

Моделирование механических и физических свойств пучка углеродных нанотрубок при поперечном сжатии с использованием цепной модели с редуцированным числом степеней свободы

© 2022

Абдуллина Дина Ураловна^{*1,4}, магистр кафедры материаловедения и физики металлов
Галияхметова Лейсан Халиловна^{2,5}, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник
Бебихов Юрий Владимирович^{3,6}, кандидат физико-математических наук, доцент

¹Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа (Россия)

²Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа (Россия)

³Политехнический институт (филиал) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова в г. Мирном, Мирный (Россия)

*E-mail: dina.abdullina25@gmail.com

⁴ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6196-6093>

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6010-6921>

⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>

Поступила в редакцию 25.04.2022

Принята к публикации 12.09.2022

Аннотация: В работе исследуется пучок ориентированных углеродных нанотрубок (УНТ) при поперечном сжатии в условиях плоской деформации в рамках молекулярно-динамической модели с уменьшенным числом степеней свободы. Модель учитывает растяжение и изгиб стенки УНТ, а также вандерваальсовы взаимодействия. Каждая УНТ представлена кольцом атомов, имеющим две степени свободы в плоскости кольца. Дискретный характер модели позволяет описать большую кривизну стенки УНТ и разрушение УНТ при очень высоком давлении. Получены равновесные структуры кристалла УНТ при двухосном нагружении, контролируемом деформацией. Отдельные УНТ достаточно большого диаметра имеют два равновесных состояния – с круглым и слопнутым поперечным сечением. УНТ малого диаметра в свободном состоянии могут иметь только круговое поперечное сечение. Установлено наличие двух качественных структурных трансформаций, наблюдаемых при двухосном сжатии пучка УНТ. Первая трансформация, аналогичная фазовому переходу второго рода, приводит к эллиптизации поперечных сечений УНТ. В результате второй трансформации типа фазового перехода первого рода в пучке появляются слопнутые УНТ, доля которых постепенно растет с увеличением деформации сжатия. Рассчитаны константы упругости пучка, такие как модули Юнга, модуль сдвига и коэффициенты Пуассона. Показано, что одна из равновесных структур (с эллиптическими поперечными сечениями УНТ) обладает свойством частичного ауксетика, то есть имеет отрицательный коэффициент Пуассона при одноосном нагружении в определенном направлении. Предлагаемая цепная модель может быть эффективно применена для анализа физических и механических свойств пучков одностенных или многостенных УНТ в условиях плоской деформации, а после простых модификаций может применяться также к аналогичным структурам, изготовленным из других двумерных наноматериалов.

Ключевые слова: ауксетик; пучок углеродных нанотрубок; упругие свойства; поперечное сжатие; цепная модель.

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых и при государственной поддержке ведущих научных школ Российской Федерации, грант НШ-4320.2022.1.2.

Для цитирования: Абдуллина Д.У., Галияхметова Л.Х., Бебихов Ю.В. Моделирование механических и физических свойств пучка углеродных нанотрубок при поперечном сжатии с использованием цепной модели с редуцированным числом степеней свободы // *Frontier Materials & Technologies*. 2022. № 3. С. 15–22. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-15-22.

ВВЕДЕНИЕ

Существует большое разнообразие углеродных полиморфов, включающее широкий класс sp^2 -структур, таких как фуллерены, углеродные нанотрубки (УНТ) и графен. Относительно слабые силы Ван-дер-Ваальса дополнительно создают множество вторичных структур, причем некоторые из них могут иметь дальний порядок, например кристалл фуллерита, графита и кристаллы УНТ. Кристаллические структуры Ван-дер-Ваальса интересны тем, что они обладают свойствами, не проявляемыми изолированными структурными элементами. Это исследование сосредоточено на механических свойствах пучков УНТ. Механическое применение УНТ включает производство канатов, волокон, полимерно-матричных и металломатричных композитов, твердых смазочных материалов и т. д. Во всех областях применения УНТ демонстрируют превосходные механические свойства: предел прочности при растяжении в диапазоне от 11 до 63 ГПа, модуль упругости Юнга в интервале от 1,0 до 1,3 ТПа, высокую деформируемость вплоть до предела деформации разрушения около 10 %. Кроме того, УНТ легкие, гибкие, имеют высокую тепловую и электрическую проводимость [1]. Несмотря на то, что их фактическая прочность на порядок ниже теоретически прогнозируемого значения, из-за

механических свойствах пучков УНТ. Механическое применение УНТ включает производство канатов, волокон, полимерно-матричных и металломатричных композитов, твердых смазочных материалов и т. д. Во всех областях применения УНТ демонстрируют превосходные механические свойства: предел прочности при растяжении в диапазоне от 11 до 63 ГПа, модуль упругости Юнга в интервале от 1,0 до 1,3 ТПа, высокую деформируемость вплоть до предела деформации разрушения около 10 %. Кроме того, УНТ легкие, гибкие, имеют высокую тепловую и электрическую проводимость [1]. Несмотря на то, что их фактическая прочность на порядок ниже теоретически прогнозируемого значения, из-за

неизбежных дефектов в течение почти 30 лет они были признаны самым прочным материалом из когда-либо известных. Уникальное сочетание свойств делает УНТ идеальным вариантом для применения в искусственных мышцах, доставке лекарств в поврежденный участок тела, резонаторах, проектах космических лифтов, хранения и сборе энергии и т. д. Еще одним важным преимуществом УНТ является их относительно простое изготовление для получения широкого диапазона геометрических характеристик (диаметра, длины и хиральности) [2; 3], которые можно экстраполировать на синтез пучков УНТ [4]. Материал этого типа, также называемый лесом УНТ, обладает даже более высокими механическими свойствами, чем отдельные нанотрубки, из-за вандерваальсовых взаимодействий между ними [5]. В исследовании [6] были теоретически и экспериментально изучены механические свойства пучков УНТ, выровненных в жидкой среде с использованием внешнего электрического поля. Пучки УНТ под действием растягивающей нагрузки можно моделировать, предполагая, что нанотрубки жесткие.

