

**КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ
ХАРАКТЕРИСТИК ЭНДОЭДРАЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ
«ОДНОСТЕННАЯ УГЛЕРОДНАЯ НАНОТРУБКА – НЕОРГАНИЧЕСКИЙ
ИНТЕРКАЛЯНТ»**

Анучин Н.М.¹, Еняшин А.Н.¹

¹) ИХТТ УрО РАН

E-mail: niko-anuchin@yandex.ru

**QUANTUM CHEMISTRY INVESTIGATION OF THE MECHANICAL
PROPERTIES OF COMPOSITES OF SINGLE-WALLED CARBON
NANOTUBES WITH INORGANIC INTERCALANTS**

Anuchin N.M.¹, Enyashin A.N.¹

¹) ISSC UB RAS

Mechanical properties of composites MX@SWCNT (MX = NaI, KCl, KI) – Young's and shear moduli, tensile strength - were studied using two levels of the density functional theory.

Свойства углеродных наноструктур вызывают значительный интерес. Сравнительно новым классом подобных материалов являются эндоэдральные комплексы «углеродная нанотрубка – неорганический интеркалянт». Несмотря на значительный прогресс в понимании механизмов образования, электронных и структурных свойств подобных композитов с ионными соединениями, как теоретические, так и экспериментальные сведения о модуляции механических свойств нанотрубок в составе таких комплексов отсутствуют. В настоящей работе теоретически рассмотрено деформационное поведение представительного класса эндоэдральных комплексов одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) с галогенидами KI, KCl, NaI. С использованием метода функционала электронной плотности в зонном варианте делается прогноз величин модуля Юнга наноструктур, как функции хиральности ОУНТ и наличия точечных дефектов в решётке интеркалянта. В кластерном варианте методом теории функционала плотности в приближении сильной связи на примере композитов NaI@ОУНТ(14,0), NaI@ОУНТ(15,0) и NaI@ОУНТ(8,8) рассмотрены деформации растяжения, изгиба, кручения: рассчитаны модули Юнга, модули сдвига и пределы прочности.

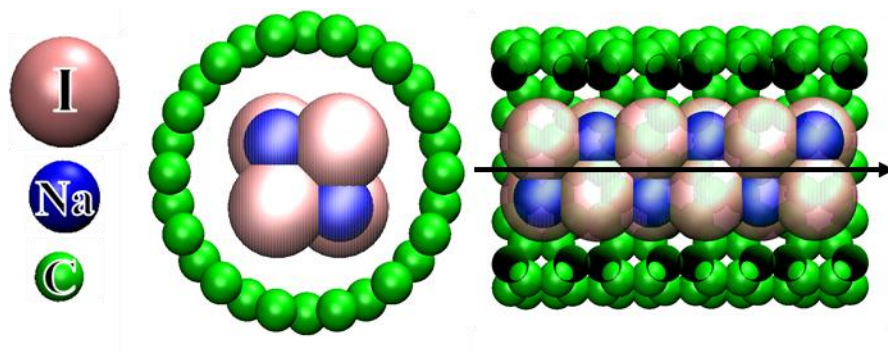


Рис. 1. Исследуемая система на примере композита NaI@ОУНТ(14;0)