

РЕФЕРАТ

Дипломна робота: 75 сторінок, 15 рисунків, 5 таблиць, 38 літературних джерел.

МОДЕЛЮВАННЯ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК, ДЕФЕКТ СТОУНА-УЕЛЬСА, ВИМІРЮВАННЯ МОДУЛЯ ЮНГА.

Завдяки своїм унікальним властивостям вуглецеві нанотрубки (ВНТ) привертають пильну увагу дослідників в найрізноманітніших галузях наукових досліджень і практичних розробок. Наприклад, це застосування нанотрубок в якості дуже міцних мікроскопічних стержнів і ниток. Як показують результати експериментів, модуль Юнга одношарової нанотрубки досягає величин порядку $1 \text{ ТПА} \div 5 \text{ ТПА}$, що на порядок більше, ніж у сталі.

Розроблено вже і кілька застосувань нанотрубок в комп'ютерній індустрії. Наприклад, створені та випробувані прототипи тонких плоских дисплеїв працюють на матриці з нанотрубок. Але на механічні властивості нанотрубок суттєвий вплив мають дефекти структури, які формуються в процесі їх виробництва.

Саме для вивчення фізичних властивостей нанотрубок різної структури, знаходження нових галузей застосування ВНТ та тестування при заданих умовах і необхідне комп'ютерне моделювання.

Метою роботи є дослідження особливостей впливу структурних дефектів на механічні властивості вуглецевих нанотрубок засобами комп'ютерного моделювання.

Відповідно до мети роботи поставлено наступні задачі дослідження:

- 1) Опрацювати літературу, ознайомитися із методами комп'ютерного моделювання наноструктур та підготувати огляд сучасних літературних джерел;
- 2) Освоїти сучасні математичні та комп'ютерні методи і набути навичок, щоб використовувати програмне забезпечення ATK-VNL QuantumWise.

- 3) Змодельовати наноструктури з дефектами .
- 4) Дослідити механічні властивості отриманих моделей;
- 5) Проаналізувати отримані результати і сформулювати висновки.

В якості середовища моделювання було обрано програмний пакет QuantumWise Atomistix ToolKit оскільки він має такі переваги, як візуалізація отриманих даних, сумісність з іншими програмними забезпеченнями для подальших досліджень матеріалів, наявна власна база емпіричних потенціалів, можливість визначати функціональність отриманих елементів та відобразити отримані результати в двомірному середовищі, безкоштовна академічна ліцензія.

Було проведено комп'ютерне моделювання ВНТ з бездефектною структурою та з дефектом Стоуна — Уельса .

Отримано залежність механічних властивостей від наявності дефекту.

Таким чином отриманий результат - модуль Юнга вуглецевою нанотрубки з дефектом Стоуна-Веллса та бездефектної нанотрубки доводить те, що дефекти зміцнюють вуглецеві нанотрубки. На базі проведенного моделювання можна проводити більш складні обрахунки для декількох дефектів, або ж дефектів іншого типу. Запропоновані моделі можуть бути використані для дослідження руйнування нанотрубок в різних ситуаціях.