Метод молекулярной динамики (МД) является наиболее популярным методом исследования из-за его универсальности и доступности, т. к. он зарекомендовал себя как эффективный инструмент анализа различных аспектов трансформации кристаллических решеток в результате внешних воздействий [7–9]. Недостатком метода МД при исследовании пучков УНТ является необходимость учета большого количества степеней свободы, что требует трудоемких вычислений.

В [10] были разработаны модели с уменьшенным числом степеней свободы. В работе рассматривается цепная модель, движущаяся по плоскости, которая ранее была показана как эффективный инструмент для рассмотрения углеродных наносвитков, намотки графеновых нанолент вокруг УНТ, бокового сжатия жгутов

УНТ, динамики рипплокаций (ripplocations) и ротобризеров, собственных частот изгибных колебаний УНТ.

Материалы со сложными структурными элементами, например частицы с вращательными степенями свободы, часто проявляют аномальные механические и физические свойства, такие как отрицательные коэффициенты Пуассона, отрицательное тепловое расширение или отрицательную сжимаемость [11–13].

Материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона называются ауксетиками [14]. Такие материалы расширяются в поперечном направлении при одноосном растяжении. Об ауксетичности нано- и микротрубок, изготовленных из орторомбических кристаллов, сообщалось в исследовании [15].

Ауксетическое поведение может быть продемонстрировано макроскопическими трубчатыми структурами, а также микроскопическими и наноскопическими структурами. Дефектные УНТ проявляют ауксетическое поведение, что приводит к повышению энергии отрыва в композите УНТ-полиэтилен [16].

В наших предыдущих работах по боковому сжатию пучков УНТ была разработана цепная модель [17], проанализированы демпфирующие свойства пучков [18] и приведены структурные характеристики пучков УНТ при двухосном сжатии [19].

Цель работы – проведение детального анализа механических свойств пучков углеродных нанотрубок при поперечном сжатии в условиях плоской деформации.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

Вычислительная модель, использованная в исследовании, схематически показана на рис. 1. Пучок нанотрубок выровнен вдоль оси z , а УНТ одинакового диаметра образуют в поперечном сечении треугольную решетку. УНТ нумеруются индексами $i=1, \dots, I$

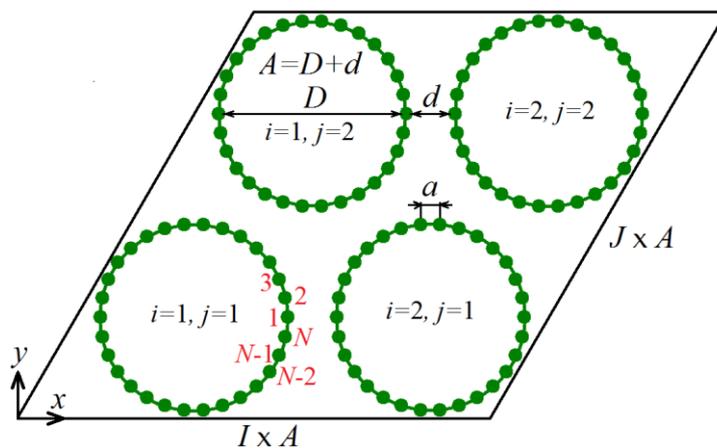


Рис. 1. Схема вычислительной ячейки, включающей пучок УНТ $I \times J$ ($I=10, J=12$ в работе и $I=J=2$ на рисунке), пронумерованная индексами $i=1, \dots, I$ и $j=1, \dots, J$.

Углеродные нанотрубки в поперечном сечении образуют треугольную решетку.

Атомы имеют две степени свободы, составляющие вектора смещения в плоскости (x, y) .

Цепочки атомов, нормальные к плоскости (x, y) , движутся как твердые тела

Fig. 1. Diagram of a computation cell including a CNT bundle $I \times J$ ($I=10, J=12$ in the work and $I=J=2$ in figure) indexed as $i=1, \dots, I$ and $j=1, \dots, J$. CNTs in the cross section form a triangle lattice.

Atom chains normal to the plane (x, y) are moving as solid bodies

Atom chains normal to the plane (x, y) are moving as solid bodies

и $j=1, \dots, J$ (показан случай $I=J=2$), в работе мы принимаем $I=10, J=12$. Атомы углерода движутся в плоскости (x, y) , каждый атом представляет собой жесткий ряд атомов, ориентированный перпендикулярно плоскости (x, y) . Внутри каждой УНТ атомы углерода пронумерованы индексом $n=1, \dots, N$ против часовой стрелки, начиная с атома с максимальной x -координатой. Таким образом, общее число атомов в вычислительной ячейке равно $I \times J \times N=3600$. В работе боковое сжатие пучка УНТ рассматривается в условиях плоской деформации, что означает, что каждый атом углерода обозначает жесткий атомный ряд, ориентированный вдоль оси z , и движущийся как твердое тело на плоскости (x, y) . Каждый атом имеет две степени свободы – компоненты вектора смещения на плоскости (x, y) . Позиции атомов определяются радиус-векторами $r_{ijn}=(x_{ijn}, y_{ijn})$. Вычислительная ячейка имеет форму параллелограмма со сторонами $I \times A$ и $J \times A$, где A – расстояние между центрами соседних УНТ. Периодические граничные условия накладываются в обоих направлениях.

Межатомное расстояние в графене $\rho=1,418 \text{ \AA}$. Расстояние между соседними атомными рядами в зигзагообразной УНТ составляет $a=\rho\sqrt{3}/2=1,228 \text{ \AA}$, оно же – расстояние между атомами в модели цепочки (рис. 1). Диаметр углеродных нанотрубок составляет $D=a/\sin(\pi/N)$. Пусть d – кратчайшее расстояние между стенками УНТ, тогда расстояние между центрами соседних УНТ составляет $A=D+d$. Сторонами вычислительной ячейки в форме параллелограмма являются $I \times A$ и $J \times A$. В наших моделях рассматривается УНТ с $N=30$, диаметром $D=11,75 \text{ \AA}$ и равновесным значением $d=3,088 \text{ \AA}$. Единицами измерения расстояния, энергии и времени являются ангстрем, эВ и пикосекунда соответственно. Используя эти единицы измерения, массу атома углерода можно считать равной $M=12 \times 1,0364 \times 10^{-4} \text{ эВ} \cdot \text{пс}^2 \cdot \text{\AA}^{-2}$.

