

PACS numbers: 31.15.xv, 34.20.Cf, 36.40.Qv, 61.48.-c, 62.25.Mn, 81.05.U-, 85.85.+j

Молекулярно-динамічне моделювання впливу температури та швидкості деформації на міцність карбін-графенових наноелементів

С. О. Котречко^{1,2,3}, О. В. Овсянніков¹, М. А. Барвінко¹

¹Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,
бульв. Акад. Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна

²Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
вул. Володимирська, 60,
01601 Київ, Україна

³Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»,
просп. Берестейський, 37,
03056 Київ, Україна

Наведено результати молекулярно-динамічного моделювання впливу температури та швидкості деформації на міцність карбін-графенових наноелементів (КГН), які складаються із графенових листів, з'єднаних карбіновими ланцюжками. Для моделювання використано новітній «Machine Learning» АСЕ-потенціал. Встановлено, що міцність КГН контролюється міцністю контактних зв'язків, які з'єднують карбіновий ланцюжок з графеновими листами, а процес руйнування їх має термоактиваційний характер. Показано, що в напівлогаритмічних координатах міцність КГН лінійно зростає зі збільшенням швидкості деформації; водночас чутливість міцності до швидкості деформації зростає зі зростанням температури. За $T = 900$ К збільшення швидкості деформації на два порядки зумовлює зростання міцності на 6,5%. Зростання температури за постійної швидкості деформації спричинює зменшення міцності КГН. За швидкості деформації у $7,8 \cdot 10^6$ с⁻¹ зменшення міцності КГН в інтервалі температур 3–900 К не перевищує 20%. Це набагато менше величини відповідного ефекту для металевих нанодротів. Низька чутливість міцності КГН щодо температури та швидкості деформації обґрунтовує ефективність використання їх в якості елементів стрейнтроники.

The presented results of molecular-dynamics simulations reveal the effect of temperature and strain rate on the strength of carbyne-graphene nanostructures (CGN), which are composed of graphene sheets connected

by carbyne chains. A state-of-the-art ‘Machine Learning’ ACE potential is used for the simulations. As established, the strength of CGN is governed by the strength of contact bonds connecting carbyne chains with graphene sheets, and the bond-breaking process exhibits thermally activated behaviour. As demonstrated, in semi-logarithmic co-ordinates, the strength of CGN increases linearly with increasing strain rate; simultaneously, the sensitivity of strength to strain rate is rising as temperature increases. At $T = 900$ K, increasing the strain rate by two orders of magnitude leads to a strength increase of 6.5%. An increase in temperature at a constant strain rate results in a decrease in CGN strength. At a strain rate of $7.8 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$, the decrease in CGN strength over a temperature range of 3–900 K does not exceed 20% that is significantly lower than the corresponding effect observed in metallic nanowires. The low sensitivity of CGN strength to temperature and strain rate substantiates their effective use as straintronics elements.

Ключові слова: карбін, графен, карбін-графенові нанoelementи, контактний зв’язок, низькорозмірна наноструктура, міцність.

Key words: carbyne, graphene, carbyne–graphene nanoelements, contact bond, low-dimensional nanostructure, strength.

(Отримано 16 липня 2025 р.)

1. ВСТУП

Одноатомові ланцюжки Карбону вважаються ідеальними одновимірними провідниками та найтоншими можливими міжз’єднаннями для перспективних нанопристроїв [1–3]. Відтак, карбіни можуть застосовуватися в майбутніх пристроях, таких як транспортні канали, міжз’єднання на кристалі для молекулярної електроніки та спінтронні нанопристрої [4–6].

Зазвичай механічні властивості карбіну та графену досліджують як для ізольованих об’єктів: карбіну як нескінченного ланцюга [7], кільця [8–10] або скінченного ланцюга з одинокими атомами Гідрогену або металу на кінцях [10, 11]. Такі дослідження дають змогу одержати властивості ідеального полііну та кумулену з монотонною структурою; але ж у реальних об’єктах атомарні ланцюги термінуються на інших вуглецевих структурах, зазвичай двовимірних [5, 12].

Аналогічно, дослідження графену сконцентровано на його властивостях у нескінченно періодичних умовах, у нанострічках, на впливі дефектів, пошкоджень і впливі доданих атомів металів або навіть на самому процесі формування карбіну розтягуванням графенових нанострічок [13, 14].

Навіть створений у [15] модель впливу довжини, температури та хемічного оточення на міцність карбінового ланцюга побудо-

ваний з використанням періодичних умов, тобто за відсутністю місця закріплення карбіну. Проте в [16] було показано, що руйнування КГН у зігзаг-орієнтації відбувається саме у контактному зв'язку. Також у чисельних дослідженнях анравлінгу графену показано, що саме у контактній частині відбувається розрив атомових зв'язків, що приводить до видовження карбінового ланцюга [14, 17]. Тому важливим є саме дослідження таких об'єктів, як карбін-графенові нанoelementи, що складаються з графенових листів, з'єднаних карбіновим ланцюжком, бо вони вже містять у собі цю контактну зону, яка й викликає найбільший інтерес з точки зору міцності у реальних об'єктах скінченного розміру, які вже одержують розтягуванням графену [12].

