

<https://doi.org/10.52676/1729-7885-2025-4-41-46>

УДК 538.94

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ И ДЕФЕКТОВ НА ЭЛАСТИЧНОСТЬ ДЕФОРМИРОВАННОГО ПРИ РАСТЯЖЕНИИ АЛМАЗА

Т. М. Инербаев, А. У. Абуова, Ф. У. Абуова*, Г. А. Қантагай,
Н. Мерәлі, Ж. К. Зәкиева, Б. М. Сатанова, А. Раскалиев

Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

* E-mail для контактов: abuova_fu@enu.kz

В данной работе в рамках классической молекулярной динамики исследована диаграмма деформирования алмаза при растяжении, ориентированном в направлении [111], в области температур от 1 до 1700 К. Рассмотрены идеальная структура алмаза, а также структура, содержащая относительно высокую концентрацию дефектов. Для изучения эластичности получаемых при различной температуре при растяжении структур проведено анизотропное моделирование при атмосферном давлении и рассчитаны величины деформации и плотности структуры во времени. Показана эластичность обеих структур в широком диапазоне величин деформации, характерных для каждого значения температуры. Также показана возможность достижения алмазом пластического состояния в узкой области величины растяжения перед полным разрушением в области высоких температур. При температуре ≤ 500 К алмаз сохраняет чисто упругое поведение вплоть до разрушения. При температурах выше 700 К вблизи предела прочности наблюдаются признаки локальной пластической деформации в виде плавного изгиба криевой напряжение-деформация. При $T \geq 1600$ К идеальная структура разрушается уже на этапе эквилибрирования, что является признаком начала графитизации. Наличие точечного дефекта снижает прочность и предельные деформации, и структура разрушается при более низких напряжениях при $T \geq 1300$ К.

Ключевые слова: алмаз, алмазные пленки, молекулярная динамика, деформация, эластичность.

ВВЕДЕНИЕ

Алмаз и алмазные пленки применяются в медицине, инструментах механической обработки, микроэлектронике и квантовых компьютерах благодаря исключительной твёрдости, теплопроводности и химической стойкости. Однако высокая стоимость добычи и синтеза алмаза, а также производства пленок и напыления требует разработки новых методов их получения. Для этого требуются знания прочности алмазов и предела текучести [1, 2]. Исключительный предел текучести алмаза возникает из-за высокой плотности сильных атомных связей и строго направленной природы этих связей. Экспериментальные данные о пределе текучести алмаза практически отсутствуют ввиду трудности его деформирования и возникающей в отсутствии кислорода при температуре выше 3550–3700 °C графитизации [3], в то время как оценочная температура плавления алмаза [4] составляет 3300 К. Эксперимент по индентированию [5] показал, что графитизация алмаза происходит при давлении ниже 100 ГПа [1, 2].

Экспериментальное исследование перехода алмаза к пластической деформации посредством сжатия показало, что дифференциальный предел текучести алмазного порошка снижается с 16 ГПа до 4 ГПа при повышении температуры от 1100 до 1550 °C [6]. Эксперимент по сдавливанию алмаза на алмазной подложке (anvil) при комнатной температуре и ниже показал, что предел текучести алмаза [7] составляет 130–140 ГПа. Более поздние исследования показали, что предел текучести при комнатной температуре в зависимости от типа давления [8] составляет 210 ГПа

по оценке авторов работы [9]. Согласно предположению авторов [9], предел текучести составляет 144–168 ГПа, авторы работы [10] в эксперименте по получению аморфного углерода из алмаза оценили это значение в 55 ГПа [3–5].

При помощи методов *ab initio* было показано, что при нагрузке 90–100 ГПа при растяжении или сдвиге алмаз становится нестабильным и пластичным [11, 12]. Другие оценки ожидаемого давления пластической деформации составили ~45–48 ГПа в зависимости от способа сдавливания, а расчёты показали [13], что пластические вмятины могут быть заметны при ~70 ГПа и до предельного давления в ~85 ГПа при пределе текучести в 35 ГПа [6–8].

