

**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»**

Інженерно-фізичний факультет

Кафедра фізики металів

«На правах рукопису»
УДК 538.911

«До захисту допущено»

В.о. завідувача кафедри

_____ Є. В. Іващенко

«__» _____ 20__ р.

Магістерська дисертація

на здобуття ступеня магістра

зі спеціальності 132 Матеріалознавство

на тему: «Визначення температурної стійкості та механічних властивостей срібних нанотрубок методом молекулярної динаміки»

Виконав:

студент VI курсу, групи ФМ-61м

Солдатенко Сергій Миколайович _____

Керівник:

К. т. н., доцент

Іващенко Є. В. _____

Науковий консультант:

Д. ф.-м. н., доцент

Філатов О. В. _____

Консультант з охорони праці та безпеки в надзвичайних ситуаціях:

К. т. н., доцент

Зацарний В. В. _____

Консультант з нормоконтролю:

Асистент кафедри ФМ

Шаповалова Н. А. _____

Рецензент:

К. т. н., доцент кафедри МТО

Доній О. М. _____

Засвідчую, що у цій магістерській дисертації немає запозичень з праць інших авторів без відповідних посилань.

Студент _____

Київ – 2018 року

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
Інженерно-фізичний факультет
Кафедра фізики металів

Рівень вищої освіти – другий (магістерський) за освітньо-науковою програмою
Спеціальність (спеціалізація) – 132 «Матеріалознавство» («Фізичне матеріалознавство»)

ЗАТВЕРДЖУЮ

В. о. завідувача кафедри

_____ Є. В. Іващенко

«__» _____ 20__ р.

ЗАВДАННЯ
на магістерську дисертацію студенту
Солдатенку Сергію Миколайовичу

1. Тема дисертації «Визначення температурної стійкості та механічних властивостей срібних нанотрубок методом молекулярної динаміки», науковий керівник дисертації Іващенко Євген Вадимович, к. т. н., доцент, затверджені наказом по університету від «22» 03 2018 р. № 994-с
2. Термін подання студентом дисертації _____
3. Об'єкт дослідження: чистий метал з гранецентрованою кубічною ґраткою.
4. Предмет дослідження: структура срібних нанотрубок.
5. Перелік завдань, які потрібно розробити: 1 – проаналізувати літературні дані досліджень за даною тематикою; 2 – створити тривимірну молекулярно-динамічну модель, яка підходить для дослідження структури срібних нанотрубок; 3 – на основі моделі дослідити структурну стабільність срібних нанотрубок при різних температурах; 4 – розрахувати механічні властивості срібних нанотрубок.
6. Орієнтовний перелік графічного (ілюстративного) матеріалу: слайди презентації – тема роботи (1 слайд), актуальність та мета дослідження (слайди), матеріали та методика (слайди), результати (слайди), висновки (слайд).

7. Орієнтовний перелік публікацій:

- 1) Filatov O. The determination of temperature stability of silver nanotubes by the molecular dynamics simulation / O. Filatov, S. Soldatenko, O. Soldatenko // Applied Nanoscience – 2018. – P. 1–5. <https://doi.org/10.1007/s13204-018-0770-4>.
- 2) Солдатенко С. М. Види срібних нанотрубок та їх температурна стійкість / С. М. Солдатенко, О. В. Філатов // Перспективні технології на основі новітніх фізико-матеріалознавчих досліджень та комп'ютерного конструювання матеріалів: XI міжнародна конференція студентів, аспірантів та молодих вчених. Збірка тез доповідей. – Київ, 2018. – С. 164–166.
- 3) Filatov O. V. The alteration of structure of silver nanotube in the process of heating / O. V. Filatov, S. M. Soldatenko, O. M. Soldatenko // Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2017): International research and practice conference. Abstract book. – Chernivtsi, 2017. – С. 302–303.
- 4) Губіна О. М. Зміна структури срібної нанотрубки в процесі її нагріву / О. М. Губіна, С. М. Солдатенко // Перспективні технології на основі новітніх фізико-матеріалознавчих досліджень та комп'ютерного конструювання матеріалів: X міжнародна конференція студентів, аспірантів та молодих вчених. Збірка тез доповідей. – Київ, 2017. – С. 285–286.
- 5) Солдатенко С. М. Вплив температури на коефіцієнт лінійного термічного розширення срібної нанотрубки / С. М. Солдатенко, О. М. Губіна // Перспективні технології на основі новітніх фізико-матеріалознавчих досліджень та комп'ютерного конструювання матеріалів: X міжнародна конференція студентів, аспірантів та молодих вчених. Збірка тез доповідей. – Київ, 2017. – С. 283–284.