Ефективним методом дослідження нанорозмірних об'єктів є метод молекулярної динаміки. Але до останнього часу проблемою було налаштування потенціалу для конфігурацій, що містять різні алотропи вуглецю одночасно; тому поодинокі спроби моделювати контакт графену та карбіну суперечили першопринципним DFT-розрахункам [18]. В останні роки досягнуто великий прогрес у розробці міжатомових потенціалів і віднайдено нові методи побудови їх, що уможлиблює одержувати точність, порівнянну з теорією функціоналу густини (DFT) [19, 20].

Дану роботу спрямовано на одержання ключових закономірностей залежності міцності КГН від температури, швидкості деформації та довжини карбінового ланцюга методом молекулярної динаміки з використанням новітнього «Machine Learning» АСЕ-потенціалу [20].

2. ОБ'ЄКТ ДОСЛІДЖЕННЯ Й ОБЧИСЛЮВАЛЬНИЙ МЕТОД

Для моделювання контактного взаємодіяння об'єкта дослідження було обрано карбін-графеновий нанoelement — два листи графену, з'єднані карбіновим ланцюжком (листи графену розташовано в одній площині з орієнтацією типу «зігзаг», а карбіновий ланцюжок паралельний відповідному напрямку в графені).

Для проведення розрахунків було використано метод молекулярної динаміки та програмний пакет LAMMPS [21]. У якості міжатомового потенціалу було обрано потенціал МД-АСЕ-типу [19, 22], що перевершує доступні класичні й інші машинно-навчальні потенціали. АСЕ параметеризовано на основі вичерпного набору важливих вуглецевих структур у розширеному діапазоні об'ємів та енергій, розрахованих з використанням DFT. Цей потенціал був обраний завдяки його високій точності відтворення структурних і механічних властивостей як кристалічних, так і аморфних вуглецевих фаз [20].

На рисунку 1, б видно, що обраний потенціал коректно відо-

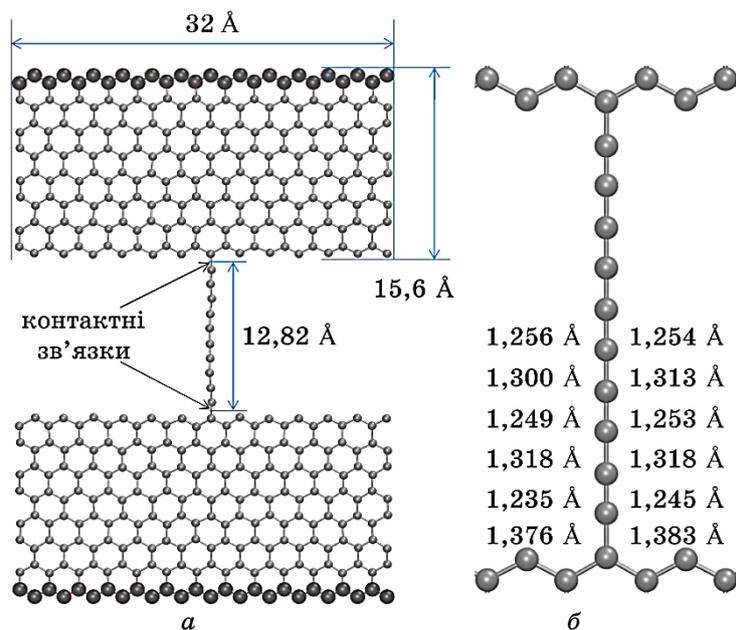


Рис. 1. КГН; *a* — геометричні розміри зразка (великими кулями позначено атоми, що виконують роль захватів); *б* — міжатомові віддалі в карбіновому ланцюжку з 10 атомів (ліворуч ланцюжка — МД-дані з використанням [20], праворуч — дані з [23]).¹

бражає структуру полііну (чергування довгих і коротких зв'язків та їхні довжини), що було підтверджено порівнянням з розрахунками методом теорії функціоналу густини (DFT) [23].

Моделювання проводилося на листах графену розміром $15,6 \times 32,0$ Å з періодичними крайовими умовами у напрямку, перпендикулярному до напрямку розтягу. Загальна кількість атомів у системі становила 426 атомів (рис. 1, *a*). Інтегрування рівнянь руху проводилося з часовим кроком у $1 \cdot 10^{-15}$ с. Для контролю температури використовувався термостат Носе–Гувера [24] з параметром демпфування $T_{damp} = 0,20$, що відповідає часовій константі релаксації у 200 кроків моделювання ($2 \cdot 10^{-13}$ с).

Розтягування через деформацію розрахункової комірки проводилось із постійною швидкістю. Крайні атоми виконували роль захватів і були зафіксовані. Такий підхід уможливило забезпечити квазистатичний режим деформації, за якого система встигає релаксувати після кожного мікроскопічного приросту деформації.