Для более масштабных теоретических исследований, способных в той или иной мере учесть наличие дефектов трансляционной симметрии алмаза, используется метод молекулярной динамики, позволяющий исследовать как свойства нанокристаллического алмаза [14], пентаалмаза [15], так и двойных систем [16]. Так авторы работы [17] показали отсутствие пластической деформации нанокристаллического алмаза [9–10]. Однако эластичность алмаза при растяжении в широком диапазоне температур при различном количестве дислокаций в нём практически не исследовалась [11–13].

Целью данной работы является изучение эластичности алмаза. Для этого проведено молекулярно-динамическое исследование диаграммы деформирования идеальной и обладающей дефектом структур алмаза в широкой области температур, а также моделирование при атмосферном давлении анизотропной

релаксации деформированных структур [14–16]. Научная новизна работы состоит в том, что впервые проведено систематическое исследование эластичности идеального и дефектного алмаза при одноосном растяжении вдоль направления [111] в широком диапазоне температур (1–1700 К) с использованием анизотропной релаксации в рамках молекулярной динамики. Показано, что при температурах выше 700 К вблизи предела прочности проявляются признаки локальной пластической деформации, а наличие точечного дефекта существенно снижает механическую стабильность и диапазон упругого поведения. Полученные результаты расширяют понимание механических свойств алмаза в экстремальных условиях и могут быть использованы при разработке алмазных покрытий и наноустройств, работающих при высоких температурах и нагрузках.

ДЕТАЛИ ВЫЧИСЛЕНИЙ. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Для моделирования структуры алмаза и его свойств был использован программный пакет LAMMPS[18] (версия 04Feb2025) [17]. Структура идеальной кристаллической решётки алмаза, ось z в которой ориентирована вдоль кристаллографического направления [111], была создана при помощи программы Atomsk [19] и состояла из 1296 атомов, а размер модели составил $15,113 \times 26,21 \times 15,54 \text{ \AA}$. Из геометрического [18] центра этой структуры был удалён 1 атом углерода (точечный дефект, вакансия решётки), в результате чего была дополнительно создана ячейка с концентрацией дефектов $1,62 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$.

Для описания атомов углерода была выбрана модель AIREBO-M (AIREBO-Morse) [19–20], показавшая высокую точность при высоких давлениях благодаря замене взаимодействия Леннард-Джонса на нерасходящийся потенциал Морзе, а также при сравнении различных молекулярно-динамических моделей с методом DFT [21]. Модель была модифицирована: аддитивный параметр отсечки потенциала [21–22] был установлен на $2,0 \text{ \AA}$ (вместо оригинального $1,7 \text{ \AA}$) во избежание нефизического высокого напряжения растяжения [22–25].

Моделирование проводилось в 3 этапа:

1) Для каждого значения температуры проводилось предварительное эквилибрирование структуры в изотропном NPT-ансамбле в течение 250 пс.

2) Растяжение моделей проводилось вдоль оси z , контроль давления (компонентов тензора напряжений, движущих сил) по которой проводился независимо от осей x и y в частично анизотропном ансамбле NPT для более корректного описания изменения плотности алмаза [23–24].

3) Изучение эластичности проводилось в анизотропном NPT-ансамбле при атмосферном давлении [25–27].

