

**ИССЛЕДОВАНИЕ СВЯЗИ УПРУГИХ ХАРАКТЕРИСТИК
ОДНОСЛОЙНОЙ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ И ГРАФЕНА****В.С. Зарубин, Е.С. Сергеева**

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация

e-mail: sergeeva.e.s@outlook.com

Представлены результаты исследования взаимосвязи между упругими характеристиками однослойного графена в предположении его изотропии в плоскости шестиугольных ячеек и образованной из графена в виде цилиндрической оболочки однослойной углеродной нанотрубки в предположении ее трансверсальной изотропии относительно продольной оси. Приведены полученные результаты для однослойной углеродной нанотрубки с индексами хиральности (4, 4).

Ключевые слова: графен, однослойная углеродная нанотрубка, упругие характеристики, изотропия, модуль Юнга, коэффициент Пуассона, матрица коэффициентов податливости.

**INVESTIGATION OF THE RELATIONSHIP BETWEEN ELASTIC
PROPERTIES OF A SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBES
AND GRAPHENE****V.S. Zarubin, E.S. Sergeeva**

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation

e-mail: sergeeva.e.s@outlook.com

The investigation shows the research results of relationship between elastic properties of single-layer graphene which is assumed to be isotropic in the plane of hexagonal cells and a single-walled carbon nanotube formed from graphene as a cylindrical shell. This nanotube is assumed to have transverse isotropy about the longitudinal axis. The results for a single-walled carbon nanotube with chirality indices (4, 4) are given.

Keywords: graphene, single-walled carbon nanotube, elastic properties, isotropy, Young's modulus, Poisson's ratio, compliance matrix.

В настоящее время в качестве армирующего материала в композициях широкое применение получили углеродные нанотрубки (УНТ). Ранние теоретические работы и недавние эксперименты в области исследования однослойных УНТ (ОУНТ) доказали, что нанотрубки являются одним из наиболее прочных материалов [1–3]. Данные, полученные для нанотрубок, имеют большой разброс значений. Например, модуль Юнга однослойных нанотрубок принадлежит к диапазону значений 0,22... 3,60 ТПа [4–6]. Существуют различные математические модели, позволяющие на основе механических свойств нанотрубок определить механические свойства армированного ими композита. Даже при малых концентрациях армирующих элементов упругие характеристики композитов значительно улучшаются по сравнению с

неармированным материалом [7–9]. Поэтому исследование и уточнение механических свойств ОУНТ — актуальная задача.

Прообраз нанотрубки — графеновая плоскость. Графен представляет собой однослойную двумерную углеродную структуру, поверхность которой выложена правильными шестиугольниками со стороной 0,142 нм и атомами углерода в вершинах [10]. Подобная структура представляет собой составляющий элемент кристаллического графита, в котором графеновые плоскости расположены на расстоянии примерно 3,4 нм друг от друга. За несколько лет, прошедших после первой публикации о получении и исследовании индивидуальных образцов графена, было разработано множество подходов к синтезу этого материала (микромеханическое расслоение графена, жидкофазное расслоение графита, окисление графита и синтез графена методом химического осаждения паров и т.д.) [10–12]. Открытие графена стало возможным только недавно, так как при получении графена наиболее трудной стадией является не столько синтез образцов, сколько идентификация и установление их основных параметров (размеры, число слоев) [10]. В результате открытия сравнительно простого способа выделения индивидуального образца графена в последние годы резко возрос интерес к получению, исследованию и практическому использованию графена. Этот интерес обусловлен такими уникальными физико-химическими свойствами графена, как высокая электро- и теплопроводность, высокая упругость и хорошие электромеханические характеристики [10, 13]. Графен имеет необычные механические свойства: наряду с хрупкостью он проявляет высокую податливость [10, 14]. Например, его можно упруго растянуть, удлинняя на 20 % [15].

В силу наличия более трех осей симметрии расположения атомов в плоскости графена его следует считать изотропным в этой плоскости [16–18]. Поэтому упругие свойства графена в плоскости можно характеризовать двумя независимыми параметрами: продольным модулем упругости (модулем Юнга) E и коэффициентом поперечной деформации (коэффициентом Пуассона) ν .