Значення координат, швидкостей і віріальних напружень записували після кожних 10 кроків. Силу, прикладену до ланцюга,

обчислювали через суму віріальних напружень атомів [25]:

$$\sigma_{ch}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2V_{ch}} \sum_i^{i \in ch} \xi_i^{\alpha\beta}, \quad (1)$$

де $\alpha, \beta = \overline{x, y, z}$ — індекси компонент тензора, $\sigma_{ch}^{\alpha\beta}$ — напруження в ланцюжку, $\xi_{ch}^{\alpha\beta}$ — віріальне напруження на i -му атомі; сумування виконується по атомах всередині ланцюжка.

$$\begin{aligned} \xi_i^{\alpha\beta} = & -2m_i v_\alpha v_\beta + \sum_{i \neq j}^N r_{ij}^\alpha f_{ij}^\beta + \\ & + \frac{1}{3} \sum_{j, k \neq i}^N (r_{ij}^\alpha f_{ijk}^\beta + r_{ij}^\alpha f_{ijk}^\beta) + \frac{1}{4} \sum_{j, k, l}^N (r_{ij}^\alpha f_{ijkl}^\beta + r_{ik}^\alpha f_{ijkl}^\beta + r_{il}^\alpha f_{ijkl}^\beta), \end{aligned} \quad (2)$$

де r_{ij}^α — α -компонента відстані між атомами i та j , f_{ij}^β — компонента сили парної взаємодії між атомами i та j , f_{ijk}^β — компонента тричастинкової взаємодії між атомами i, j, k ; f_{ijkl}^β відповідає чотирочастинковій взаємодії між атомами i, j, k, l .

Оскільки карбіновий ланцюжок є одновимірним об'єктом, то природньо визначати його міцність у одиницях сили, вважаючи, що

$$V_{ch} = S_{ch} L_{ch}, \quad (3)$$

де S_{ch} і L_{ch} — це площа перерізу та довжина карбінового ланцюга відповідно.

Вважаючи, що площа перерізу є незмінною вздовж всього ланцюжка, та визначаючи його довжину L_{ch} як суму довжин усіх міжатомових віддалей всередині ланцюжка плюс половини довжин двох контактних зв'язків (рис. 1, а), з формули (1) одержуємо:

$$F = \frac{1}{2L_{ch}} \sum_i^{i \in ch} \xi_i^{yy}, \quad (4)$$

де $F = \sigma^{yy}/S_{ch}$ — сила, яку прикладено до карбінового ланцюжка вздовж вісі Oy , бо саме вздовж неї було його зорієнтовано; сумування провадиться по атомах ланцюжка.

Проблема моделювання впливу температури полягає в тому, що за температур, які відрізняються від нульової, сила, одержана з формули (4), враховує внесок усіх локальних флюктуацій, що істотно «зашумлюють» значення миттєвої сили та її критичного значення, відносно середньої величини (рис. 2). Для нівелювання цього ефекту ми використовували метод «експоненційного ковзного середнього» (ЕМА). Вибір величини параметра ЕМА є

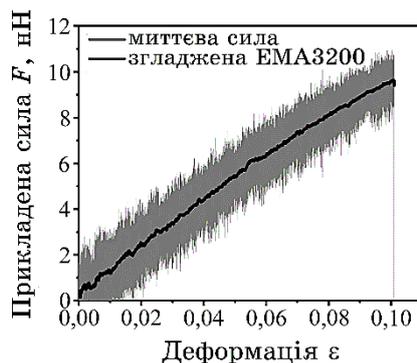


Рис. 2. Залежність прикладеної сили від деформації КГН з ланцюжком із 10 атомів за температури у 600 К зі швидкістю у 0,01 м/с.²

ТАБЛИЦЯ. Параметри розтягування для карбінкових ланцюжків різної довжини.³

| Кількість атомів | Довжина ланцюжка L_0 , Å | Швидкість розтягування v , м/с | Швидкість деформування $\dot{\epsilon}$, с ⁻¹ . | Параметер усереднення ЕМА |
|------------------|----------------------------|----------------------------------|---|---------------------------|
| 6 | 7,73 | 0,006 | $7,8 \cdot 10^6$ | 3200 |
| | | 0,06 | $7,8 \cdot 10^7$ | 2000 |
| | | 0,6 | $7,8 \cdot 10^8$ | 200 |
| 10 | 12,82 | 0,01 | $7,8 \cdot 10^6$ | 3200 |
| | | 0,1 | $7,8 \cdot 10^7$ | 2000 |
| | | 1,0 | $7,8 \cdot 10^8$ | 200 |
| 14 | 17,95 | 0,014 | $7,8 \cdot 10^6$ | 3200 |
| | | 0,14 | $7,8 \cdot 10^7$ | 2000 |
| | | 1,4 | $7,8 \cdot 10^8$ | 200 |
| 18 | 23,06 | 0,018 | $7,8 \cdot 10^6$ | 3200 |
| | | 0,18 | $7,8 \cdot 10^7$ | 2000 |
| | | 1,8 | $7,8 \cdot 10^8$ | 200 |

певним компромісом: більш високе значення дає більш гладку криву й ефективніше «бореться» з шумом, але водночас сильніше занижує середнє значення відносно ефективного значення в точці. Для швидкості розтягування у 1 м/с використовувалося значення параметра ЕМА = 200 та його збільшували пропорційно зменшенню швидкості, тобто для 0,1 м/с ЕМА = 2000. З подальшим зменшенням швидкості граничним значенням було 3200; подальше збільшення не дає ефекту (табл.).