Шаг интегрирования на всех этапах составил $0,1 \text{ фс}$, скорость деформирования составила $4 \cdot 10^{-6} \text{ фс}^{-1}$. Внешнее давление составляло 1 бар. Структуры были исследованы в области температур от 1 К до 2000 К. Периодические граничные условия были применены. Для определения величины нагрузки σ вдоль оси z была рассчитана P_{zz} компонента тензора напряжения структуры. Величина деформации ε определялась как соотношение размера системы по оси z к стартовому размеру [28].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рисунке 1 представлена диаграмма ориентированного по направлению [111] по оси z деформирования алмаза при растяжении. При температуре 1600 К и выше в рамках данной модели бездефектная структура алмаза разрушается на этапе эквилибрирования, что может указывать на начало процесса графитизации алмаза. Полученные результаты качественно и достаточно точно количественно совпадают с результатами моделирования из первых принципов [12, 26–28]: в отсутствии теплового движения атомов углерода критическое значение $\varepsilon = 1,12–1,13$ ($\sigma \approx 90 \text{ ГПа}$). В данной работе аналогичные значение для температуры 1 К составили $\varepsilon = 1,15$ и $\sigma = 98 \text{ ГПа}$. Дальнейшее растяжение не приводит к росту необходимой нагрузки вплоть до полного разрушения ($\varepsilon = 1,17$). Аналогичная область ε от 1,15 до 1,17 (при температуре 1 К) область величины деформации наблюдалась в работах [26, 27] при $\varepsilon = 1,13–1,15$, где также не наблюдался рост необходимого давления для дальнейшего растяжения.

Характер полученных кривых ε - σ отличается от нанокристаллического [17], где наклон вплоть до разрушения практически не изменялся и пластические деформации не наблюдались. Здесь же пластические деформации (сохранение связей с искажением кристаллической решётки) наблюдались вблизи точек разрушения кристалла при температурах от 700 К и выше, о чём также свидетельствует плавный перегиб линий ε - σ перед разрушением. Это качественно согласуется с предположением, что текучесть алмаза должна наблюдаться при высокой температуре.

Для оценки эластичности структуры была проведена анизотропная релаксация структур на различных этапах растяжения. На рисунке 2 приведены времена релаксации линейного размера и плотности растянутой структуры идеального алмаза при атмосферном давлении и различной температуре. Разброс значений плотности кристалла по окончании процесса релаксации (ярко выражено для $\varepsilon = 1,05$) вызван тепловым расширением алмаза. Видно, что в рассматриваемой области температур для структур при $\varepsilon = 1,05$ при снятии растягивающего напряжения структуры возвращаются в исходное состояние, что указывает на эластичность структуры до давления в $\sim 55 \text{ ГПа}$ в выбранной области температур.

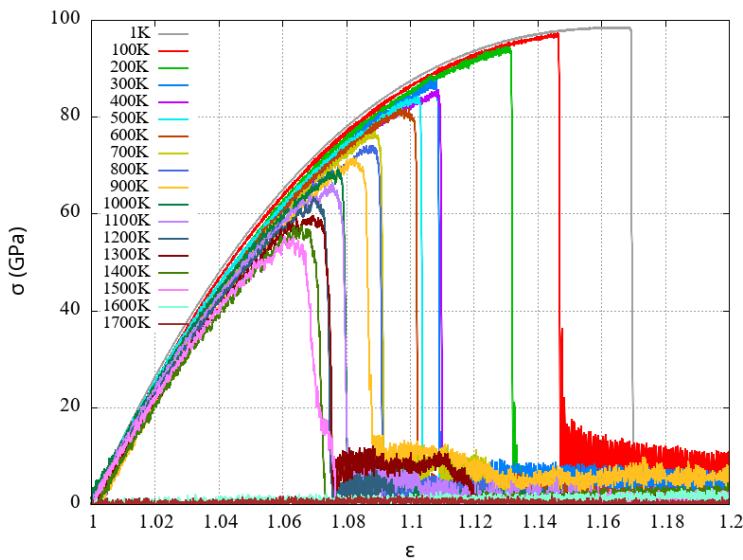


Рисунок. 1. Диаграмма деформирования идеальной структуры алмаза при растяжении в направлении [111] в области температур от 1 до 1700 К