В настоящей работе была исследована и установлена взаимосвязь между упругими характеристиками однослойного графена в предположении его изотропии в плоскости шестиугольных ячеек и образованной из графена в виде цилиндрической оболочки ОУНТ в предположении ее трансверсальной изотропии относительно продольной оси. Для модуля сдвига в этой плоскости справедливо соотношение [19]

$$\mu = (E/2)(1 + \nu). \quad (1)$$

Однослойную углеродную нанотрубку можно принять за круговую цилиндрическую оболочку толщиной h и наружным диаметром D ,

свернутую из листа однослойного графена той же толщины. Тогда радиус срединной поверхности такой оболочки равен $R = (D - h)/2$. Условную толщину h однослойного графена обычно связывают с диаметром атома углерода, принимая толщину равной 0,075 нм. Ось ОУНТ обозначена через Ox_3 , а координатные оси в плоскости, перпендикулярной оси Ox_3 , — Ox_1 и Ox_2 . В силу изотропии графена упругие свойства ОУНТ в направлении осей Ox_1 и Ox_2 следует считать одинаковыми, т.е. плоскость, перпендикулярная оси Ox_3 , должна быть плоскостью изотропии. Таким образом, ОУНТ одновременно можно считать и круговой цилиндрической оболочкой, и прямолинейным круглым стержнем диаметром D , который обладает свойством трансверсальной изотропии относительно продольной оси Ox_3 . Для установления связи между перечисленными упругими характеристиками графена и коэффициентами податливости такого стержня рассмотрены следующие типы нагружения оболочки и стержня: растяжение вдоль продольной оси; нагружение крутящим моментом; нагружение давлением, равномерно распределенным по боковой поверхности; приложение касательных напряжений к основаниям.

Растяжение стержня и оболочки. При нагружении стержня силой P , растягивающей его вдоль оси Ox_3 , возникает деформация $\varepsilon_{33} = S_{33}\sigma_{33}$, где $\sigma_{33} = 4P/(\pi D^2)$ — напряжение в поперечном сечении стержня. Это напряжение связано с напряжением, которое возникает в оболочке

$$\sigma'_{33} = \frac{P}{\pi(D-h)h} = \frac{\sigma_{33}}{4(1-\eta)\eta}, \quad (2)$$

где $\eta = h/D$. В изотропном графене такое напряжение в силу закона Гука вызывает деформацию $\varepsilon'_{33} = \sigma'_{33}/E$. Из равенства деформаций ε_{33} и ε'_{33} с учетом соотношения (2) запишем

$$S_{33} = \frac{\varepsilon_{33}}{\sigma_{33}} = \frac{\varepsilon'_{33}/4}{\sigma_{33}(1-\eta)\eta} = \frac{1/4}{E(1-\eta)\eta}. \quad (3)$$

Согласно обобщенному закону Гука [19], сила P вызывает в стержне деформации в направлениях осей Ox_1 и Ox_2 , для трансверсально изотропного стержня эти деформации равны $\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = S_{13}\sigma_{33} = S_{23}\sigma_{33}$. В поперечном сечении стержня возникает напряжение $\sigma_{33} = 4P/(\pi D^2)$, связанное с напряжением, которое возникает в оболочке, соотношением (2). В изотропном графене такое напряжение в силу обобщенного закона Гука вызывает деформацию $\varepsilon'_{11} = -\nu\sigma'_{33}/E$. Из равенства деформаций ε_{11} и ε'_{11} с учетом соотношения (2) получим

$$S_{13} = S_{23} = \frac{\varepsilon_{11}}{\sigma_{33}} = \frac{-\nu\sigma'_{33}/4}{E\sigma'_{33}(1-\eta)\eta} = \frac{-\nu/4}{E(1-\eta)\eta}. \quad (4)$$

Нагружение крутящим моментом стержня и оболочки. Для нахождения коэффициента податливости $S_{66} = 2(S_{11} - S_{12}) = 2\varepsilon_{12}/\sigma_{12}$, определяющего связь между деформацией сдвига ε_{12} в плоскости изотропии стержня, перпендикулярной его продольной оси Ox_3 , и касательным напряжением σ_{12} в этой плоскости рассмотрено нагружение одинаковым крутящим моментом M_3 как стержня, так и оболочки, образованной сворачиванием графена. При этом наибольшее касательное напряжение в стержне диаметром D равно $\sigma_{12}^* = 16M_3/(\pi D^3)$ [19], а соответствующая деформация сдвига –

$$\varepsilon_{12}^* = \frac{S_{66}\sigma_{12}^*}{2} = \frac{8S_{66}M_3}{\pi D^3}. \quad (5)$$