8. Консультанти розділів дисертації

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв
Наукова частина	д. ф.-м. н., доцент Філатов О. В.		
Охорона праці та безпека в надзвичайних ситуаціях	к. т. н., доцент Зацарний В. В.		
Нормоконтроль	ас. Шаповалова Н. А.		

9. Дата видачі завдання _____

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Термін виконання етапів магістерської дисертації	Примітка
1	Видача завдання		
2	Аналіз літературних даних та написання літературного огляду		
3	Визначення методики дослідження		
4	Проведення розрахунків		
5	Аналіз результатів дослідження		
6	Оформлення роботи		
7	Оформлення презентації		
8	Захист на засіданні ЕК		

Студент

С. М. Солдатенко

Науковий керівник дисертації

Є. В. Іващенко

РЕФЕРАТ

Магістерська дисертація: 83 сторінки, 8 таблиць, 19 рисунків, 4 додатки, 69 джерел.

СРІБЛО, НАНОТРУБКА, МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ, КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА

Мета роботи: дослідити структурну стабільність, механічні властивості срібних нанотрубок при різних температурах за допомогою методу молекулярної динаміки.

Об'єкт дослідження: чистий метал з гранецентрованою кубічною граткою.

Предмет дослідження: структура та механічні властивості СНТ.

Методи дослідження: комп'ютерне моделювання методом молекулярної динаміки за допомогою програмного забезпечення XMD, структурні дослідження за допомогою програмного забезпечення VMD.

Наукова новизна одержаних результатів. Вперше досліджено термічну стабільність та механічні властивості структури ГЦК СНТ, що має [110] орієнтацію. Міцність наноструктур сильно залежить від діаметру та геометрії їх поперечного перерізу.

Практичне значення одержаних результатів. Одержані результати і встановлені фізичні закономірності дозволяють прогнозувати поведінку нанотрубок при експлуатації і, залежно від необхідних властивостей, обрати потрібні розмір і структуру нанотрубок.

ABSTRACT

Master`s dissertation: 83 pages, 8 tables, 19 figures, 4 appendixes, 69 references.

SILVER, NANOTUBE, MECHANICAL PROPERTIES, COMPUTER MODELLING, MOLECULAR DYNAMICS

Aim: to investigate the structural stability and mechanical properties of silver nanotubes at different temperatures by the molecular dynamics method.

Research object: pure metal with a face centered cubic lattice.

Research subject: the structure and mechanical properties of silver nanotubes.

Research methods: a computer simulation by the molecular dynamics method using XMD software, structural research using VMD software.

Scientific novelty of obtained results. There was at first investigated temperature stability and mechanical properties of face centered structure of silver nanotube with orientation [110].

Practical meaning of obtained results. Obtained results and established physical regularities allow to predict the behavior of nanotubes during exploitation and to choose the desired size and structure of nanotubes depending on the required properties.

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ.....	9
ВСТУП	10
1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД	12
1.1 Класифікація наночастинок	12
1.2 Синтезування срібних наночастинок	13
1.2.1 Синтез срібних наночастинок кубічної форми	14
1.2.2 Синтез срібних нанострижнів.....	17
1.2.3 Синтез срібних нанониток	18
1.2.4 Синтез срібних нанотрубок.....	20
1.3 Комп'ютерне моделювання срібних наночастинок.....	22
2 МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ	28
2.1 Матеріали, що застосовувались в комп'ютерному моделюванні	28
2.2 Методика комп'ютерного моделювання	28
2.2.1 Вибір потенціалу взаємодії	29
2.2.2 Вибір граничних умов	30
2.2.3 Методика контролю температури	32
2.2.4 Вибір кроку по часу	33
2.2.5 Методика розрахунку напружень в системі.....	34
2.2.6 Методика побудови срібної нанотрубки	34
2.2.7 Візуалізація результатів моделювання	35
3 РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕННЯ.....	36
3.1 Моделювання вуглецевоподібної срібної нанотрубки.....	36
3.2 Моделювання срібної нанотрубки скручуванням площини з кубічною структурою.....	37
3.3 Моделювання срібної нанотрубки шляхом видалення атомів з циліндра з ГЦК кристалічною огранкою.....	38
3.4 Вивчення термостійкості нанотрубки срібла з напрямком осі [110].....	39