Динамика пучка УНТ описывается гамильтонианом (полная энергия)

$$H = K + U_B + U_A + U_{vdW},$$

где четыре члена в правой части обозначают кинетическую энергию системы, энергию валентных связей,

энергию валентных углов и энергию вандерваальсовых взаимодействий соответственно. Способы расчета этих четырех типов энергий подробно описаны в нашей работе с открытым доступом [17] и здесь не воспроизводятся. Модель была успешно использована для описания структуры и специфических механических свойств пучков УНТ и других углеродных 2D-материалов [10].

Закон Гука для плоской деформации принимается в виде

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} \end{pmatrix},$$

где C_{ij} – коэффициенты матрицы жесткости.

Упругие константы можно найти следующим образом:

$$v_{xy} = \frac{C_{21}}{C_{22}}; v_{yx} = \frac{C_{12}}{C_{11}}; G_{xy} = C_{33};$$

$$E_{xx} = C_{11}(1 - v_{xy}v_{yx}); E_{yy} = C_{22}(1 - v_{xy}v_{yx}),$$

где v_{xy} и v_{yx} – коэффициенты Пуассона;

G_{xy} – модуль касательного сдвига;

E_{xx} и E_{yy} – касательные модули Юнга вдоль осей x и y соответственно.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

На рис. 2 показана эволюция структуры пучка УНТ для двухосного сжатия. Для структур с трансляционной симметрией ячейки трансляции выделены параллелограммом. При $|\theta|=0,07$ видны структуры с трансляционной симметрией, где УНТ имеют одинаковое сечение. На рис. 2 а УНТ слегка полигонизированы, что едва заметно в масштабе рисунка. При $|\theta|=0,08$ наблюдается качественное изменение структуры. Трансляционная симметрия сохраняется, но размер трансляционной ячейки отличается от такового в случае $|\theta|=0,07$. На рис. 2 б период удваивается в одном направлении, и ячейка трансляции включает две УНТ.

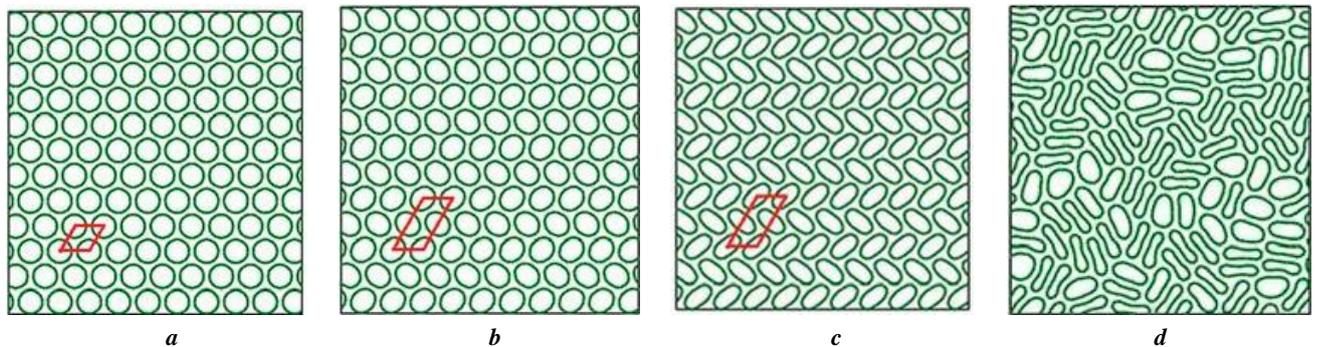


Рис. 2. Эволюция структуры пучка УНТ при двухосном сжатии

a – $|\theta|=0,07$; **b** – $|\theta|=0,08$; **c** – $|\theta|=0,15$; **d** – $|\theta|=0,30$.

Для структур с трансляционной симметрией параллелограммом выделены ячейки трансляции

Fig. 2. CNT bundle structure evolution at biaxial compression

a – $|\theta|=0,07$; **b** – $|\theta|=0,08$; **c** – $|\theta|=0,15$; **d** – $|\theta|=0,30$.

For structures with translation symmetry, parallelogram indicates the translation cells

Дальнейшее увеличение деформации сжатия приводит к постепенному схлопыванию нанотрубок, и по достижении деформации $|\theta|=0,30$ все УНТ оказываются схлопнутыми. На рис. 2 с при $|\theta|=0,15$ трансляционная симметрия еще сохраняется, для двухосного сжатия разрушение нанотрубок начинается при $|\theta|=0,151$. На рис. 2 d при $|\theta|=0,30$ можно наблюдать, что доля неразрушенных УНТ невелика.

Зависимость коэффициентов Пуассона ν_{xy} и ν_{yx} от объемной деформации $|\theta|$ для двухосного сжатия показана на рис. 3. Из анализа графика на рис. 3 видно, что вначале ν_{xy} и ν_{yx} почти равны и приближаются к 1 с увеличением объемной деформации. Равенство $\nu_{xy}=\nu_{yx}$ следует из изотропии структуры. Для изотропного 2D-материала закон сохранения энергии предполагает, что коэффициент Пуассона должен быть в пределах $-1 \leq \nu \leq 1$. Становится понятно, что причиной трансфор-

мации структуры при переходе от этапа I к этапу II является приближение коэффициента Пуассона к предельному значению 1.