При нагружении круговой цилиндрической оболочки толщиной h и наружным диаметром D таким же крутящим моментом для однородного по толщине касательного напряжения имеем [19]

$$\sigma'_{12} = \frac{M_3}{2\pi R^2 h} = \frac{4M_3}{\pi(D-h)^2 h}.$$

Этому напряжению соответствует деформация сдвига

$$\varepsilon'_{12} = \frac{\sigma'_{12}}{2\mu} = \frac{2M_3}{\pi(D-h)^2 h\mu}. \quad (6)$$

Из равенства правых частей соотношений (5) и (6) получим

$$S_{66} = \frac{1/4}{(1-\eta)^2 \eta \mu}. \quad (7)$$

Нагружение силой, равномерно распределенной по боковой поверхности. В плоскости изотропии для коэффициентов податливости справедливо равенство [19]

$$S_{66} = 2(S_{11} - S_{12}). \quad (8)$$

Равенство (8) совместно с формулой (1) используем для нахождения коэффициентов податливости $S_{11} = S_{22}$ и $S_{12} = S_{21}$. Для этого сначала рассмотрим нагружение стержня диаметром D давлением p , равномерно распределенным по боковой поверхности этого стержня. При таком нагружении в стержне возникает однородное напряженное состояние с напряжениями $\sigma_{11} = \sigma_{22} = -p$ при $\sigma_{33} \equiv 0$. Согласно обобщенному закону Гука, однородное деформированное состояние можно охарактеризовать компонентами тензора деформации [19]

$$\varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = (S_{11} + S_{12})\sigma_{11} = -(S_{11} + S_{12})p. \quad (9)$$

При этом деформация ε_{11} совпадает с относительным уменьшением диаметра стержня.

При таком нагружении тонкостенной круговой цилиндрической оболочки в ней возникают в окружном (тангенциальном) направлении напряжения $\sigma'_t = -p(D - h)/(2h)$ и деформация

$$\varepsilon'_t = \frac{\sigma'_t}{E} = -p \frac{D - h}{2Eh}. \quad (10)$$

Деформация (10) определяет относительное уменьшение диаметра оболочки, эквивалентное уменьшению диаметра стержня. Таким образом, из равенства правых частей соотношений (9) и (10) получим

$$S_{11} + S_{12} = \frac{1 - \eta}{2\eta E}. \quad (11)$$

С учетом равенства (7) из формул (8) и (11) следует

$$S_{11} = S_{22} = \frac{1 - \eta}{4\eta E} + \frac{1/16}{(1 - \eta)^2 \eta \mu} \quad (12)$$

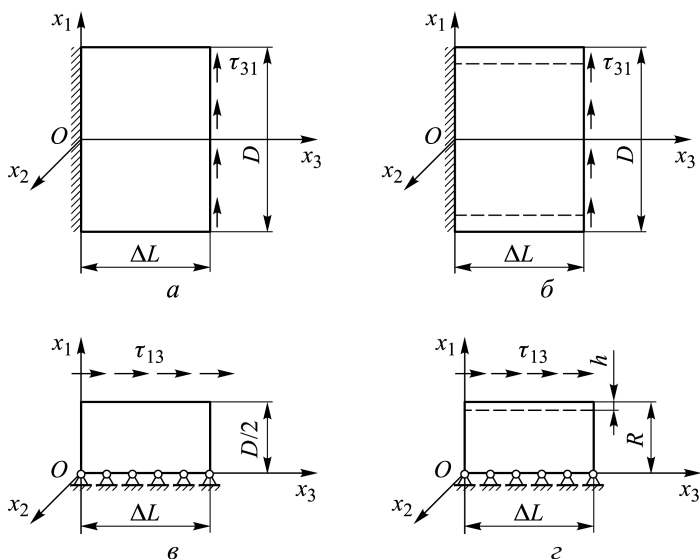
и

$$S_{12} = S_{21} = \frac{1 - \eta}{4\eta E} - \frac{1/16}{(1 - \eta)^2 \eta \mu}. \quad (13)$$