Порівняння результатів моделювання з великою графеновою

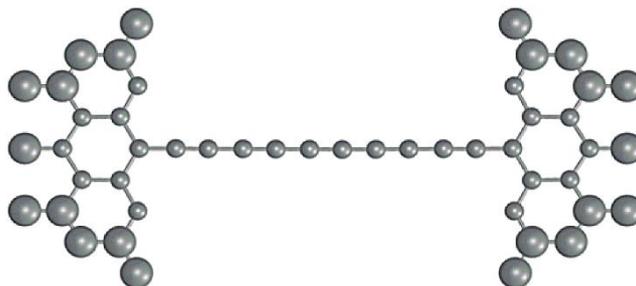


Рис. 3. Зразок зі зменшеною приконтальною зоною (великими кулями позначено атоми-захвати).⁴

областю (рис. 1) і малою (рис. 3) обґрунтувало можливість використання зразків зі зменшеною кількістю атомів. Таким чином, зразок містив 48 атомів замість 426, що дало змогу значно пришвидшити розрахунки та набрати статистику для більш точного розрахунку середніх величин. Для кожної температури виконано понад 50 симуляцій зі змінним початковим розподілом швидкостей атомів.

Було промодельовано карбінові ланцюжки різної довжини із 6, 10, 14 або 18 атомами. Парна кількість атомів забезпечує узгодженість чергування довгих і коротких зв'язків (рис. 1, б) уздовж усього ланцюга, враховуючи, що контактні зв'язки мають бути «довгими». Це можна інтерпретувати так, що більші віддалі відповідають одинарним валентним зв'язкам, а коротші — потрійним. Для ланцюжків з 6, 14, 18 атомів швидкість розтягування масштабували так, щоб зберігалася швидкість деформації (табл.).

3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

У логаритмічній шкалі залежність міцності від швидкості деформації для кожної температури є лінійною (рис. 4), тобто сама залежність є експоненційною, що свідчить про те, що розрив контактного зв'язку в карбін-графеновому наноеlementі є термоактивним процесом [26].

На графіках видно, що з пониженням температури вплив швидкості розтягування на міцність зменшується, що вказує на домінування *атермічної компоненти* механізму руйнування за низьких температур. Це зумовлено тим, що швидкість деформації контролює час, який «виділяється» на очікування критичної флюктуації, необхідної для розриву атомового зв'язку. З пониженням температури зменшується ймовірність появи такої критичної флюктуації і, відповідно, вплив температури на величину

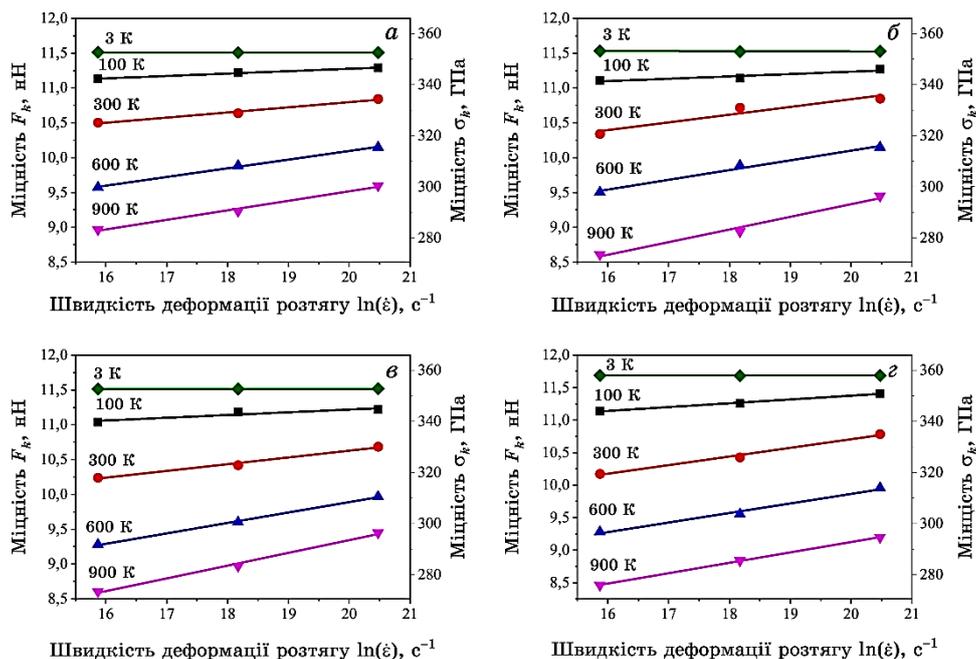


Рис. 4. Вплив температури на міцність контактного зв'язку в КГН для карбінкових ланцюгів з різною кількістю атомів: *a* — 6 атомів, *б* — 10 атомів, *в* — 14 атомів, *г* — 18 атомів.⁵

зусилля, необхідного для розриву зв'язку. Таким чином, за низьких температур міцність структури наближається до свого граничного значення, яке визначається виключно характеристиками міжатомових зв'язків, а не термічно активованим подоланням енергетичного бар'єру.

Залежності від температури, представлені на рис. 5, є близькими до лінійних, що відповідає результатам [18]. Максимальне зменшення міцності зі зростанням температури до 900 К за мінімальної швидкості деформації у $7,8 \cdot 10^6 s^{-1}$ не перевищує 20%. За порядком величини це є близьким до даних для графену (27%) [27], проте набагато менше, ніж для металевих нанодротів (50%) [28]. Це можна пояснити, насамперед, високою цупкістю міжатомових зв'язків у карбінтовому ланцюжку.