3.5 Дослідження коефіцієнта лінійного теплового розширення нанотрубки срібла	41
3.6 Дослідження механічних властивостей срібних нанотрубок.....	43
3.7 Порівняння механічних властивостей з літературними даними.....	45
4 РОЗРОБЛЕННЯ СТАРТАП-ПРОЕКТУ	48
4.1 Опис ідеї проекту	48
4.2 Технологічний аудит ідеї проекту.....	50
4.3 Аналіз ринкових можливостей запуску стартап-проекту.....	50
5 ОХОРОНА ПРАЦІ ТА БЕЗПЕКА В НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЯХ	53
5.1 Аналіз параметрів приміщення та мікроклімату	54
5.2 Аналіз освітленості приміщення	56
5.2.1 Розрахунок природного освітлення	57
5.2.2 Розрахунок штучного освітлення	60
5.3 Виробничі випромінювання.....	61
5.3.1 Випромінювання від комп'ютера.....	62
5.4 Виявлення та аналіз наявності шуму, вібрації, інфра- та ультразвуку..	62
5.5 Електробезпека.....	62
5.5.1 Розрахунок заземлення.....	64
5.6 Забезпечення безпеки та запобігання надзвичайним ситуаціям.....	67
ВИСНОВКИ.....	69
CONCLUSIONS.....	71
ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ	72
ДОДАТОК А Вихідний код моделювання вуглецевоподібної нанотрубки для програми XMD	79
ДОДАТОК Б Вихідний код моделювання срібної нанотрубки скручуванням площини з кубічною структурою для програми XMD	80
ДОДАТОК В Вихідний код моделювання срібної нанотрубки з ГЦК кристалічною огранкою для програми XMD.....	81
ДОДАТОК Г Вихідний код моделювання розтягу срібної нанотрубки для програми XMD	82

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

СНЧ – срібні наночастинки;

СНТ – срібні нанотрубки;

ГЦК – гранецентрована кубічна ґратка;

МД – молекулярна динаміка;

ПГУ – періодичні граничні умови.

ВСТУП

Протягом першого десятиліття після відкриття вуглецевих нанотрубок професором Ідзіма [1], вчені з різних наукових напрямків проявили значний інтерес щодо нанотрубних матеріалів. Нанотрубчасті структури є особливо важливими структурними елементами, оскільки вони забезпечили величезні прориви у сучасній науці та техніці, включаючи електроніку, механіку, фізику та хімію [2 – 5]. Останнім часом сфера дослідження та розробки нових класів нанотрубок із чистих металів та їх оксидів стрімко розвивається.

Ці порожнисті структури часто демонструють властивості, які істотно відрізняються від звичайних частинок (наприклад, низька щільність, велика питома площа, стабільність та проникність поверхні), що робить їх привабливими з науково-технічної точки зору. Застосуванням для таких частинок є медицина, наприклад як капсульні агенти для системи доставки лікарських засобів, також їх можна використовувати в якості покриттів, молекулярного сита, композиційних матеріалів, барвників, чорнил, штучних клітин, наповнювачів та захисників чутливих речовин, таких як ферменти та білки .

Вирішення проблеми прикладного використання срібних нанотрубок (СНТ) в першу чергу залежить від вартості виготовлення нанотрубок в макроскопічних кількостях та можливості максимально точно контролювати розміри і властивості отримуваних частинок.

Зусилля дослідників, спрямовані на вивчення та використання властивостей нанотрубок, вимагали розробки та розвитку унікальної експериментальної техніки, що включає в себе наноманіпулятори, електронні мікроскопи, спектрометри комбінаційного розсіювання та інші. Крім того, отримали розвиток чисельні підходи, основані на методах молекулярної динаміки (МД), які дозволяють установити залежність механічних властивостей СНТ від їх геометрії (діаметр, товщина стінок) та зовнішніх умов (температура, навантаження). Отримати ці дані в результаті постановки

експерименту вкрай важко, тому застосування чисельного моделювання являється найчастіше єдиним засобом отримання надійної та необхідної інформації. Відомо, що електричні, термодинамічні та хімічні властивості наносистем залежать від розмірних характеристик наночастинок. Тому оптимізація їхньої морфології та розмірів є важливим завданням. Тим самим розвиток досліджень в області розрахунку та прогнозування властивостей СНТ справляє позитивний вплив як на техніку фізичного експерименту, так і на розробку методів чисельного моделювання квантових об'єктів.