Приложение касательных напряжений к основаниям стержня и оболочки. Для нахождения коэффициентов податливости $S_{44} = S_{55}$ ОУНТ определено напряженно-деформированное состояние участков стержня и оболочки между двумя поперечными сечениями, в каждом из которых заданы противоположно направленные перерезывающие силы. В прямолинейном стержне с круглым поперечным сечением диаметром D двумя поперечными сечениями выделен участок длиной ΔL , геометрически представляющий собой цилиндр высотой ΔL . Введена прямоугольная декартова система координат $Ox_1x_2x_3$ с началом в центре нижнего основания цилиндра и осью Ox_3 , направленной перпендикулярно этому основанию. Нижнее основание цилиндра жестко закреплено, а к верхнему основанию приложены касательные напряжения τ_{31} , направленные вдоль оси Ox_1 (часть a рисунка).

Использовано предположение, что напряжения τ_{31} сдвигают все частицы, принадлежащие верхнему основанию, вдоль оси Ox_1 на малое расстояние Δx_1 , а у всех образующих боковой поверхности цилиндра, в исходном состоянии параллельных оси Ox_3 , возникает одинаковый наклон, определяемый углом $\gamma = \Delta x_1/\Delta L$. Этот угол соответствует деформации сдвига стержня в плоскости x_1Ox_3 . Тогда для материала стержня с учетом обобщенного закона Гука следует, что $C_{44} = C_{55} = \tau_{31}/\gamma$. В сплошном стержне при однородной деформации сдвига γ для касательных напряжений в плоскости верхнего основания $\tau_{31} = \text{const}$, что соответствует перерезывающей силе

$$Q = \pi \frac{D^2}{4} \tau_{31} = \pi \frac{D^2}{4} C_{44} \gamma. \quad (14)$$



Схемы, иллюстрирующие касательные напряжения τ_{31} , направленные вдоль оси Ox_1 , приложенные к участкам верхнего основания стержня (а) и свернутой из графена круговой цилиндрической оболочки (б), схемы, иллюстрирующие касательные напряжения τ_{13} , направленные вдоль оси Ox_3 , приложенные к участкам боковой поверхности стержня (в) и свернутой из графена круговой цилиндрической оболочки (г)

Для установления связи между величиной C_{44} и упругими характеристиками графена заменим цилиндр участком свернутой из графена круговой цилиндрической оболочки (часть б рисунка) толщиной h и радиусом $R = (D - h)/2$ срединной поверхности и той же длиной ΔL . При закрепленном нижнем основании этого участка оболочки сдвиг вдоль оси Ox_1 верхнего основания как абсолютно жесткого целого на малое расстояние Δx_1 приводит к одинаковому наклону всех образующих оболочки, определяемому тем же углом γ . В отличие от материала сплошного стержня сдвиговая деформация полотна графена не является однородной. Дело в том, что наклон образующих оболочки с исходными координатами $(x_1 = \pm R, x_2 = 0)$ не приводит к деформации сдвига графена, тогда как наклон образующих с исходными координатами $(x_1 = 0, x_2 = \pm R)$ вызывает в полотне графена деформацию сдвига, равную γ .

В цилиндрической системе координат с угловой координатой φ , отсчитываемой от оси Ox_1 в плоскости x_1Ox_2 , изменение деформации сдвига полотна графена описывает зависимость $\gamma^*(\varphi) = \gamma \sin \varphi$. Чтобы вызвать в графене деформацию $\gamma^*(\varphi)$, в направлении оси Ox_1 необходимо приложить касательное напряжение $\tau_{31}^*(\varphi) = \mu \gamma^*(\varphi) \sin \varphi = \mu \gamma \sin^2 \varphi$. Для этого к верхнему основанию оболочки приложим

суммарную перерезывающую силу

$$Q^* = 2Rh \int_0^{\pi} \tau_{31}^*(\varphi) d\varphi = 2Rh\mu\gamma \int_0^{\pi} \sin^2 \varphi d\varphi = \pi Rh\mu\gamma. \quad (15)$$