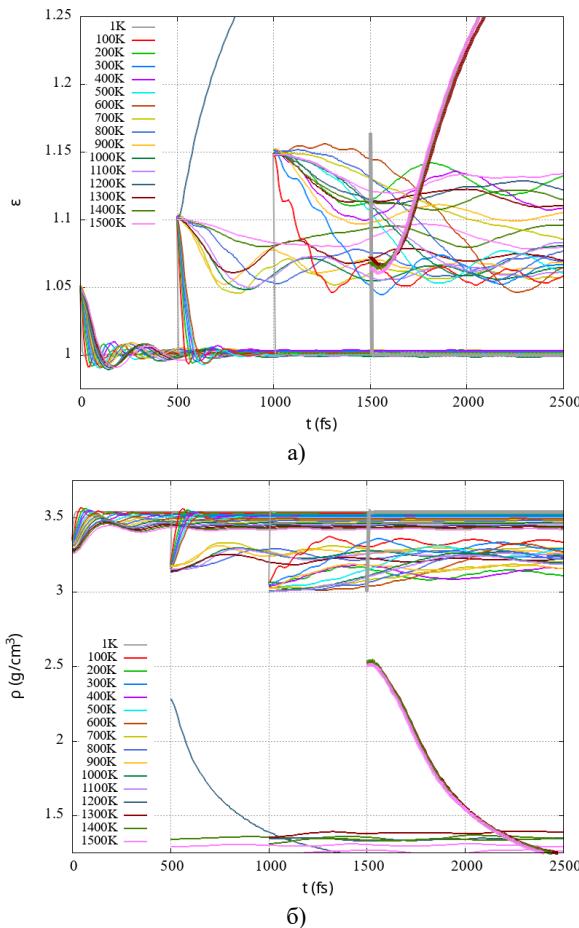


Рисунок 2. Зависимости линейной деформации (а) и соответствующей плотности алмаза (б) от времени при релаксации идеальной структуры, растянутой в направлении [111] на величины $\epsilon = 1,05, 1,10, 1,15$ в области температур от 1 до 1500 К, а также толстыми линиями для $\epsilon \approx 1,162$ и $1,167$ при 1 К и $\epsilon \approx 1,072, 1,068$ и $1,062$ при 1300, 1400 и 1500 К, соответственно.

Линии представлены со сдвигом 500 фс.

При достижении $\epsilon = 1,10$ ($\sigma \leq 86$ ГПа) эластические свойства структура проявляет только при температуре 600 К и ниже. При более высоких температурах вплоть до 1100 К включительно кристаллическая структура алмаза является полностью или частично разрушенной, однако её плотность в начальный момент релаксации равна плотности растянутой кристаллической фазы ($T \leq 600$ К) и остаётся близкой алмазной в дальнейшем, что может свидетельствовать о вызванной вследствие накопления дефектов локальной пластичности структуры ввиду имеющих место флуктуаций плотности. Это качественно согласуется с результатами экспериментальной работы [7], в которой текучесть алмаза наблюдалась при снятии давления на структуру. Однако более детальная характеристика деформации структуры алмаза после снятия напряжения требует отдельного исследования. При температуре от 1200 К и выше плотность структуры составляет 1,3–1,4 г/см³, что в несколько раз ниже плотности алмаза. Состояние структуры при 1300 К является статистическим исключением.

При достижении $\epsilon = 1,15$ ($\sigma \leq 97$ ГПа) эластическое поведение наблюдается только при температуре 1 К, а флуктуации плотности при температурах становятся выше, что указывает на повышение нестабильности структур. Эластичность наблюдается также при температуре 1 К в упомянутой ранее области ϵ от 1,15 до 1,17, где наклон кривой ϵ - σ близок и ниже нуля.

На рисунке 3 показана диаграмма деформирования неидеального кристалла при растяжении вдоль направления [111]. Ожидаемо, полное разрушение структур происходит при более низких значениях ϵ и σ , чем для идеального кристалла. Наличие дефекта приводит к раннему разрушению структуры уже при температуре 1300 К и выше.