Така залежність пов'язана з тим, що з підвищенням температури збільшується ймовірність критичної флюктуації, необхідної для розриву зв'язку за прикладеної сили, яка менша за міцність зв'язку.

Із збільшенням довжини ланцюга чутливість міцності до температури зростає, але цей вплив є незначним: різниця між ланцюгами з 6 та 18 атомами за 900 К становить близько 5%. Однак

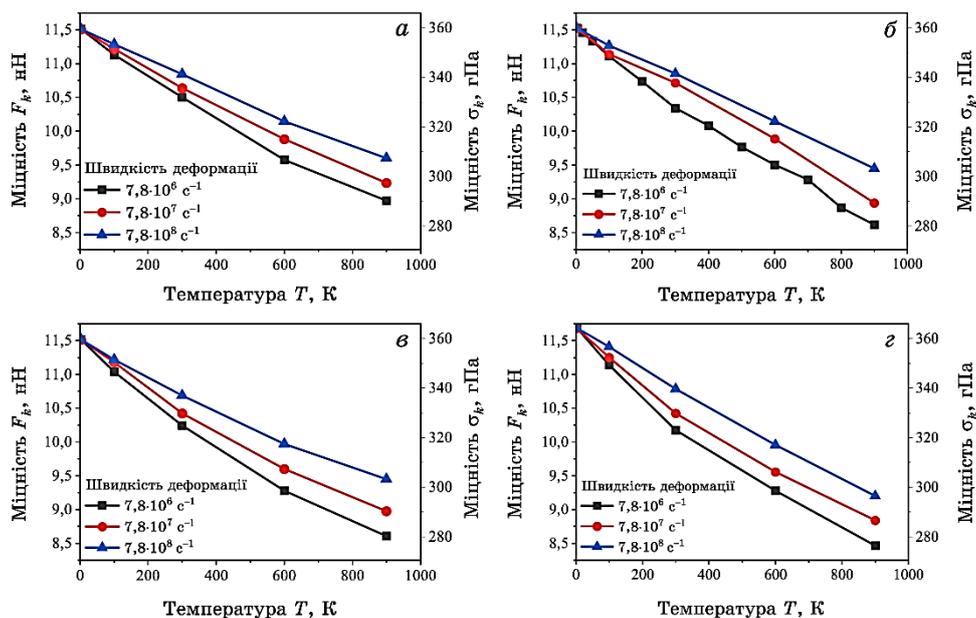


Рис. 5. Вплив швидкості деформації на міцність контактної зв'язки в КГН для карбінних ланцюгів з різною кількістю атомів: *a* — 6 атомів, *b* — 10 атомів, *c* — 14 атомів, *d* — 18 атомів.⁶

це значення істотно менше, ніж 16%, одержаних авторами в [18] між ланцюгами з $n = 6$ і $n = 12$. Це можна пояснити різницею у міжатомових потенціалах: як зазначають самі автори [18], їхні результати відрізняються від даних DFT-розрахунків, тоді як у нашій роботі використано потенціал ACE, який забезпечує найкращу відповідність даним DFT. Цей результат також відрізняється від [17], де міцність зменшується з довжиною обернено пропорційно кількості атомів. Але істотна відмінність нашого об'єкту в тому, що це — не ізольований карбінний ланцюжок, а КГН, гранична міцність якого визначається міцністю контактної зв'язки. Тобто розрив інших зв'язків не відбувається; то ж вплив довжини ланцюга є мінімальним, а відмінності, які спостерігаються для високих температур, ймовірно, пов'язані з різницею у спектрах коливань ланцюжків різної довжини, що, в свою чергу, змінює амплітуду та час очікування флюктуацій.

Фізична сутність впливу температури та швидкості деформації на міцність КГН полягає в тому, що температура «задає» величину та ймовірність флюктуації міжатомової віддалі, а швидкість деформації «обмежує» час очікування величини критичної флюктуації, необхідної для розриву зв'язку.

Для кількісної аналізи впливу температури та швидкості дефор-

мації на міцність нанооб'єктів використовують модель Журкова [26] і принцип Бейлі. Модель Журкова застосовується для прогнозування впливу температури та величини прикладеного напруження на час очікування розриву зв'язку (формула (5)), а принцип Бейлі враховує зростання величини напруження в процесі деформування зв'язку (формула (6)):

$$\tau = \frac{\tau_0}{n_s} \exp\left(\frac{U_0 - \gamma\sigma}{k_B T}\right), \quad (5)$$

де τ — час до руйнування матеріалу, U_0 — енергія зв'язку, γ — активаційний об'єм, k_B — Больцманова стала, σ — міцність, τ_0 — період коливань атома, n_s — кількість місць, доступних для перехідного стану; у нашому випадку $n_s = 2$, бо КГН має 2 контактних зв'язку, у яких може відбутися руйнування;

$$\int_0^{t_r} \frac{dt}{\tau(T, \sigma(t))} = 1. \quad (6)$$

У лінійному наближенні залежність міцності від часу за постійної швидкості деформації описується виразом:

$$\sigma(t) = K\dot{\varepsilon}t, \quad (7)$$

де K — модуль пружності, $\dot{\varepsilon}$ — швидкість деформації.