При условии $Q^* = Q$ из формул (14) и (15) получим

$$C_{44} = C_{55} = \mu \frac{4Rh}{D^2} = 2\mu\eta(1 - \eta). \quad (16)$$

Приближенность приведенного решения связана с рядом принятых допущений, которые в дальнейшем требуют уточнения на основе более строгой постановки задачи. Первое допущение связано с предположением об однородности сдвиговой деформации в цилиндре, соответствующего фрагменту сплошного стержня. Во втором допущении игнорируется искажение первоначально круглого верхнего поперечного сечения оболочки из графена при нагружении распределенными по боковой поверхности касательными напряжениями. Это допущение можно оправдать выбором весьма малого значения ΔL , что снижает искажение верхнего сечения оболочки вследствие жесткого закрепления ее нижнего поперечного сечения, но тогда возникают сомнения в правомерности замены $\text{tg } \gamma$ углом γ .

Отметим, что при приложении к боковой поверхности участка стержня (часть *b* рисунка) и оболочки (часть *z* рисунка) касательных напряжений τ_{13} , направленных вдоль оси Ox_3 , получен такой же результат, как и по формуле (16).

Элементы $C_{44} = C_{55}$ матрицы коэффициентов упругости связаны с элементами $S_{44} = S_{55}$ матрицы коэффициентов податливости соотношением [20]:

$$S_{44} = S_{55} = \frac{1}{C_{44}} = \frac{1}{C_{55}}. \quad (17)$$

Конфигурация однослойной углеродной нанотрубки. Для реализации количественного анализа соотношений (3), (4), (7), (12), (13) и (17), связывающих продольный модуль упругости E , коэффициент Пуассона ν и модуль сдвига μ однослойного графена с элементами матрицы податливости ОУНТ, рассмотрим два типа ОУНТ: 1) Armchair (“кресло”); 2) Zigzag (“зигзаг”). Идеальная ОУНТ представляет собой свернутую в цилиндр графеновую плоскость, т.е. поверхность, выложенную правильными шестиугольниками, в вершинах которых расположены атомы углерода. Такой результат зависит от угла ориентации графеновой плоскости относительно оси нанотрубки. В свою очередь, угол ориентации задает хиральность нанотрубки, которая определяет ее характеристики [21]. Хиральность нанотрубок обозначается набором индексов (n, m) , указывающих координаты шестиугольника, который при сворачивании плоскости должен совпадать

с шестиугольником, находящимся в начале координат. Еще один способ обозначения хиральности заключается в указании угла α между направлением сворачивания нанотрубки и направлением, в котором соседние шестиугольники имеют общую сторону. В этом случае для полного описания геометрии нанотрубки необходимо указать ее диаметр [22]. Индексы хиральности однослойной нанотрубки (n, m) однозначным образом определяют ее диаметр $D = \frac{\sqrt{3}d_0}{\pi} \sqrt{m^2 + n^2 + mn}$, где $d_0 = 0,142$ нм — расстояние между соседними атомами углерода в графеновой плоскости [22]. Связь между индексами хиральности (n, m) и углом α описывается соотношением

$$\sin \alpha = \frac{n\sqrt{3}}{2\sqrt{m^2 + n^2 + mn}}.$$

Среди различных возможных направлений сворачивания нанотрубок выделяются те, для которых совмещение шестиугольника (n, m) с началом координат не требует искажения его структуры. Этим направлениям соответствуют, в частности, угол $\alpha = 0^\circ$ и индекс хиральности $(n, 0)$ (тип Zigzag), угол $\alpha = 30^\circ$ и индекс хиральности (n, n) (тип Armchair). Остальные комбинации индексов хиральности описывают тип ОУНТ Chiral [23].

Результаты расчетов. Найдены значения элементов матрицы коэффициентов податливости для ОУНТ с индексами хиральности $(4, 4)$ (Armchair). В качестве известных значений модуля Юнга E и коэффициента Пуассона ν однослойного графена были использованы следующие [24]: $E = 1$ ТПа; $\nu = 0,249$. Используя формулы (3), (4), (7), (12), (13) и (17), определяем значения коэффициентов $S_{33}, S_{13} = S_{23}, S_{11} = S_{22}, S_{44} = S_{55}$. Полученные значения элементов матрицы коэффициентов податливости, ТПа⁻¹, приведены ниже:

