

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ІНФОРМАТИКА, МАТЕМАТИКА,
АВТОМАТИКА

ІМА :: 2016

**МАТЕРІАЛИ
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 18–22 квітня 2016 року)



Суми
Сумський державний університет
2016

Гвинтова структура одношарових нанотубуленів

Гула О.В., студент; Білоус О.А., доцент
Сумський державний університет, м.Суми

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. Так, 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. Відповідні коефіцієнти у параметричному рівнянні лінії враховують хіральність структури.

1. И.В. Сысоев, Н.С. Переславцева, О.И. Дубровский, *Конденсированные среды и межфазные границы* **16** № 3, 318 (2014).