Підставивши (5) і (7) у (6), одержуємо:

$$\sigma(\dot{\varepsilon}) = \frac{U_0}{\gamma} + \frac{k_B T}{\gamma} \ln\left(\frac{\gamma K \tau_0}{n_s k_B T}\right) + \frac{k_B T}{\gamma} \ln(\dot{\varepsilon}). \quad (8)$$

«Січний» модуль K розраховується як

$$K = \frac{k l_0}{S}, \quad (9)$$

де k — цупкість контактної зв'язку (рис. 6), l_0 — початкова довжина контактної зв'язку ($1,38 \text{ \AA}$), S — площа поперечного перерізу атомарного ланцюга. Цупкість k визначалась як тангенс кута нахилу січної на графіку деформації контактної зв'язку (рис. 6) і становила $32,9 \text{ нН/\AA}$.

Площа поперечного перерізу S розраховувалася за формулою

$$S = \pi d^2/4, \quad (10)$$

де $d \approx 2 \text{ \AA}$ — діаметр моноатомового ланцюга з [29].

Звідси модуль пружності — $K \approx 1,44 \text{ ТПа}$.



Рис. 6. Діаграма деформації контактної зв'язки з лінійною апроксимацією; цупкість контактної зв'язки визначено як тангенс кута нахилу «січної апроксимації» — $k = 32,9$ нН/Å (модуль пружності, який відповідає цій січній, становить $K = 1,44$ ТПа, згідно з формулою (9)).⁷

Розрахуємо γ з коефіцієнта лінійної апроксимації залежностей на рис. 4:

$$\gamma = \frac{k_B T}{\alpha}, \quad (11)$$

де α — це тангенс кута нахилу апроксимаційної прямої:

$$\alpha = \frac{\sigma}{\ln(\dot{\epsilon})}, \quad (12)$$

Тоді енергія зв'язку —

$$U_0 = \frac{k_B T}{\alpha} \left[\sigma - \alpha \ln \left(\frac{k l_0 \dot{\epsilon} \tau_0}{S n_s \alpha} \right) \right]. \quad (13)$$

З одержаних результатів, що наведені на рис. 8, випливає, що активаційний об'єм та енергія зв'язку зростають з підвищенням температури в 2–3 рази та змінюють свої значення з довжиною ланцюжка. Також одержані значення істотно відрізняються від значень для графенового листа: $\gamma = 8,49$ Å³, $U_0 = 4,94$ еВ [13]. Тим більше, що за визначенням енергія міжатомового зв'язку не залежить від температури. Кількісна інтерпретація цих ефектів потребує розробки спеціального моделювання міцності для КГН.

4. ВИСНОВКИ

У напівлогаритмічних координатах міцність карбін-графенових наноелементів (КГН) лінійно зростає із швидкістю деформації. «Чутливість» міцності до зміни швидкості деформації залежить від температури, зростаючи із її підвищенням. Зі збільшенням

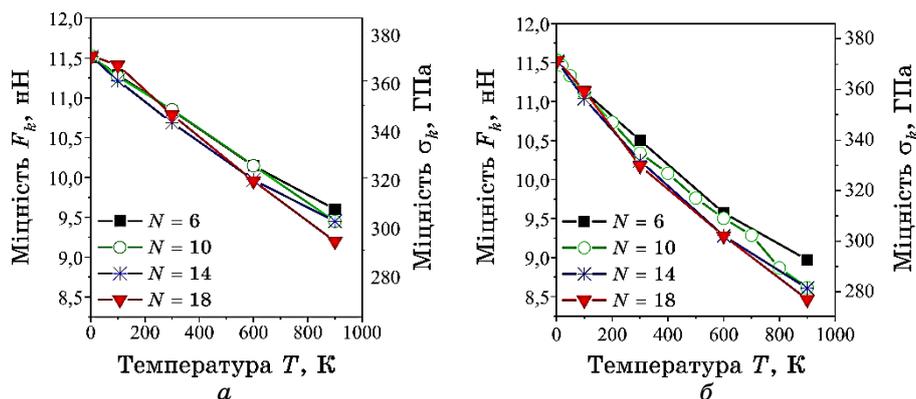


Рис. 7. Вплив кількості N атомів у карбінному ланцюгу на міцність за швидкості деформації: a — 0.01 м/с, b — 1 м/с.⁸

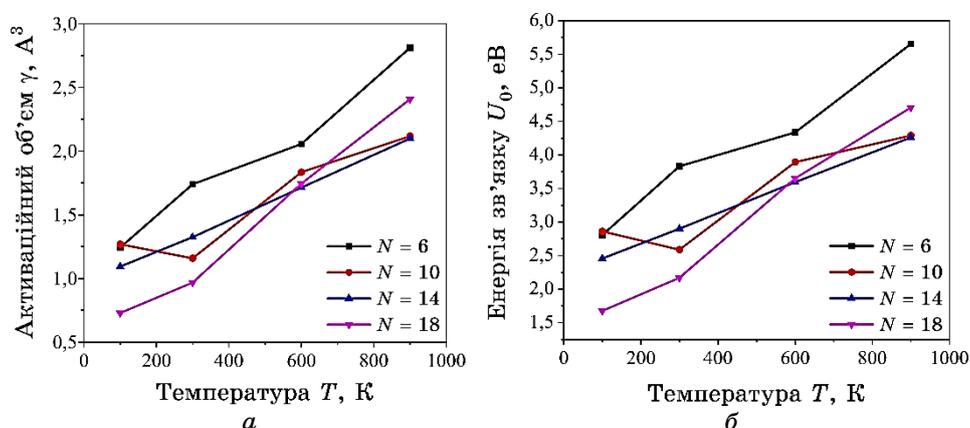


Рис. 8. Графік залежності параметрів моделю Журкова–Бейлі від температури та кількості N атомів у ланцюгу: a — активаційний об'єм, b — енергія зв'язку.⁹

швидкості деформації на 3 порядки міцність збільшується на 1,4% за $T = 100$ К, на 3,1% — за 300 К, на 6,5% — за 900 К.

