

ИЗУЧЕНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ КАРБИНА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Михайлов Ф.Н.

Чувашский государственный педагогический университет
им. И. Я. Яковлева, Физико-математический ф-т, каф. ОиТФ,
Тел.: (937)376-71-98
E-mail: fedormihailov@yandex.ru

В работе изучаются механические свойства карбина. Модель представляет собой семь цепочек длиной 13 нм рис. 1. При комнатной температуре (300 К) они подвергаются растяжению. Получены результаты по изменению длин связей, рассчитан модуль Юнга 28,5 ТПа (с эффективной механической толщиной 4 Å), что согласуется с недавно опубликованной работой [1].

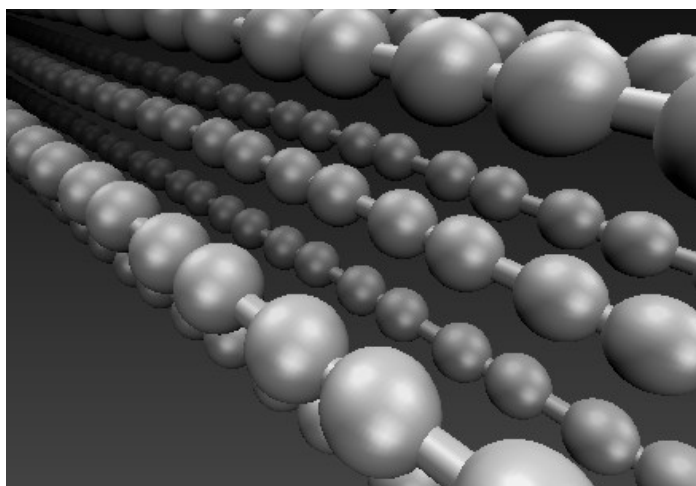


Рис. 1. Модель карбина.

Литература.

1. *Mingjie Liu, Vasilii I. Artyukhov, Hoonkyung Lee, Fangbo Xu, and Boris I. Yakobson, ACS Nano, DOI: 10.1021/nn404177r, Publication Date (Web) 2013.*