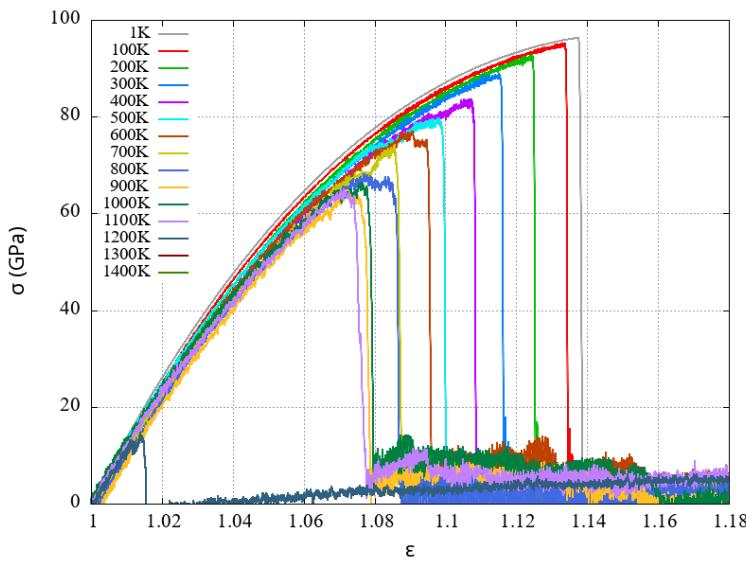


Рисунок 3. Диаграмма деформирования обладающей точечным дефектом структуры алмаза при растяжении в направлении [111] в области температур от 1 до 1400 К.

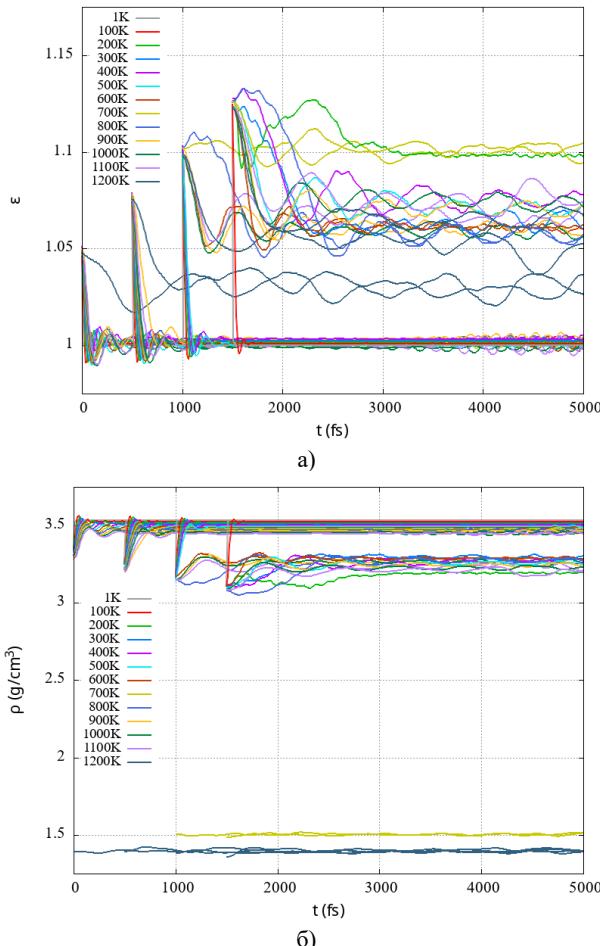


Рисунок 4. Зависимости линейной деформации (а) и соответствующей плотности алмаза (б) от времени при релаксации обладающей дефектом структуры, растянутой в направлении [111] на величины $\varepsilon = 1,050, 1,075, 1,100$ и $1,125$ со сдвигом 500 фс в области температур от 1 до 1200 К

Разрушение структуры неидеального алмаза начинается с локальной деформации структуры вблизи точечного дефекта. В остальном наличие одного точечного дефекта, который в итоге приводит к очень высокой их концентрации, к качественным изменениям характера кривой ε - σ не приводит.