Метою роботи є дослідження структурної стабільності, механічних властивостей срібних нанотрубок при різних температурах за допомогою методу молекулярної динаміки.

Для досягнення поставленої мети сформульовано ряд задач:

1. Проаналізувати літературні дані досліджень, виконаних раніше в різних країнах світу.
2. Створити стабільну тривимірну молекулярно-динамічну модель СНТ.
3. На основі отриманої моделі дослідити особливості поведінки структури СНТ при нагріві.
4. На основі отриманої моделі розрахувати коефіцієнт лінійного термічного розширення СНТ.
5. На основі отриманої моделі дослідити механічні властивості СНТ.

ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

В літературному огляді розглянуті питання, що стосуються класифікації наночастинок, методик синтезу срібних наночастинок (СНЧ), досліджень СНЧ методом молекулярної динаміки .

1.1 Класифікація наночастинок

Згідно з міжнародною конвенцією IUPAC, граничний (максимальний) розмір наночастинок відповідає 100 нм, хоча ця величина є чисто умовною і необхідна тільки для формальної класифікації. Розрізняють два типи наночастинок: нанокластери, або нанокристали, і власне наночастинок. До першого типу відносять частинки впорядкованої будови (часто центросиметричні) розміром 1 нм – 5 нм, що містять до 1000 атомів, до другого - власне наночастинок розміром 5 нм – 100 нм, що складаються з 10^3 атомів – 10^8 атомів. Ниткоподібні і пластинчасті частинки можуть містити набагато більшу кількість атомів і мати один або два виміри, які перевищують порогове значення, але їх властивості в певному напрямку залишаються характерними для речовини в нанокристалічному стані. Якщо наночастинка має складну форму і будову, то в якості характеристичного розглядають не лінійний розмір частинки в цілому, а розмір її структурного елементу. Такі частинки, як правило, називають наноструктурами, причому їх лінійні розміри можуть значно перевищувати 100 нм.

Відмінності в лінійних розмірах наночастинок роблять доцільним поділяти їх на нуль-, одно-, дво- і тривимірні (відповідно, 0D-, 1D-, 2D- і 3D- наночастинок). До нульвимірних наноструктур відносять вільні і стабілізовані кластери, фулерени, ендофуллерени і квантові точки. Клас одновимірних наноструктур представлений набагато більшою різноманітністю нанооб'єктів: це наностержні, нанонитки, нанотрубки і нанострічки. Серед двовимірних наноструктур виділяють тонкі плівки товщиною до сотень нанометрів, гетероструктури, плівки Ленгмюра-Блоджетт, нанопластинки, адсорбційні і

самозбірні моношари, а також двовимірні масиви об'єктів, розміри яких лежать в нанометровому діапазоні. До класу тривимірних наноструктур слід відносити як самі наночастинки і наночастинки в оболонці, так і нанокомпозити і тривимірні самоорганізовані масиви нанооб'єктів. При цьому самі композити можуть включати нуль-, одно- і двовимірні об'єкти, тобто являти собою масиви квантових точок, ниток, багатошарові плівки або шаруваті з'єднання, а також різні комбінації цих типів наноструктур. На нанорівні виявилось можливим і існування структур проміжної розмірності, т.зв. фракталів і дендримерів, що володіють самоподібністю і розглядалися раніше лише в якості математичних моделей.

В останні роки великі зусилля дослідників спрямовані на отримання наночастинок заздалегідь заданих форми і розміру, які визначають певні фізико-хімічні властивості - описано безліч різних синтетичних підходів, кожен з яких володіє своїми перевагами, але й не позбавлений певних недоліків. Сьогодні всі методи отримання наноматеріалів поділяють на дві великі групи за типом формування наноструктур: методи знизу-вгору (Bottom-up) характеризуються зростанням наночастинок або складанням наночастинок з окремих атомів; та методи зверху-вниз (Top-down) засновані на дробленні частинок до нанорозмірів [6].