Коэффициенты Пуассона на этапе II заметно отличаются от коэффициентов на этапе I. В точке перехода наблюдается резкое падение как ν_{xy} , так и ν_{yx} . Один из коэффициентов Пуассона остается положительным, а другой становится отрицательным, что указывает на то, что структура сжатого с боков пучка УНТ на этапе II проявляет частичные ауксетические свойства. Для двухосного сжатия значение $\nu_{yx} < 0$.

Чтобы определить механическое поведение деформированного пучка УНТ, на рис. 4 анализируются значения касательного модуля Юнга и касательного модуля сдвига G . На этапе I E_{xx} и E_{yy} растут линейно с увеличением $|\theta|$. Модуль касательного сдвига G также увеличивается при деформации сжатия, но остается в 4,5 раза

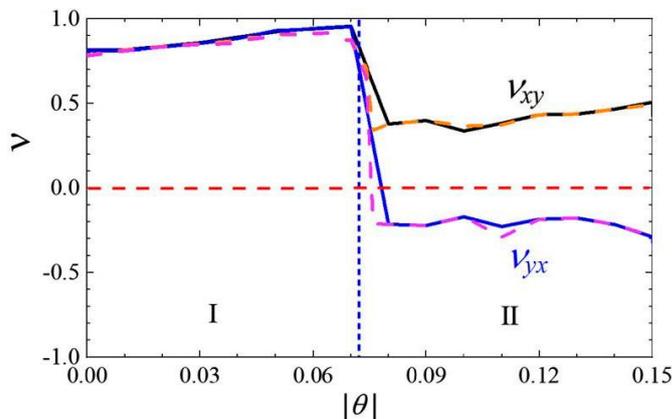


Рис. 3. Коэффициент Пуассона как функции объемной деформации сжатия при двухосном сжатии. Сплошные линии показывают ν_{xy} (ν_{yx}). Вертикальные пунктирные линии отделяют этап I от этапа II.

Fig. 3. The Poisson's ratio as a function of bulk compression strain at biaxial compression. Solid lines indicate ν_{xy} (ν_{yx}). Vertical dotted lines separate stage I from stage II.

A horizontal dotted line indicates the Poisson's ratio zero value

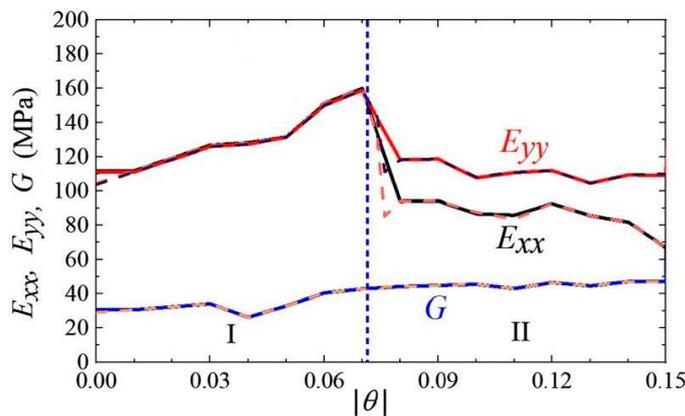


Рис. 4. Касательные модули Юнга и касательные модули сдвига при двухосном сжатии.

Две верхние сплошные линии показывают E_{xx} (E_{yy}), а нижняя сплошная линия – модуль касательного сдвига G . Вертикальная пунктирная линия отделяет этап I от этапа II

Fig. 4. Tangent Young's moduli and tangent shear moduli at biaxial compression.

Two upper solid lines indicate E_{xx} (E_{yy}) and the bottom solid line – tangent shear module G .

Vertical dotted line separates the stage I from the stage II

меньше, чем касательные модули Юнга. Переход от этапа I к этапу II приводит к резкому падению касательных модулей Юнга. После падения на этапе II E_{xx} меньше, чем E_{yy} для двухосного сжатия.

Для двухосного сжатия, как показано на рис. 3, модуль касательного сдвига остается почти постоянным в пределах этапа II, при переходе от этапа I к этапу II модуль сдвига не изменяется.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Анализ упругих свойств пучка УНТ при плоскостном деформационном боковом сжатии проведен методом возмущения-релаксации МД в рамках цепной модели с уменьшенным числом степеней свободы. Анализировалось двухосное сжатие. Схема нагружения изображена на рис. 2. Можно выделить четыре стадии.

Стадия I: слегка деформированные УНТ образуют кристаллические структуры с одной УНТ в трансляционной ячейке. Наблюдаются слегка полигонизированные УНТ (рис. 2 а).

Стадия II: УНТ, имеющие эллиптические поперечные сечения, образуют кристаллические структуры с удвоенными трансляционными ячейками. Ячейка трансляции включает две УНТ (рис. 2 б).

Стадия III: в структуре появляются схлопнутые УНТ, доля схлопнутых УНТ увеличивается с увеличением деформации сжатия (рис. 2 с).

Стадия IV: Все УНТ схлопываются.

Наблюдаемое ауксетичное поведение кристаллических структур пучка УНТ на стадии II не может быть объяснено механизмом вращения звеньев [20; 21], так как заметного вращения сечений УНТ обнаружено не было. Частичная ауксетичность обычно наблюдается в сильно анизотропных материалах [22; 23]. Было также установлено, что сценарий эволюции структурных единиц массива нанотрубок в значительной степени зависит от скорости деформирования [24; 25], их хиральности [25], взаимной упорядоченности нанотрубок внутри пучка [26] и при определенных условиях внешнего воздействия может приводить к возникновению валентных связей между трубками [27].

Анизотропия рассматриваемого пучка УНТ на стадии II, в которой наблюдается частичная ауксетичность, невелика и вряд ли может быть причиной ауксетичных свойств. Возможно, механизм ауксетичности пучка УНТ как наноматериала аналогичен пене и другим подобным микроскопическим и макроскопическим структурам. Дальнейшее изучение влияния температуры и расположения УНТ на механические свойства пучка оставлено для будущих исследований. В целом полученные данные о структуре и упругих свойствах пучков УНТ при боковом сжатии способствуют пониманию механизмов деформации конструкций пучкового типа и служат ориентиром для проектирования материалов с заданными механическими свойствами.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

1. Рассчитаны упругие константы как функции объемной деформации: коэффициенты Пуассона ν_{xy} и ν_{yx} , модули Юнга E_{xx} , E_{yy} и модуль сдвига G для пучка УНТ при поперечном сжатии для этапов I и II.