Как и для идеального случая, локальная пластическая деформация наблюдается при относительно высокой температуре в узкой области величины деформации вблизи точки разрушения (разлома). Аналогично, при температуре 500 К и ниже наблюдается только эластическое поведение решётки вплоть до разрушения.

На рисунке 4 приведены времена релаксации линейного размера и плотности растянутой структуры алмаза с дефектом при атмосферном давлении и различной температуре. При $\varepsilon = 1,050$ и $1,075$ наблюдается эластическое поведение решётки при температурах до 1100 К включительно. Состояние структуры при 700 К является статистическим исключением.

Важно отметить, что на более длительных временах релаксации при температуре 1100 К и начальном $\varepsilon = 1,100$ наблюдается спонтанное расширение структуры по трём направлениям и падение плотности до $1,26$ – $1,27$ г/см³.

Обобщая результаты, можно предположить, что пластичность алмаза предположительно может быть выявлена при относительно высокой температуре для идеального и неидеального кристаллов при давлении ~ 50 ГПа и выше.

ВЫВОДЫ

Исследование эластичности структуры алмаза при растяжении в направлении [111] методом классической молекулярной динамики в рамках модели AIREBO-M показало, что при температуре 500 К и ниже как идеальный, так и обладающий дефектом алмаз проявляют эластические свойства вплоть до раз-

рушения. При более высокой температуре вблизи границы разрушения наблюдается пластическая деформация кристаллической решётки.

Наличие точечного дефекта приводит к снижению максимальной нагрузки, при которой структура способна проявлять эластические свойства, а также предельных нагрузок, которые способна выдержать структура, не разрушаясь. Также наличие дефекта снижает стабильность структуры при температуре выше 1000 К. А именно, дефектная структура разрушается при более низких напряжениях и температурах (уже при $T \geq 1300$ К). Эластичность сохраняется до $\varepsilon \approx 1,075$ при $T \leq 1100$ К, но при $\varepsilon = 1,100$ и $T = 1100$ К наблюдается спонтанное расширение и падение плотности, что является признаком потери стабильности.

Финансирование

Работа выполнена в рамках проекта МОН РК АР23484367 «Исследование предела текучести алмаза для развития технологии производства крупных кристаллов».