1.2 Синтезування срібних наночастинок

Неймовірні властивості наноматеріалів сильно залежать від розміру і форми наночастинок, їх взаємодії зі стабілізаторами та навколишніми середовищами, а також від методу їх підготовки. Отже, контрольований синтез нанокристалів є ключовим завданням досягнення кращих прикладних характеристик наночастинок [7]. Оптичні, електричні, магнітні та каталітичні властивості наночастинок залежать від їх розміру, форми та хімічного середовища [8]. В останні роки були запропоновані нові методи синтезу несферичних наночастинок як плоских (трикутники, круглі поверхні тощо) так і тривимірних (кубічна, піраміда тощо). Сферичні частинки з мінімальною

поверхнею для заданого об'єму термодинамічно стабільніші, і якщо зменшення однотипних іонів срібла здійснюється в контрольованих умовах термодинаміки, основним продуктом будуть сферичні наночастинки [9]. Форма наночастинок залежать від їх взаємодії зі стабілізаторами та індукторами навколо них, а також методом їх приготування [10]. Відомо також, що швидкість реакції впливає на форму синтезованих СНЧ. Досліджено окислення стиролу у трьох формах (нанокуб, напівкруглі та трикутні нанопластинки) СНЧ для цієї мети. Результати цього дослідження показали, що швидкість реакції в кубічних наночастинках у 14 разів перевищує трикутні нанопласти і в 4 рази вище напівсферичних наночастинок [11].

Показано, що СНЧ можуть бути синтезовані шляхом використання різних методів опромінення. Лазерне опромінення водного розчину солі срібла та поверхнево-активної речовини може синтезувати СНЧ з відповідною формою та розміром [12].

1.2.1 Синтез срібних наночастинок кубічної форми

Один із варіантів синтезу кубічних СНЧ шляхом подрібнення нітрату срібла, використовуючи етиленгліколь у присутності полівінілпіролідону (ПВП). Результати цього дослідження показали, що на морфологію продукту сильно впливають умови реакції, такі як температура, концентрація AgNO_3 та молярне співвідношення ПВП та AgNO_3 . Наприклад, коли температура знижувалася з $161\text{ }^\circ\text{C}$ до $120\text{ }^\circ\text{C}$ або збільшувалася до $190\text{ }^\circ\text{C}$, форми отриманих СНЧ були нерегулярні. У іншому випадку срібні нанопроволоки стануть основним продуктом. Якщо молярне співвідношення ПВП та AgNO_3 збільшується з 1,5 до 3, основним продуктом є подвійні частинки [13]. Автори [14] змогли синтезувати однорідні нанокуби срібла шляхом зменшення нітрату срібла за допомогою етиленгліколю при $140\text{ }^\circ\text{C}$ у присутності полі ПВП та HCl .

В роботі [15] показано можливість синтезу трьох різних форм СНЧ з використанням поліол-хімічного способу, в якому етиленгліколь (ЕГ)

виступав як розчинник, так і відновник. Цікавий момент полягав у тому, що коефіцієнт подрібнення можна контролювати шляхом зміни температури реакції. У експерименті ПВП виступав як стабілізатор для запобігання агрегації наночастинок, а також як речовина для контролю форми наночастинок. Група змогла синтезувати нанотрубки із сріблом з керованим кутом обрізання, використовуючи іони Cl^- (NaCl). Зображення СЕМ кубічних наночастинок срібла показано на рисунку 1.1.