2. На этапе I пучок УНТ имеет коэффициенты Пуассона, близкие к 1 и приближающиеся к 1 при увеличении объемной деформации сжатия. Для изотропного упругого 2D-материала коэффициент Пуассона не может превышать 1, так как неустойчивость конструкции при единичном УНТ внутри поступательной ячейки возникает, когда коэффициент Пуассона приближается к 1. Переход к структуре с двойной поступательной ячейкой действительно происходит при объемной деформации около 7 %.

3. Пучок УНТ при сжатии в пределах этапа II проявляет частичные ауксетические свойства. При двухосном сжатии $\nu_{xy} > 0$ и $\nu_{yx} < 0,4$, модуль Юнга и модуль сдвига линейно растут с деформацией сжатия на этапе I, при этом G в 4,5 раза меньше, чем E_{xx} и E_{yy} . На этапе II модули Юнга E_{xx} и E_{yy} заметно меньше, чем на этапе I. Модуль сдвига на этапах I и II практически одинаков при двухосном сжатии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Yu M.-F. Fundamental mechanical properties of carbon nanotubes: Current understanding and the related experimental studies // *Journal of Engineering Materials and Technology*. 2004. Vol. 126. № 3. P. 271–278. DOI: [10.1115/1.1755245](https://doi.org/10.1115/1.1755245).
2. Bai Y., Zhang R., Ye X., Zhu Zh., Xie H., Shen B., Cai D., Liu B., Zhang Ch., Jia Z., Zhang Sh., Li X., Wei F. Carbon nanotube bundles with tensile strength over 80 GPa // *Nature Nanotechnology*. 2018. Vol. 13. № 7. P. 589–595. DOI: [10.1038/s41565-018-0141-z](https://doi.org/10.1038/s41565-018-0141-z).
3. Di J., Fang S., Moura F.A., Galvão D.S., Bykova J., Aliev A., de Andrade M.J., Lepró X., Li Na., Haines C., Ovalle-Robles R., Qian D., Baughman R.H. Strong, twist-stable carbon nanotube yarns and muscles by tension annealing at extreme temperatures // *Advances Materials*. 2016. Vol. 28. № 31. P. 6598–6605. DOI: [10.1002/adma.201600628](https://doi.org/10.1002/adma.201600628).
4. Li Y., Zhang X., Tao X., Xu J., Huang W., Luo J., Luo Z., Li T., Liu F., Bao Y., Geise H.J. Mass Production of High-Quality Multi-Walled Carbon Nanotube Bundles on a Ni/Mo/MgO Catalyst // *Carbon*. 2005. Vol. 43. № 2. P. 295–301. DOI: [10.1016/j.carbon.2004.09.014](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2004.09.014).
5. Rakov E.G. Materials made of carbon nanotubes. The carbon nanotube forest // *Russian Chemical Reviews*. 2013. Vol. 82. № 6. P. 538–566. DOI: [10.1070/RC2013v082n06ABEH004340](https://doi.org/10.1070/RC2013v082n06ABEH004340).
6. Karimzad Ghavidel A., Zadshakoyan M., Arjmand M. Mechanical analysis of aligned carbon nanotube bundles under electric field // *International Journal of Mechanical Sciences*. 2021. Vol. 196. Article number 106289. DOI: [10.1016/j.ijmecsci.2021.106289](https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2021.106289).
7. Korznikova E.A., Shcherbinin S.A., Ryabov D.S., Chechin G.M., Ekomasov E.G., Barani E., Zhou K., Dmitriev S.V. Delocalized Nonlinear Vibrational Modes in Graphene: Second Harmonic Generation and Negative Pressure // *Physica Status Solidi (B) Basic Research*. 2019. Vol. 256. № 1. Article number 1800061. DOI: [10.1002/pssb.201800061](https://doi.org/10.1002/pssb.201800061).
8. Fitzgerald S.P. Structure and dynamics of crowdion defects in bcc metals // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics*. 2018. Vol. 3. № 3–4. Article number 1840003. DOI: [10.1142/S2424913018400039](https://doi.org/10.1142/S2424913018400039).

