

Секція:

Математичне моделювання і механіка

УДК 538.951

Білоус Д. - ст. гр. ПМ-41, Соловйов С. - ст. гр. ПМ-41

Сумський державний університет

МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ ОДНОШАРОВИХ НАНОТУБУЛЕНОВ ЗА ДОПОМОГОЮ ПАРАМЕТРИЧНОЇ КРИВОЇ

Науковий керівник к.ф.-м. наук, доцент Білоус О.А.

Bilous D., Solovyov S.

Sumy State University

MODELING OF THE STRUCTURE OF SINGLE-WALLED NANOTUBES BASED ON A PARAMETRIC CURVE

Supervisor: Ph.D., Bilous O.A.

Ключові слова: нанотрубки, хіральність структури

Keywords: nanotube, chirality structure

Нанотубулені відносяться до класу нових матеріалів, що мають унікальні електричні, оптичні та механічні властивості. Широкий спектр можливостей застосування дозволяє розглядати такі структури як найбільш перспективні об'єкти наноелектроніки.

Відомо [1], що в залежності від структури одношарових нанотрубок вони мають як металеві так і напівпровідникові властивості. Якісний опис структури елементів нанооб'єкту з врахуванням необхідних параметрів – важлива задача розрахунку, моделювання та прогнозування їх фізико-технічних характеристик.

Як правило, одношарові нанотрубки описуються у якості площини на якій викладені правильні шестикутники з атомами матеріалу у вершинах яка згортається у циліндричну поверхню різними способами в залежності від кута між напрямком сторін шестикутників та віссю нанотрубки. Аналітично, хіральність об'єкта описується або за допомогою відповідних індексів зсуву (m,n) , що є координатами відповідного шестикутника для суміщення, або кута між напрямками згортання площини та спільною стороною сусідніх шестикутників. Але, дана форма опису структури є достатньо складною для розробки математичних моделей та обчислення параметрів, що характеризують властивості нанотубуленів із застосуванням ІТ-технологій.

В роботі пропонується опис структури хіральних одношарових нанотрубок за допомогою рівняння гвинтової лінії у просторі, що намотана на циліндр з діаметром нанотрубки D . Координати центрів шестикутників належать кривій, і розташовані на однаковій відстані один від одного. Коефіцієнти a і b у стандартному параметричному рівнянні лінії враховують хіральність структури. Подальша орієнтація вузлів шестикутників прив'язана до центра кожного з них.

1. И.В. Сысоев, Н.С. Переславцева, О.И. Дубровский. Электронная структура одностенных углеродных нанотрубок типа зигзаг // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2014.– Т.16, № 3.– С. 318-322.