

КОМПЬЮТЕРНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ДЕФОРМАЦИИ ОДНОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Борщенко П.А., *студент*; Емельяненко В.В., *аспирант*

Применение углеродных нанотрубок (УНТ) при разработке новых материалов и элементов устройств позволит произвести революцию в научном мире. Сочетание линейных размеров, удельного веса и прочности этих структур [1] является уникальным на сегодняшний день. Поэтому исследование деформационных свойств УНТ [1, 2] имеет огромное значение, в частности при оценке их эксплуатационных характеристик. Мощным инструментом для этого выступает математическое моделирование [1, 3].

Цель данной работы заключалась в разработке и компьютерной реализации математической модели деформированной однослойной УНТ и применении ее для исследования процесса упругой деформации при внешнем воздействии.

В качестве платформы для разработки приложения был выбран язык программирования Java, как наиболее простой в применении, с независимой платформой, масштабируемый. Кроме этого, в свободном доступе для него существует много библиотек и модулей расширения, которые позволяют решить поставленную задачу.

С использованием разработанного компьютерного приложения было промоделировано поведение УНТ с хиральностями от (2,2) до (30,30) при упругой деформации от 0,1 до 10%. Были установлены изменения структурных параметров нанотрубки – радиуса и межатомных углов при воздействии внешней силы. Результаты расчетов были применены для разработки приложения визуализации процесса деформации с использованием библиотеки OpenGL.

Руководитель: Проценко Е.Б., *доцент*

1. Е.Б. Проценко, В.В. Емельяненко, А.Д. Карпеченко, Складні системи і процеси **1**, 6 (2010).
2. T. Natsuki, K. Tantrakarn, M. Endo, Appl. Phys. A **79**, 117 (2004).
3. J.R Xia, B.A. Gama, J.W. Gillespie Jr., Int. J. Solids Struct. **42**, 3075 (2005).