9. Chetverikov A.P., Shepelev I.A., Korznikova E.A., Kistanov A.A., Dmitriev S.V., Velarde M.G. Breathing subsonic crowdion in Morse lattices // *Computational Condensed Matter*. 2017. Vol. 13. P. 59–64. DOI: [10.1016/j.cocom.2017.09.004](https://doi.org/10.1016/j.cocom.2017.09.004).
10. Savin A.V., Mazo M.A. Two-Dimensional Model of Scrolled Packings of Molecular Nanoribbons // *Physics of the Solid State*. 2018. Vol. 60. № 4. P. 826–835. DOI: [10.1134/S1063783418040297](https://doi.org/10.1134/S1063783418040297).
11. Dudek K., Attard D., Caruana-Gauci R., Wojciechowski K.W., Grima J.N. Unimode metamaterials exhibiting negative linear compressibility and negative thermal expansion // *Smart Materials and Structures*. 2016. Vol. 25. № 2. Article number 025009. DOI: [10.1088/0964-1726/25/2/025009](https://doi.org/10.1088/0964-1726/25/2/025009).
12. Dudek K., Gatt R., Mizzi L., Dudek M., Attard D., Evans K.E., Grima J.N. On the dynamics and control of mechanical properties of hierarchical rotating rigid unit auxetics // *Scientific Reports*. 2017. Vol. 7. Article number 46529. DOI: [10.1038/srep46529](https://doi.org/10.1038/srep46529).
13. Gatt R., Mizzi L., Azzopardi J.I., Azzopardi K.M., Attard D., Casha A., Briffa J., Grima J.N. Hierarchical Auxetic Mechanical Metamaterials // *Scientific Reports*. 2015. Vol. 5. Article number 8395. DOI: [10.1038/srep08395](https://doi.org/10.1038/srep08395).
14. Alderson K.L., Alderson A., Grima J.N., Wojciechowski K.W. Auxetic Materials and Related Systems // *Physica Status Solidi (B) Basic Research*. 2014. Vol. 251. № 2. P. 263–266. DOI: [10.1002/pssb.201470114](https://doi.org/10.1002/pssb.201470114).
15. Goldstein R.V., Gorodtsov V.A., Lisovenko D.S., Volkov M.A. Auxeticity in nano/microtubes produced from orthorhombic crystals // *Smart Materials and Structures*. 2016. Vol. 25. № 5. Article number 054006. DOI: [10.1088/0964-1726/25/5/054006](https://doi.org/10.1088/0964-1726/25/5/054006).
16. Zhang J., Jiang D., Scarpa F., Peng H.-X. Enhancement of pullout energy in a single-walled carbon nanotube-polyethylene composite system via auxetic effect // *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. 2013. Vol. 55. P. 188–194. DOI: [10.1016/j.compositesa.2013.09.006](https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2013.09.006).
17. Korznikova E.A., Rysaeva L.Kh., Savin A.V., Soboleva E.G., Ekomasov E.G., Ilgamov M.A., Dmitriev S.V. Chain Model for Carbon Nanotube Bundle under Plane Strain Conditions // *Materials*. 2019. Vol. 12. № 23. Article number 3951. DOI: [10.3390/ma12233951](https://doi.org/10.3390/ma12233951).
18. Rysaeva L.K., Korznikova E.A., Murzaev R.T., Abdullina D.U., Kudreyko A.A., Baimova J.A., Lisovenko D.S., Dmitriev S.V. Elastic damper based on the carbon nanotube bundle // *Facta Universitatis, Series: Mechanical Engineering*. 2020. Vol. 18. № 1. P. 1–12. DOI: [10.22190/FUME200128011R](https://doi.org/10.22190/FUME200128011R).
19. Abdullina D.U., Korznikova E.A., Dubinko V.I., Laptev D.V., Kudreyko A.A., Soboleva E.G., Dmitriev S.V., Zhou K. Mechanical Response of Carbon Nanotube Bundle to Lateral Compression // *Computation*. 2020. Vol. 8. № 2. Article number 27. DOI: [10.3390/computation8020027](https://doi.org/10.3390/computation8020027).
20. Vasiliev A.A., Dmitriev S.V., Ishibashi Y., Shigenari T. Elastic properties of a two-dimensional model of crystals containing particles with rotational degrees of freedom // *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. 2002. Vol. 65. № 9. P. 1–7. DOI: [10.1103/PhysRevB.65.094101](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.094101).
21. Grima J.N., Alderson A., Evans K.E. Auxetic behaviour from rotating rigid units // *Physica Status Solidi (B) Basic Research*. 2005. Vol. 242. № 3. P. 561–575. DOI: [10.1002/pssb.200460376](https://doi.org/10.1002/pssb.200460376).
22. Tanaka H., Suga K., Iwata N., Shibutani Y. Orthotropic Laminated Open-cell Frameworks Retaining Strong Auxeticity under Large Uniaxial Loading // *Scientific Reports*. 2017. Vol. 7. Article number 39816. DOI: [10.1038/srep39816](https://doi.org/10.1038/srep39816).
23. Harkati E.H., Bezazi A., Boukharouba W., Scarpa F. Influence of carbon fibre on the through-the-thickness NPR behaviour of composite laminates // *Physica Status Solidi (B) Basic Research*. 2009. Vol. 246. № 9. P. 2111–2117. DOI: [10.1002/pssb.200982043](https://doi.org/10.1002/pssb.200982043).
24. Li B., Li S., Shi K., Zhang X., Yang S., Pan D., Liu L., Nan Y., Zhu X., Song X., Su L., Yang G. Structural properties of single-walled carbon nanotubes under extreme dynamic pressures // *Acta Materialia*. 2022. Vol. 228. Article number 117776. DOI: [10.1016/j.actamat.2022.117776](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.117776).
25. Wittmaack B.K., Volkov A.N., Zhigilei L.V. Phase transformation as the mechanism of mechanical deformation of vertically aligned carbon nanotube arrays: Insights from mesoscopic modeling // *Carbon*. 2019. Vol. 143. P. 587–597. DOI: [10.1016/j.carbon.2018.11.066](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2018.11.066).
26. Ferreira R.S., Aguiar A.L., Alencar R.S., San-Miguel A., Filho A.G.S. Flat-to-Flat Polymerization of Single-Walled Carbon Nanotubes under High Pressure Mediated by Carbon Chain Encapsulation // *Journal of Physical Chemistry C*. 2021. Vol. 125. № 23. P. 12857–12869. DOI: [10.1021/acs.jpcc.1c02044](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c02044).
27. Li B., Li S., Shi K., Zhang X., Yang S., Pan D., Liu L., Nan Y., Zhu X., Song X., Su L., Yang G. Structural properties of single-walled carbon nanotubes under extreme dynamic pressures // *Acta Materialia*. 2022. Vol. 228. Article number 117776. DOI: [10.1016/j.actamat.2022.117776](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.117776).

