

ИЗУЧЕНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ КАРБИНА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Михайлов Ф.Н.

Чувашский государственный педагогический
университет имени И. Я. Яковлева. Россия,
428005, г. Чебоксары, fedormihailov@yandex.ru

В работе изучаются механические свойства карбина. Модель представляет собой массив цепочек, находящихся в ячейке с периодическими границами по бокам. При определённой температуре модель подвергается продольному растяжению. Получены результаты по деформации цепочек, рассчитан модуль Юнга ≈ 3.1 ТПа, порядок которого согласуется с недавно опубликованной работой [1].

Суть компьютерного эксперимента заключается в том, что один конец цепочек остаётся неподвижным, а ко второму концу прикладывается некоторая сила, если её недостаточно для разрушения карбина то она увеличивается. Таким образом, определяется предел прочности; зная силу, приложенную к цепочкам, удлинение и площадь поперечного сечения можно определить модуль Юнга (1). В работе исследуется три модели. В первой модели, в дальнейшем будем называть её М1, сила прикладывается мгновенно и остаётся постоянной на всём протяжении времени моделирования; количество атомов в цепочке – 100; система не изолирована и поддерживается постоянная температура – 300К. Вторая модели, в дальнейшем будем называть её М2, аналогична М1, только в цепочке – 50 атомов. Третья модель, в дальнейшем будем называть её М3, изолирована, начальная температура – 0К, прикладываемая сила линейно возрастает на всём протяжении времени моделирования от 0 до 6.95нН; количество атомов в цепочке – 50.

$$E = \frac{Fl}{S\Delta l} \quad (1)$$

Литература

1. Nair A.K., Cranford S.W. and Buehler M.J. // EPL. 2011. 16002.