S_{11}	S_{12}	S_{13}	S_{33}	S_{44}
2,534	0,584	-0,522	2,090	6,722

Выводы. Исследована и установлена взаимосвязь между упругими характеристиками однослойного графена в предположении его изотропии в плоскости шестиугольных ячеек и образованной из графена в виде цилиндрической оболочки ОУНТ в предположении ее трансверсальной изотропии относительно продольной оси. При выводе соотношений, связывающих модуль сдвига однослойного графена с элементами $S_{44} = S_{55}$ ОУНТ установлено, что касательные напряжения τ_{31} и τ_{13} вызывают одинаковую деформацию. Получены результаты для ОУНТ с индексами хиральности $(4, 4)$.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ по государственной поддержке молодых российских ученых — кандидатов наук (проект МК-6573.2015.8).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Overney G., Zhong W., Tomanek D.Z.* Structural rigidity and low frequency vibrational modes of long carbon tubules // *Zeitschrift für Physik D. Atoms, Molecules and Clusters*. 1993. Vol. 27. No. 1. P. 93–96. DOI: 10.1007/BF01436769
2. *Yakobson B.I., Brabec C.J., Bernholc J.* Nanomechanics of carbon tubes: Instabilities beyond linear response // *Phys. Rev. Lett.* 1996. Vol. 76. No. 14. P. 2511.
3. *Treacy M.M.J., Ebbesen T.W., Gibson J.M.* Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes // *Nature*. 1996. No. 381. P. 678–680.
4. *Krishnan A., Dujardin E., Ebbesen T.W., Yianilos P.N., Treacy M.M.J.* Young's modulus of single-walled nanotubes // *Phys. Rev. B*. 1998. No. 58. P. 14013–14019.
5. *Lourie O., Wagner H.D.* Evaluation of Young's modulus of carbon nanotubes by micro-Raman spectroscopy // *Journal of Materials Research*. 1998. No. 13. P. 2418–2422.
6. *Tensile tests of ropes of very long aligned multiwall carbon nanotubes / Z.W. Pan, S.S. Xie, L. Lu, B.H. Chang, L.F. Sun, W.Y. Zhou, G. Wang, D.L. Zhang // Applied Physics Letters*. 1999. No. 74. P. 3152–3154.
7. *Тарасова Е.С.* Исследование механических свойств композитов, армированных углеродными нанотрубками // Молодежный научно-технический вестник: электронный журнал. 2014. № 7. URL: <http://sntbul.bmstu.ru/doc/728018.html>
8. *Микитаев А.К., Козлов Г.В.* Эффективность усиления полимерных нанокомпозитов дисперсными наночастицами // *Materials Physics and Mechanics*. 2014. № 21. С. 51–57.
URL: http://www.ipme.ru/e-journals/MPM/no_12114/MPM121_06_kozlov.pdf
9. *Микитаев А.К., Козлов Г.В.* Перколяционная модель усиления нанокомпозитов полимер/углеродные нанотрубки // *Materials Physics and Mechanics*. 2015. № 22. С. 101–106.
URL: http://www.ipme.ru/e-journals/MPM/no_22215/MPM222_01_mikitaev.pdf
10. *Елецкий А.В., Искандарова И.М., Книжник А.А., Красиков Д.Н.* Графен: методы получения и теплофизические свойства // *УФН*. 2011. Т. 181. № 3. С. 233–268.
11. *Сорокин П.Б., Чернозатонский Л.А.* Полупроводниковые наноструктуры на основе графена // *УФН*. 2013. Т. 183. № 2. С. 113–132.
12. *Антонова И.В.* Современные тенденции развития технологий выращивания графена методом химического осаждения паров на медных подложках // *УФН*. 2013. Т. 183. № 10. С. 1115–1120.
13. *Samaei A.T., Aliha M.R.M., Mirsayar M.M.* Frequency analysis of agraphene sheet embedded in an elastic medium with consideration of small scale // *Materials Physics and Mechanics*. 2015. No. 22. P. 125–135.
14. *Галашев А.Е., Рахманова О.Р.* Устойчивость графена и материалов на его основе при механических и термических воздействиях // *УФН*. 2014. Т. 184. № 10. С. 1045–1065.
15. *Галашев А.Е., Дубовик С.Ю.* Молекулярно-динамическое моделирование сжатия однослойного графена // *Физика твердого тела*. 2013. Т. 55. Вып. 9. С. 1859–1866.
16. *Вустер У.* Применение тензоров и теории групп для описания физических свойств кристаллов; пер. с англ. М.: Мир, 1977. 384 с.
17. *Сиротин Ю.Н., Шаскольская М.П.* Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1979. 640 с.
18. *Новоселов К.С.* Графен: материалы Флатландии // *УФН*. 2011. Т. 181. № 12. С. 1299–1311.
19. *Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н.* Математические модели механики и электродинамики сплошной среды. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008. 512 с.
20. *Зарубин В.С.* Прикладные задачи термпрочности элементов конструкций. М.: Машиностроение, 1985. 292 с.
21. *Елецкий А.В.* Углеродные нанотрубки // *УФН*. 1997. Т. 167. № 9. С. 899–924.