REFERENCES

1. Yu M.-F. Fundamental mechanical properties of carbon nanotubes: Current understanding and the related experimental studies. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 2004, vol. 126, no. 3, pp. 271–278. DOI: [10.1115/1.1755245](https://doi.org/10.1115/1.1755245).
2. Bai Y., Zhang R., Ye X., Zhu Zh., Xie H., Shen B., Cai D., Liu B., Zhang Ch., Jia Z., Zhang Sh., Li X., Wei F. Carbon nanotube bundles with tensile strength over 80 GPa. *Nature Nanotechnology*, 2018, vol. 13, no. 7, pp. 589–595. DOI: [10.1038/s41565-018-0141-z](https://doi.org/10.1038/s41565-018-0141-z).
3. Di J., Fang S., Moura F.A., Galvão D.S., Bykova J., Aliev A., de Andrade M.J., Lepró X., Li Na., Haines C., Ovalle-Robles R., Qian D., Baughman R.H. Strong, twist-stable carbon nanotube yarns and muscles by tension annealing at extreme temperatures. *Advances Materials*, 2016, vol. 28, no. 31, pp. 6598–6605. DOI: [10.1002/adma.201600628](https://doi.org/10.1002/adma.201600628).
4. Li Y., Zhang X., Tao X., Xu J., Huang W., Luo J., Luo Z., Li T., Liu F., Bao Y., Geise H.J. Mass Production of High-Quality Multi-Walled Carbon Nanotube Bundles on a Ni/Mo/MgO Catalyst. *Carbon*, 2005, vol. 43, no. 2, pp. 295–301. DOI: [10.1016/j.carbon.2004.09.014](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2004.09.014).

5. Rakov E.G. Materials made of carbon nanotubes. The carbon nanotube forest. *Russian Chemical Reviews*, 2013, vol. 82, no. 6, pp. 538–566. DOI: [10.1070/RC2013v082n06ABEH004340](https://doi.org/10.1070/RC2013v082n06ABEH004340).
6. Karimzad Ghavidel A., Zadshakoyan M., Arjmand M. Mechanical analysis of aligned carbon nanotube bundles under electric field. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2021, vol. 196, article number 106289. DOI: [10.1016/J.IJMECSCI.2021.106289](https://doi.org/10.1016/J.IJMECSCI.2021.106289).
7. Korznikova E.A., Shcherbinin S.A., Ryabov D.S., Chechin G.M., Ekomasov E.G., Barani E., Zhou K., Dmitriev S.V. Delocalized Nonlinear Vibrational Modes in Graphene: Second Harmonic Generation and Negative Pressure. *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 2019, vol. 256, no. 1, article number 1800061. DOI: [10.1002/pssb.201800061](https://doi.org/10.1002/pssb.201800061).
8. Fitzgerald S.P. Structure and dynamics of crowdion defects in bcc metals. *Journal of Micromechanics and Molecular Physics*, 2018, vol. 3, no. 3-4, article number 1840003. DOI: [10.1142/S2424913018400039](https://doi.org/10.1142/S2424913018400039).
9. Chetverikov A.P., Shepelev I.A., Korznikova E.A., Kistanov A.A., Dmitriev S.V., Velarde M.G. Breathing subsonic crowdion in Morse lattices. *Computational Condensed Matter*, 2017, vol. 13, pp. 59–64. DOI: [10.1016/j.cocom.2017.09.004](https://doi.org/10.1016/j.cocom.2017.09.004).
10. Savin A.V., Mazo M.A. Two-Dimensional Model of Scrolled Packings of Molecular Nanoribbons. *Physics of the Solid State*, 2018, vol. 60, no. 4, pp. 826–835. DOI: [10.1134/S1063783418040297](https://doi.org/10.1134/S1063783418040297).
11. Dudek K., Attard D., Caruana-Gauci R., Wojciechowski K.W., Grima J.N. Unimode metamaterials exhibiting negative linear compressibility and negative thermal expansion. *Smart Materials and Structures*, 2016, vol. 25, no. 2, article number 025009. DOI: [10.1088/0964-1726/25/2/025009](https://doi.org/10.1088/0964-1726/25/2/025009).
12. Dudek K., Gatt R., Mizzi L., Dudek M., Attard D., Evans K.E., Grima J.N. On the dynamics and control of mechanical properties of hierarchical rotating rigid unit auxetics. *Scientific Reports*, 2017, vol. 7, article number 46529. DOI: [10.1038/srep46529](https://doi.org/10.1038/srep46529).
13. Gatt R., Mizzi L., Azzopardi J.I., Azzopardi K.M., Attard D., Casha A., Briffa J., Grima J.N. Hierarchical Auxetic Mechanical Metamaterials. *Scientific Reports*, 2015, vol. 5, article number 8395. DOI: [10.1038/srep08395](https://doi.org/10.1038/srep08395).
14. Alderson K.L., Alderson A., Grima J.N., Wojciechowski K.W. Auxetic Materials and Related Systems. *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 2014, vol. 251, no. 2, pp. 263–266. DOI: [10.1002/pssb.201470114](https://doi.org/10.1002/pssb.201470114).
15. Goldstein R.V., Gorodtsov V.A., Lisovenko D.S., Volkov M.A. Auxeticity in nano/microtubes produced from orthorhombic crystals. *Smart Materials and Structures*, 2016, vol. 25, no. 5, article number 054006. DOI: [10.1088/0964-1726/25/5/054006](https://doi.org/10.1088/0964-1726/25/5/054006).
16. Zhang J., Jiang D., Scarpa F., Peng H.-X. Enhancement of pullout energy in a single-walled carbon nanotube-polyethylene composite system via auxetic effect. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 2013, vol. 55, pp. 188–194. DOI: [10.1016/j.compositesa.2013.09.006](https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2013.09.006).
17. Korznikova E.A., Rysaeva L.Kh., Savin A.V., Soboleva E.G., Ekomasov E.G., Ilgamov M.A., Dmitriev S.V. Chain Model for Carbon Nanotube Bundle under Plane Strain Conditions. *Materials*, 2019, vol. 12, no. 23, article number 3951. DOI: [10.3390/ma12233951](https://doi.org/10.3390/ma12233951).
18. Rysaeva L.K., Korznikova E.A., Murzaev R.T., Abdullina D.U., Kudreyko A.A., Baimova J.A., Lisovenko D.S., Dmitriev S.V. Elastic damper based on the carbon nanotube bundle. *Facta Universitatis, Series: Mechanical Engineering*, 2020, vol. 18, no. 1, pp. 1–12. DOI: [10.22190/FUME200128011R](https://doi.org/10.22190/FUME200128011R).
19. Abdullina D.U., Korznikova E.A., Dubinko V.I., Laptev D.V., Kudreyko A.A., Soboleva E.G., Dmitriev S.V., Zhou K. Mechanical Response of Carbon Nanotube Bundle to Lateral Compression. *Computation*, 2020, vol. 8, no. 2, article number 27. DOI: [10.3390/computation8020027](https://doi.org/10.3390/computation8020027).
20. Vasiliev A.A., Dmitriev S.V., Ishibashi Y., Shigenari T. Elastic properties of a two-dimensional model of crystals containing particles with rotational degrees of freedom. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 2002, vol. 65, no. 9, pp. 1–7. DOI: [10.1103/PhysRevB.65.094101](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.094101).
21. Grima J.N., Alderson A., Evans K.E. Auxetic behaviour from rotating rigid units. *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 2005, vol. 242, no. 3, pp. 561–575. DOI: [10.1002/pssb.200460376](https://doi.org/10.1002/pssb.200460376).
22. Tanaka H., Suga K., Iwata N., Shibutani Y. Orthotropic Laminated Open-cell Frameworks Retaining Strong Auxeticity under Large Uniaxial Loading. *Scientific Reports*, 2017, vol. 7, article number 39816. DOI: [10.1038/srep39816](https://doi.org/10.1038/srep39816).
23. Harkati E.H., Bezazi A., Boukharouba W., Scarpa F. Influence of carbon fibre on the through-the-thickness NPR behaviour of composite laminates. *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 2009, vol. 246, no. 9, pp. 2111–2117. DOI: [10.1002/pssb.200982043](https://doi.org/10.1002/pssb.200982043).
24. Li B., Li S., Shi K., Zhang X., Yang S., Pan D., Liu L., Nan Y., Zhu X., Song X., Su L., Yang G., Structural properties of single-walled carbon nanotubes under extreme dynamic pressures. *Acta Materialia*, 2022, vol. 228, article number 117776. DOI: [10.1016/j.actamat.2022.117776](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.117776).
25. Wittmaack B.K., Volkov A.N., Zhigilei L.V. Phase transformation as the mechanism of mechanical deformation of vertically aligned carbon nanotube arrays: Insights from mesoscopic modeling. *Carbon*, 2019, vol. 143, pp. 587–597. DOI: [10.1016/j.carbon.2018.11.066](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2018.11.066).
26. Ferreira R.S., Aguiar A.L., Alencar R.S., San-Miguel A., Filho A.G.S. Flat-to-Flat Polymerization of Single-Walled Carbon Nanotubes under High Pressure Mediated by Carbon Chain Encapsulation. *Journal of Physical Chemistry C*, 2021, vol. 125, no. 23, pp. 12857–12869. DOI: [10.1021/acs.jpcc.1c02044](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c02044).
27. Li B., Li S., Shi K., Zhang X., Yang S., Pan D., Liu L., Nan Y., Zhu X., Song X., Su L., Yang G. Structural properties of single-walled carbon nanotubes under extreme dynamic pressures. *Acta Materialia*, 2022, vol. 228, article number 117776. DOI: [10.1016/j.actamat.2022.117776](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.117776).

