

ДОСЛІДЖЕННЯ МОДУЛЯ ЮНГА БАГАТОШАРОВИХ ВУГЛЕЦЕВИХ НАНОТРУБОК

Смельяненко В.В., *аспірант*; Проценко О.Б., *доцент*

Завдяки своїм унікальним властивостям [1, 2] вуглецеві нанотрубки (ВНТ) можуть знайти застосування у ряді галузей науки та техніки. На сьогодні продовжується процес вивчення цих структур, тому актуальним є їх дослідження та пошук нових методів для цього. Потужним інструментом поряд із експериментальними дослідженнями виступає теоретичне моделювання механічних властивостей ВНТ шляхом побудови математичних моделей [3].

В даній роботі була поставлена задача дослідження механічних властивостей ВНТ і, зокрема, модуля Юнга багатошарових трубок з різною кількістю шарів та діаметром. Існує декілька підходів до цієї проблеми, наприклад, застосовуються методи молекулярної механіки та динаміки, які описані в роботах [1, 2]. Перший з них базується на механіці суцільного середовища та теорії пружності, він дозволяє з задовільною точністю моделювати фізичні процеси в наноструктурах під дією деформуючих сил, тому він був обраний для аналізу даної проблеми.

В результаті роботи була побудована і реалізована у вигляді програми математична модель, отримана на основі законів класичної та молекулярної механіки. Це дозволило розраховувати значення основної характеристики пружності ВНТ – модуля Юнга – за заданими структурними параметрами (діаметром та кількістю шарів), виявити та дослідити залежність між ними.

Отже, з використанням розробленої програми були розглянуті багатошарові ВНТ діаметром від 5 до 50 нм та кількістю шарів у діапазоні від 2 до 30. Встановлено, що модуль Юнга не залежить від діаметра, але при цьому чутливий до кількості шарів у випадках, коли їх не більше 8.

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