22. *Елецкий А.В.* Углеродные нанотрубки и их эмиссионные свойства // УФН. 2002. Т. 172. № 4. С. 369–402.
23. *Prabhu S., Shubrajit Bhaumik, Vinayagam B.K.* Finite element modeling and analysis of zigzag and armchair type single wall carbon nanotube // *Journal of Mechanical Engineering Research*. 2012. Vol. 4 (8). P. 260–266.
24. *Bowman J.C., Krumhansl J.A.* The Low-Temperature Specific Heat of Graphite // *J. Phys. Chem. Solids*. 1958. Vol. 6. No. 4. P. 367–379.

REFERENCES

- [1] Overney G., Zhong W., Tomanek D.Z. Structural rigidity and low frequency vibrational modes of long carbon tubules. *Zeitschrift für Physik D. Atoms, Molecules and Clusters*, 1993, vol. 27, no. 1, pp. 93–96. DOI: 10.1007/BF01436769
- [2] Yakobson B.I., Brabec C.J., Bernholc J. Nanomechanics of carbon tubes: Instabilities beyond linear response. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, vol. 76, no. 14, p. 2511.
- [3] Treacy M.M.J., Ebbesen T.W., Gibson J.M. Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes. *Nature*, 1996, no. 381, pp. 678–680.
- [4] Krishnan A., Dujardin E., Ebbesen T.W., Yianilos P.N., Treacy M.M.J. Young's modulus of single-walled nanotubes. *Phys. Rev. B*, 1998, no. 58, pp. 14013–14019.
- [5] Lourie O., Wagner H.D. Evaluation of Young's modulus of carbon nanotubes by micro-Raman spectroscopy. *Journal of Materials Research*, 1998, no. 13, pp. 2418–2422.
- [6] Pan Z.W., Xie S.S., Lu L., Chang B.H., Sun L.F., Zhou W.Y., Wang G., Zhang D.L. Tensile tests of ropes of very long aligned multiwall carbon nanotubes. *Applied Physics Letters*, 1999, no. 74, pp. 3152–3154.
- [7] Tarasova E.S. The Study of Mechanical Properties of Composites Reinforced with Carbon Nanotubes. *Molodezhnyy nauch.-tekh. vestnik: elektron. zhurn.*, 2014, no. 7. Available at: <http://sntbul.bmstu.ru/doc/728018.html>
- [8] Mikitaev A.K., Kozlov G.V. The Efficiency of Polymer Nanocomposites Reinforcement by Disperse Nanoparticles. *Materials Physics and Mechanics*, 2014, no. 21, pp. 51–57 (in Russ.). Available at: http://www.ipme.ru/e-journals/MPM/no_12114/MPM121_06_kozlov.pdf
- [9] Mikitaev A.K., Kozlov G.V. Perkolyatsionnaya model' usileniya nanokompozitov polimer/uglerodnye nanotrubki. *Materials Physics and Mechanics*, 2015, no. 22, pp. 101–106 (in Russ.). Available at: http://www.ipme.ru/e-journals/MPM/no_22215/MPM222_01_mikitaev.pdf
- [10] Eletskiy A.V., Iskandarova I.M., Knizhnik A.A., Krasikov D.N. Graphene: fabrication methods and thermophysical properties. *Physics–Uspekhi*, 2011, vol. 54, no. 3, pp. 227–258. DOI: 10.3367/UFNe.0181.201103a.0233
- [11] Sorokin P.B., Chernozatonskiy L.A. Graphene-based semiconductor nanostructures. *Physics–Uspekhi*, 2013, vol. 56, no. 2, pp. 105–122. DOI: 10.3367/UFNe.0183.201302a.0113
- [12] Antonova I.V. Chemical vapor deposition growth of graphene on copper substrates: current trends. *Physics–Uspekhi*, 2013, vol. 56, no. 10, pp. 1013–1020. DOI: 10.3367/UFNe.0183.201310i.1115
- [13] Samaei A.T., Aliha M.R.M., Mirsayar M.M. Frequency analysis of a graphene sheet embedded in an elastic medium with consideration of small scale. *Materials Physics and Mechanics*, 2015, no. 22, pp. 125–135.
- [14] Galashev A.E., Rakhmanova O.R. Mechanical and thermal stability of graphene and graphene-based materials. *Physics–Uspekhi*, 2014, vol. 57, no. 10, pp. 970–989. DOI: 10.3367/UFNe.0184.201410c.1045
- [15] Galashev A.E., Dubovik S.Yu. Molecular dynamics simulation of compression of single-layer graphene. *Physics of the Solid State*, 2013, vol. 55, iss. 9, pp. 1976–1983. Available at: <http://link.springer.com/article/10.1134/S1063783413090102>