ЛИТЕРАТУРА / REFERENCES

1. Sundqvist, B. Carbon under pressure // Physics Reports. – 2021. – Vol. 909. – P. 1–73.
2. Field, J. E. The mechanical and strength properties of diamond // Reports on Progress in Physics. – 2012. – Vol. 75(12). – 126505.
3. Evans, T., & James, P. F. A study of the transformation of diamond to graphite // Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences. – 1964. – Vol. 277(1369). – P. 260–269.
4. Wilks, J., & Wilks, E. Properties and applications of diamond. Butterworth-Heinemann, Oxford, 1991, P. 214–227.
5. Gogotsi, Y. G., Kailer, A., & Nickel, K. G. Transformation of diamond to graphite // Nature. – 1999. – Vol. 401(6754). – P. 663–664.
6. Weidner, D. J., Wang, Y., & Vaughan, M. T. Strength of diamond // Science. – 1994. – Vol. 266(5184). – P. 419–422.
7. Eremets, M. I., Trojan, I. A., Gwaze, P., Huth, J., Boehler, R., & Blank, V. D. The strength of diamond // Applied Physics Letters. – 2005. – Vol. 87(14).
8. Lin, Y., Zhang, L., Mao, H. K., Chow, P., Xiao, Y., Baldini, M., Shu, J., & Mao, W. L. Amorphous diamond: a high-pressure superhard carbon allotrope // Physical Review Letters. – 2011. – Vol. 107(17). – 175504.
9. Solopova, N. A., Dubrovinskaia, N., & Dubrovinsky, L. Raman spectroscopy of glassy carbon up to 60 GPa // Applied Physics Letters. – 2013. – Vol. 102(12).
10. Yao, M., Fan, X., Zhang, W., Bao, Y., Liu, R., Sundqvist, B., & Liu, B. Uniaxial-stress-driven transformation in cold compressed glassy carbon // Applied Physics Letters. – 2017. – Vol. 111(10).
11. Chacham, H., & Kleinman, L. Instabilities in diamond under high shear stress // Physical Review Letters. – 2000. – Vol. 85(23). – 4904.
12. Telling, R. H., Pickard, C. J., Payne, M. C., & Field, J. E. Theoretical strength and cleavage of diamond // Physical Review Letters. – 2000. – Vol. 84(22). – 5160.
13. Ruoff, A. L. On the yield strength of diamond // Journal of Applied Physics. – 1979. – Vol. 50(5). – P. 3354–3356.
14. Vidal, G. G., Gonzalez, R. I., Valencia, F. J., Amigo, N., Tramontina, D., & Bringa, E. M. Simulations of plasticity in diamond nanoparticles showing ultrahigh strength // Diamond and Related Materials. – 2022. – Vol. 126. – 109109.
15. Felix, L. C., Tromer, R. M., Woellner, C. F., Tiwary, C. S., & Galvao, D. S. Mechanical response of pentiamond: A DFT and molecular dynamics study // Physica B: Condensed Matter. – 2022. – Vol. 629. – 413576.
16. Zhou, J., Li, Y., Lu, C., Li, H., Zheng, W., Ma, Y., Gao, Z., Yang, J., & He, Y. Molecular dynamics simulation of the tensile response and deformation mechanism of diamond/TiC combinations // Computational Materials Science. – 2022. – Vol. 215. – 111779.
17. Huang, C., Peng, X., Yang, B., Chen, X., Li, Q., Yin, D., & Fu, T. Effects of strain rate and annealing temperature on tensile properties of nanocrystalline diamond // Carbon. – 2018. – Vol. 136. – P. 320–328.
18. Thompson, A. P., Aktulga, H. M., Berger, R., Bolintineanu, D. S., Brown, W. M., Crozier, P. S., Veld, P. J., Kohlmeyer, A., Moore, S. G., Nguyen, T. D., Shan, R., Stevens, M. J., Tranchida, J., Trott, C., & Plimpton, S. J. LAMMPS-a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // Computer Physics Communications. – 2022. – Vol. 271. – 108171.
19. Hirel, P. Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files // Computer Physics Communications. – 2015. – Vol. 197. – P. 212–219.
20. O'connor, T. C., Andzelm, J., & Robbins, M. O. AIREBO-M: A reactive model for hydrocarbons at extreme pressures // The Journal of Chemical Physics. – 2015. – Vol 142(2).
21. Rozhkov, M. A., Kolesnikova, A., & Romanov, A. Comparison of Interatomic Potentials for Modeling Defects in Graphene Using Molecular Dynamics // Rev. Adv. Mater. Technol. – 2024. – Vol. 6. – P. 35–42.
22. Shenderova, O. A., Brenner, D. W., Omelchenko, A., Su, X., & Yang, L. H. Atomistic modeling of the fracture of polycrystalline diamond // Physical Review B. – 2000. – Vol. 61(6). – 3877.
23. Zhan, H., Zhang, G., Tan, V. B., Cheng, Y., Bell, J. M., Zhang, Y. W., & Gu, Y. From brittle to ductile: a structure dependent ductility of diamond nanowire // Nanoscale. – 2016. – Vol. 8(21). – P. 11177–11184.
24. Baimova, J. A., Rysaeva, L. K., & Rudskoy, A. I. Deformation behavior of diamond-like phases: Molecular dynamics simulation // Diamond and Related Materials. – 2018. – Vol. 81. – P. 154–160.
25. Peng, Q., Chen, G., Huang, Z., Chen, X., Li, A., Cai, X., Zhang, Y., Chen, X. J., & Hu, Z. Molecular Dynamics Insights into Mechanical Stability, Elastic Properties, and Fracture Behavior of PHOT-Graphene // Materials. – 2024. – Vol. 17(19). – 4740.
26. Roundy, D., & Cohen, M. L. Ideal strength of diamond, Si, and Ge // Physical Review B. – 2001. – Vol. 64(21). – 212103.
27. Luo, X., Liu, Z., Xu, B., Yu, D., Tian, Y., Wang, H. T., & He, J. Compressive strength of diamond from first-principles calculation // The Journal of Physical Chemistry C. – 2010. – Vol. 114(41). – P. 17851–17853.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ И ДЕФЕКТОВ НА ЭЛАСТИЧНОСТЬ ДЕФОРМИРОВАННОГО ПРИ РАСТЯЖЕНИИ АЛМАЗА