В інтервалі температур 3 К–900 К спостерігається зменшення міцності КГН, величина чого не перевищує 20%. Це набагато менше величини відповідного ефекту для металевих нанодротів, що спричинено, в першу чергу, високою енергією sp -зв'язків.

Вплив температури та швидкості деформації на міцність карбін-графенових наноелементів зумовлений термофлюктуаційною природою міцності цих об'єктів. Її фізична сутність полягає в тому, що температура «задає» величину ймовірності флюктуацій

міжатомової віддалі, а швидкість деформації «контролює» величину часу, що виділяється на очікування критичної флюктуації. Феноменологічні моделі Журкова та Бейлі не дають змогу на кількісному рівні описати ці закономірності.

За температур, які не перевищують 300 К, зміна довжини карбінового ланцюжка в інтервалі значень 8–23 Å практично не впливає на міцність КГН і її «чутливість» щодо температури та швидкості деформації. Це зумовлено тим, що міцність КГН контролюється розривом контактних зв'язків, власні характеристики яких практично не залежать від довжини ланцюжка. Незначний, до 5%, вплив довжини карбінового ланцюжка на міцність за більш високих температур може бути зумовленим зміною амплітудно-частотних характеристик коливання ланцюжка зі зміною його довжини.

Низька чутливість міцності КГН щодо температури та швидкості деформації обґрунтовує ефективність використання їх в якості елементів стрейнтроники.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. Ferdaous Ben Romdhane, Jean-Joseph Adjizian, Jean-Christophe Charlier, and Florian Banhart, *Carbon*, **122**: 92 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2017.06.039>
2. Syed Ghazi Sarwat, Pascal Gehring, Gerardo Rodriguez Hernandez, Jamie H. Warner, G. Andrew D. Briggs, Jan A. Mol, and Harish Bhaskaran, *Nano Letters*, **17**, Iss. 6: 3688 (2017); doi:10.1021/acs.nanolett.7b00909
3. Ovidiu Cretu, Andrés R. Botello-Mendez, Izabela Janowska, Cuong Pham-Huu, Jean-Christophe Charlier, and Florian Banhart, *Nano Letters*, **13**, Iss. 8: 3487 (2013); <https://doi.org/10.1021/nl4018918>
4. L. Shen, M. Zeng, S. Yang, C. Zhang, X. Wang, and Y. Feng, *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, Iss. 33: 11481-1–6 (2010); <https://doi.org/10.1021/ja909531c>
5. A. La Torre, A. Botello-Mendez, W. Baaziz, J.-C. Charlier, and F. Banhart, *Nat. Commun.*, **6**: 6636 (2015); <https://doi.org/10.1038/ncomms7636>
6. Z. Zhang, J. Zhang, G. Kwong, J. Li, Z. Fan, X. Deng, and G. Tang, *Sci. Rep.*, **3**: 2575 (2013); <https://doi.org/10.1038/srep02575>
7. Enlai Gao, Yongzhe Guo, Zhengzhi Wang, O. Nielsen, and Ray H. Baughman, *Matter*, **5**, Iss. 4: 1192 (2022); <https://doi.org/10.1016/j.matt.2022.01.021>
8. M. Liu, V. Artyukhov, H. Lee, F. Xu, and B. Yakobson, *ACS Nano*, **7**, Iss. 11: 10075 (2013); <https://doi.org/10.1021/nn404177r>
9. Y. He, H. Xu, G. Ouyang, and G. Yang, *Results in Physics*, **34**: 105311 (2022); <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2022.105311>
10. T. Chen and Y. Luo, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, **486**, Iss. 2: 1875 (2019); <https://doi.org/10.1093/mnras/stz1014>
11. E. Kano, M. Takeguchi, J. Fujita, and A. Hashimoto, *Carbon*, **80**: 382 (2014); <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2014.08.077>
12. Sampathkumar Jeevanandham, Dakshi Kochhar, Omnarayan Agrawal, Sidhartha Pahari, Chirantan Kar, Tamal Goswami, Indra Sulania, and Monali-