- [16] Wooster W.A. *Tensors and group theory for the physical properties of crystals*. Oxford, Clarendon Press, 1973. 344 p.
- [17] Sirotin Yu.N., Shaskol'skaya M.P. *Osnovy kristalofiziki [Fundamentals of crystal physics]*. Moscow, Nauka Publ., 1979. 640 p.
- [18] Novoselov K.S. Graphene: materials in the Flatland. *Physics–Uspekhi*, 2011, vol. 57, no. 12. Available at: <http://ufn.ru/en/articles/2011/12/s/>
- [19] Zarubin V.S., Kuvyrkin G.N. *Matematicheskie modeli mekhaniki i elektrodinamiki sploshnoy sredy [Mathematical models of mechanics and electrodynamics of continuous media]*. Moscow, MGTU im. N.E. Baumana Publ., 2008. 512 p.
- [20] Zarubin V.S. *Prikladnye zadachi termoprochnosti elementov konstruktsiy [Applied problems of thermal strength of structural elements]*. Moscow, Mashinostroenie Publ., 1985. 292 p.
- [21] Eletskiy A.V. Carbon nanotubes. *Physics–Uspekhi*, 1997, vol. 40, no. 9, pp. 899–924. DOI: 10.1070/PU1997v040n09ABEH000282
- [22] Eletskiy A.V. Carbon nanotubes and their emission properties. *Physics–Uspekhi*, 2002, vol. 45, no. 4, pp. 369–402. DOI: 10.1070/PU2002v045n04ABEH001033
- [23] Prabhu S., Shubrajit Bhaumik, Vinayagam B.K. Finite element modeling and analysis of zigzag and armchair type single wall carbon nanotube. *Journal of Mechanical Engineering Research*, 2012, vol. 4 (8), pp. 260–266.
- [24] Bowman J.C., Krumhansl J.A. The Low-Temperature Specific Heat of Graphite. *J. Phys. Chem. Solids*, 1958, vol. 6, no. 4, pp. 367–379.

Статья поступила в редакцию 10.04.2015

Зарубин Владимир Степанович — д-р техн. наук, профессор кафедры “Прикладная математика” МГТУ им. Н.Э. Баумана.

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5.

Zarubin V.S. — Dr. Sci. (Eng.), Professor of Applied Mathematics department, Bauman Moscow State Technical University.

Bauman Moscow State Technical University, 2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation.

Сергеева Елена Сергеевна — студентка кафедры “Прикладная математика” МГТУ им. Н.Э. Баумана.

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5.

Sergeeva E.S. — student of Applied Mathematics department, Bauman Moscow State Technical University.

Bauman Moscow State Technical University, 2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation.

Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Зарубин В.С., Сергеева Е.С. Исследование связи упругих характеристик однослойной углеродной нанотрубки и графена // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2016. № 1. С. 100–110. DOI: 10.18698/1812-3368-2016-1-100-110

Please cite this article in English as:

Zarubin V.S., Sergeeva E.S. Investigation of the relationship between elastic properties of a single-walled carbon nanotubes and graphene. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2016, no. 1, pp. 100–110. DOI: 10.18698/1812-3368-2016-1-100-110