Simulation of mechanical and physical properties of a carbon nanotubes bundle under the transverse compression using a chain model with the reduced number of degrees of freedom

©2022

Dina U. Abdullina^{*1,4}, Master of Chair of Materials Science and Physics of Metals
Leysan Kh. Galiakhmetova^{2,5}, PhD (Physics and Mathematics), researcher
Yuri V. Bebikhov^{3,6}, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor

¹*Ufa State Aviation Technical University, Ufa (Russia)*

²*Institute for Metals Superplasticity Problems of the RAS, Ufa (Russia)*

³*Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University, Mirny (Russia)*

*E-mail: dina.abdullina25@gmail.com

⁴ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6196-6093>

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6010-6921>

⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>

Received 25.04.2022

Accepted 12.09.2022

Abstract: The paper studies a bundle of oriented carbon nanotubes (CNTs) under the transverse loading under the plane deformation conditions within the framework of a molecular dynamics model with a reduced number of degrees of freedom. The model takes into account CNT wall stretching and bending, as well as van der Waals interactions. Each CNT is represented by a ring of atoms with two degrees of freedom in the plane of the ring. The discrete nature of the model allows describing the large curvature of the CNT wall and the destruction of CNTs at very high pressure. CNT crystal equilibrium structures are obtained under the strain-controlled biaxial loading. Separate CNTs of a sufficiently large diameter have two equilibrium states: with a round and collapsed cross section. Small-diameter CNTs in the free state can only have a circular cross section. The study identified the presence of two phase transitions observed during biaxial compression of a CNT bundle. The first transformation similar to phase transition of the second order leads to ellipticization of CNT cross sections. As a result of the second transition of the first order, bundled CNTs appear in the beam, the proportion of which gradually increases with the increase in compressive strain. The authors calculated beam elasticity constants such as Young's moduli, shear modulus, and Poisson's ratios. The study shows that one of the equilibrium structures (with elliptical CNT cross sections) has the property of a partial auxetic, that is, it has a negative Poisson's ratio under uniaxial loading in a certain direction. The proposed chain model can be effectively applied to analyze physical and mechanical properties of bundles of single-walled or multi-walled CNTs under the plane deformation conditions, and after simple modifications, it can be used to similar structures made of other two-dimensional nanomaterials.

Keywords: auxetic; carbon nanotubes bundle; elastic properties; transverse compression; chain model.

Acknowledgments: The research was carried out under the financial support of the Council for Grants of the President of the Russian Federation for government support of young Russian scientists and under the government support of leading scientific schools of the Russian Federation, grant NSh-4320.2022.1.2.

For citation: Abdullina D.U., Galiakhmetova L.Kh., Bebikhov Yu.V. Simulation of mechanical and physical properties of a carbon nanotubes bundle under the transverse compression using a chain model with the reduced number of degrees of freedom. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 15–22. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-15-22.