- sa Mukherjee, *Nanoscale Advances*, **6**: 2390 (2024); <https://doi.org/10.1039/d4na00076e>
13. H. Zhao and N. R. Aluru, *J. Appl. Phys.*, **108**: 064321 (2010); <https://doi.org/10.1063/1.3488620>
 14. Yin Wang, Xi-Jing Ning, Xheng-Zhe Lin, and Peng Li Jun Zhuang, *Phys. Rev. B*, **76**: 165423 (2007); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.165423>
 15. Reza Mirzaeifar, Zhao Qin, and Markus J. Buehler, *Nanotechnology*, **25**: 371001 (2014); <https://doi.org/10.1088/0957-4484/25/37/371001>
 16. Sergiy Kotrechko, Nataliya Stetsenko, and Eugene Kolyvoshko, *Solid State Phenomena*, **258**: 286 (2017); <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.258.286>
 17. Yin Wang, Xi-Jing Ning, Xheng-Zhe Lin, and Peng Li Jun Zhuang, *Phys. Rev. B*, **76**: 165423 (2007); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.165423>
 18. Xueming Yang, Yanhui Huang, Bingyang Cao, and Albert C. To, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **93**: 124 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.physe.2017.06.006>
 19. R. Drautz, *Phys. Rev. B*, **99**: 014104 (2019); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.014104>
 20. Minaam Qamar, Matous Mrovec, Yury Lysogorskiy, Anton Bochkarev, and Ralf Drautz, *arXiv:2210.09161v4 [cond-mat.mtrl-sci] 12 Jun 2023*; <https://doi.org/10.48550/arXiv.2210.09161>
 21. Aidan P. Thompson, H. Metin Aktulga, Richard Berger, Dan S. Bolintineanu, W. Michael Brown, Paul S. Crozier, Pieter J. In't Veld, Axel Kohlmeyer, Stan G. Moore, Trung Dac Nguyen, Ray Shan, Mark J. Stevens, Julien Tranchida, Christian Trott, and Steven J. Plimpton, *Computer Physics Communications*, **271**: 108171 (2022); <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171>
 22. Yury Lysogorskiy, Cas van der Oord, Anton Bochkarev, Sarath Menon, Matteo Rinaldi, Thomas Hammerschmidt, Matous Mrovec, Aidan Thompson, Gábor Csányi, Christoph Ortner, and Ralf Drautz, *npj Comput Mater.*, **7**, Article No. 97 (2021); <https://doi.org/10.1038/s41524-021-00559-9>
 23. Andrei Timoshevskii, Sergiy Kotrechko, Yuriy Matviychuk, and Eugene Kolyvoshko, *Handbook of Graphene. Ab Initio Design of 2D and 3D Graphene-Based Nanostructure* (Wiley: 2019), Ch. 6; <https://doi.org/10.1002/9781119468455.ch58>
 24. William G. Hoover and Brad Lee Holian, *Physics Letters A*, **211**, Iss. 5: 253 (1996); [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(95\)00973-6](https://doi.org/10.1016/0375-9601(95)00973-6)
 25. Min Zhou, *Proceedings of the Royal Society of London Series A—Mathematical Physical and Engineering Sciences*, **459**, Iss. 2037: 2347 (2003). <https://doi.org/10.1098/rspa.2003.1127>
 26. S. N. Zhurkov, *Int. J. Fract. Mech.*, **1**: 311 (1965); <https://doi.org/10.1007/BF00962961>
 27. H. Zhao and N. R. Aluru, *Journal of Applied Physics*, **108**: 064321 (2010); <https://doi.org/10.1063/1.3488620>
 28. S. Kotrechko, O. Ovsjannikov, N. Stetsenko, I. Mikhailovskij, T. Mazilova, and M. Starostenkov, *Philosophical Magazine*, **95**, Iss. 6: 473 (2016); <https://doi.org/10.1080/14786435.2016.1140913>
 29. A. Timoshevskii, S. Kotrechko, and Yu. Matviychuk, *Phys. Rev. B*, **91**: 245434 (2015); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.245434>

¹*G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
36, Academician Vernadsky Blvd.,
03142 Kyiv, Ukraine*

²*Taras Shevchenko National University of Kyiv,
60, Volodymyrs'ka Str.,
UA-01601 Kyiv, Ukraine*

³*National Technical University of Ukraine 'Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute',
37, Beresteyskiy Blvd.,
UA-03056 Kyiv, Ukraine*

¹ Fig. 1. CGN; a —geometric dimensions of the sample (atoms acting as grips are marked with large spheres); b —interatomic distances in a 10-atoms' carbyne chain (on the left—MD-data using Ref. [20], on the right—data from Ref. [23]).

² Fig. 2. Dependence of applied force on the strain of CGN with a 10-atoms' chain at a temperature of 600 K and a strain rate of 0.01 m/s.

³ TABLE. Stretching parameters for carbyne chains of various lengths.

⁴ Fig. 3. Sample with reduced near-contact zone (atoms acting as grips are marked with large spheres).

⁵ Fig. 4. Effect of temperature on the strength of the contact bond in CGN for carbyne chains with different numbers of atoms: a —6 atoms, b —10 atoms, c —14 atoms, z —18 atoms.

⁶ Fig. 5. Effect of strain rate on the strength of the contact bond in CGN for carbyne chains with different numbers of atoms: a —6 atoms, b —10 atoms, c —14 atoms, z —18 atoms.

⁷ Fig. 6. Diagram of deformation of the contact bond with linear approximation; the stiffness of the contact bond is defined as the tangent of the angle of the secant approximation, $k = 32.9$ nN/Å (the elastic modulus corresponding to this secant is $K = 1.44$ TPa, according to formula (10)).

⁸ Fig. 7. Effect of the number of atoms, N , in the carbyne chain on strength at strain rates: a —0.01 m/s, b —1 m/s.

⁹ Fig. 8. Dependence of Zhurkov–Bailey model parameters on temperature and the number of atoms, N , in the chain: a —activation volume, b —bond energy.