28. Jensen, B. D., Wise, K. E., & Odegard, G. M. Simulation of the elastic and ultimate tensile properties of diamond, graphene, carbon nanotubes, and amorphous carbon using a revised ReaxFF parametrization // The Journal of Physical Chemistry A. – 2015. – Vol. 119(37). – P. 9710–9721.

ТЕМПЕРАТУРА МЕН АҚАУЛАРДЫҢ СОЗЫЛУ КЕЗІНДЕ ДЕФОРМАЦИЯЛАНГАН ГАУҢАРДЫҢ СЕРПІМДІЛІГІНЕ ӘСЕРІН ТЕОРИЯЛЫҚ ЗЕРТТЕУ

**Т. М. Инербаев, А. У. Абуова, Ф. У. Абуова*, Г. А. Қаптағай,
Н. Мерәлі, Ж. К. Зәкиева, Б. М. Сатанова, А. Раскалиев**

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

* Байланыс үшін E-mail: abuova_fu@enu.kz

Бұл жұмыста классикалық молекулалық динамика шеңберінде 1-ден 1700 К-ге дейінгі температура аймағында [111] бағытқа бағытталған созылу кезінде алмаздың деформация диаграммасы зерттелді, Гауңардың идеалды құрылымы, сондай-ақ ақаулардың салыстырмалы түрде жоғары концентрациясын ұстайтын құрылым қарастырылды. Құрылымдардың созылуы кезінде әртүрлі температурада алынған икемділікті зерттеу үшін атмосфералық қысымда анизотропты модельдеу жүргізілді және деформация мен құрылымның уақыт бойынша тығыздығы есептелді. Температураның әр мәніне тән деформация шамаларының кең ауқымында екі құрылымның икемділігі көрсетілген. Сондай-ақ, алмаздың жоғары температура аймағында толық жойылғанға дейін созылу шамасының тар аймағында пластикалық күйге жету мүмкіндігі көрсетілген.

Түйін сөздер: алмаз, алмаз пленкалары, молекулалық динамика, деформация, серпімділік.

THEORETICAL STUDY OF THE EFFECT OF TEMPERATURE AND DEFECTS ON THE ELASTICITY OF A DIAMOND DEFORMED BY STRETCHING

**Т. М. Инербаев, А. У. Абуова, Ф. У. Абуова*, Г. А. Қаптағай,
Н. Мерәлі, Ж. К. Зәкиева, Б. М. Сатанова, А. Раскалиев**

L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

* E-mail for contacts: abuova_fu@enu.kz

In this work, the diagram of diamond deformation under tension oriented in the direction [111] in the temperature range from 1 to 1700 K is studied in the framework of classical molecular dynamics. The ideal diamond structure is considered, as well as a structure containing a relatively high concentration of defects. To study the elasticity of structures obtained at different temperatures during stretching, anisotropic modeling was performed at atmospheric pressure and the values of deformation and density of the structure over time were calculated. The elasticity of both structures is shown in a wide range of strain values characteristic of each temperature value. It is also shown that a diamond can achieve a plastic state in a narrow range of tensile strength before complete destruction at high temperatures.

Keywords: diamond, diamond films, molecular dynamics, deformation, elasticity.