranes from graphene sheets // *Nano Lett.* 2008. V. 8, N 8. P. 2458–2462.
67. Wong C. H., Vijayaraghavan V. Nanomechanics of free form and water submerged single layer graphene sheet under axial tension by using molecular dynamics simulation // *Materials Sci. Engng. A.* 2012. V. 556. P. 420–428.
68. Jhon Y. I., Min Jhon Y., Yeom G. Y., Jhon M. S. Orientation dependence of the fracture behavior of graphene // *Carbon.* 2014. V. 66. P. 619–628.
69. Dewapriya M. A. N., Srikantha Phani A., Rajapakse R. K. N. D. Influence of temperature and free edges on the mechanical properties of graphene // *Model. Simulat. Materials Sci. Engng.* 2013. V. 2, N 6. 065017.

70. Galashev A. E., Dubovik S. Yu. Molecular dynamics simulation of compression of single-layer graphene // Phys. Solid State. 2013. V. 55, N 9. P. 1976–1983.
71. Davydov S. Yu., Posrednik O. V. On the theory of elastic properties of two dimensional hexagonal structures // Phys. Solid State. 2015. V. 57, N 4. P. 837–843.
72. Sheka E. F., Popova N. A., Popova V. A., et al. Structure-sensitive mechanism of nanographene failure // J. Experiment. Theor. Phys. 2011. V. 112, N 4. P. 602–611.
73. Дмитриев С. В., Баимова Ю. А., Савин А. В., Кившарь Ю. С. Границы устойчивости плоского листа графена при деформации в плоскости // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 93, № 10. С. 632–637.
74. Baimova J. A., Dmitriev S. V., Zhou K., Savin A. V. Unidirectional ripples in strained graphene nanoribbons with clamped edges at zero and finite temperatures // Phys. Rev. B. 2012. V. 86, N 3. 035427.
75. Dmitriev S. V., Baimova J. A., Savin A. V., Kivshar Yu. S. Ultimate strength, ripples, sound velocities, and density of phonon states of strained graphene // Comput. Materials Sci. 2012. V. 53, N 1. P. 194–203.
76. Баимова Ю. А. Графен, нанотрубки и другие углеродные структуры / Ю. А. Баимова, Р. Р. Мулюков. М.: Изд-во РАН, 2018.
77. Кузькин В. А., Кривцов А. М. Описание механических свойств графена с использованием частиц с вращательными степенями свободы // Докл. АН. 2011. Т. 440, № 4. С. 476–479.
78. Алехин В. В., Аннин Б. Д., Бабичев А. В., Коробейников С. Н. Собственные колебания и выпучивание графеновых листов // Докл. АН. 2013. Т. 453, № 1. С. 37–40.
79. Алехин В. В., Аннин Б. Д., Бабичев А. В., Коробейников С. Н. Собственные колебания и выпучивание графеновых листов // Изв. РАН. Механика твердого тела. 2013. № 5. С. 34–38.
80. Аннин Б. Д., Коробейников С. Н., Бабичев А. В. Компьютерное моделирование выпучивания нанотрубки при кручении // Сиб. журн. индустр. математики. 2008. Т. 11, № 1. С. 3–22.
81. Лаврентьев М. А., Ишлинский А. Ю. Динамические формы потери устойчивости упругих систем // Докл. АН. 1949. Т. 64, № 6. С. 779–782.
82. Елецкий А. В. Углеродные нанотрубки // Успехи физ. наук. 1997. Т. 167, вып. 9. С. 945–972.
83. Korobeynikov S. N., Alyokhin V. V., Annin B. D., Babichev A. V. Using stability analysis of discrete elastic systems to study the buckling of nanostructures // Arch. Mech. 2012. V. 64, N 4. P. 367–404.
84. Аннин Б. Д., Алехин В. В., Бабичев А. В., Коробейников С. Н. Применение метода молекулярной механики к задачам устойчивости и собственных колебаний однослойных углеродных нанотрубок // Изв. РАН. Механика твердого тела. 2012. № 5. С. 65–83.
85. Аннин Б. Д., Алехин В. В., Бабичев А. В., Коробейников С. Н. Компьютерное моделирование контакта нанотрубок // Изв. РАН. Механика твердого тела. 2010. № 3. С. 56–76.

*Поступила в редакцию 9/VI 2020 г.,  
после доработки — 9/VI 2020 г.  
Принята к публикации 29/VI 2020 г.*