

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ ОДНОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК НА ОСНОВЕ СТЕРЖНЕВОЙ МОДЕЛИ

Тимошенко В.Ю, студентка; СумГУ, гр. ИН-12

В настоящее время все большее развитие получают нанотехнологии, целью которых является создание материалов с наноструктурой или материалов, наполненных наномасштабными частицами. Их преимущество заключается в уникальном сочетании легкости и высоких значений механических характеристик (деформирования, прочности и сопротивления разрушению). На сегодняшний день наноструктуры, в частности углеродные нанотрубки, остаются малоизученными, но очень перспективными в плане применения. Одним из наиболее эффективных и наименее затратных способов исследования наноструктур является компьютерное моделирование их механических свойств.

Так, в данной работе была поставлена задача построения математической модели деформирования и разрушения однослойных углеродных нанотрубок и последующая компьютерная реализация данной модели средствами объектно-ориентированного программирования. Математическая модель строилась на основе стержневой модели, согласно дискретно-континуальному подходу, который был предложен и изложен в ряде работ Гольдштейном Р.В. и Ченцовым А.В. При построении модели метод расчета граничных значений деформации был усовершенствован тем, что во внимание принималась толщина стенки нанотрубки, а также то, что она может иметь не только общепринятое значение 0,34 нм, а и другие значения, о чем свидетельствует ряд публикаций. Компьютерная реализация математической модели позволила установить закономерности и определить характеристики деформирования однослойных нанотрубок различных конфигураций (armchair и zigzag) и различных диаметров. Полученные графики позволяют более точно и наглядно исследовать динамику потери устойчивости трубки, а также влияние структурных параметров на механические свойства трубки.

Разработанная программа может быть использована как вспомогательное средство при исследовании или применении углеродных нанотрубок.

Руководитель: Емельяненко В.В.