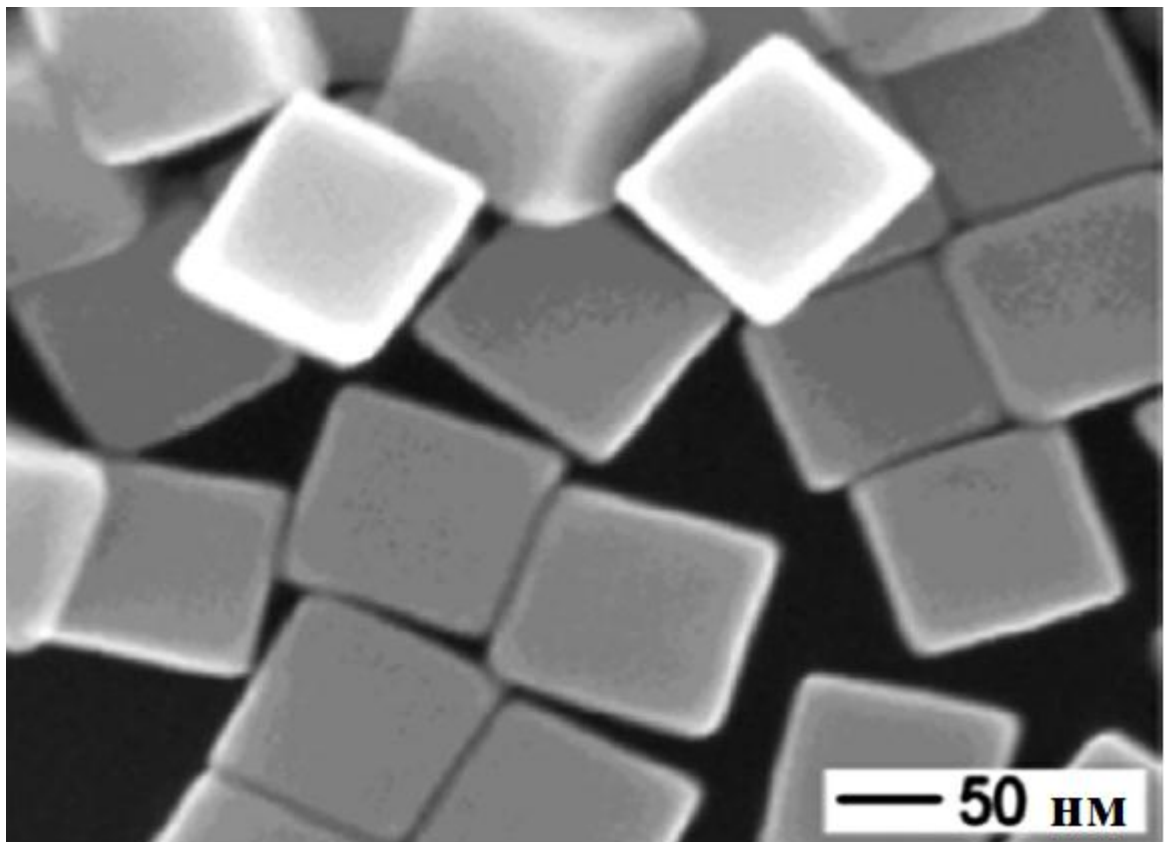
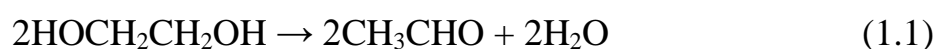


Рисунок 1.1 – СЕМ срібних нанокубів [15]

Доведено, що при синтезі поліолу атоми срібла утворюються шляхом подрібнення AgNO_3 з етиленгліколем за допомогою такого механізму:



Коли концентрація атомів срібла досягне рівня пересичення, вони починають утворювати зародки і перетворюватися на наноструктури срібла у фазі розчину. Автор [16] знайшов швидший спосіб синтезу нанокубів срібла. У цьому способі додавання невеликих кількостей сульфїду натрію (Na_2S) або гідросульфїду натрію (NaHS) до звичайного поліолу значно знизило час реакції (з 26 хвилин до 8 хвилин). Просто регулюючи час реакції, можна отримати монодисперсні нанокуби з срібла з довжиною краю 25 нм – 45 нм.

Автори [17] синтезували нанокуби із срібла діаметром 30 нм – 50 нм, які використовують поліоловий процес, в якому ЕГ діяв як відновник, так і розчинник. При їх виготовленні нітрат срібла був подріблений етиленгліколем у присутності агенту для закупорювання ПВП .

В роботі [18] синтезували нанокуби з срібла за допомогою методу сульфїдоподібного поліолу швидкого отримання (реакція <15 хв.), в якому Ag (I) було зменшено до Ag (0) етиленгліколем у присутності ПВП та Na_2S . Коли концентрація атомів срібла досягає пересичення, вони утворюють агломерати у формі насіння, а потім зростають до наноструктурних розмірів. Наявність ПВП та Na_2S сприяє утворенню нанокубів срібла.

Синтезовані нанокуби срібла в лужному водному розчині AgNO_3 та карбоксиметилірованого хітозану (КМХ) ультрафіолетовим (УФ) світлом, в якому (КМХ) використовували для зменшення катіона срібла та як стабілізатор СНЧ. Синтезовані СНЧ знаходились в діапазоні 2 нм – 8 нм [19].

В роботі [20] одержані срібні нанокуби з довжиною грані від 30 нм до 70 нм, використовуючи CF_3COOAg як прекурсор. В результаті додавання мікроелементів гідросульфїду натрію (NaHS) і соляної кислоти (HCl) у синтезі поліолу, срібні нанокуби спостерігались з високою якістю та високою відтворюваністю.

Автори [21] вивчали вплив агломеруючих агентів на контроль форми для нанокристалів срібла. Вони виявили, що кубічний наночастинки срібла можуть бути отримані шляхом введення ПВП як агента для закупорювання.

В роботі [22] синтезовані нанокуби срібла при кімнатній температурі, використовуючи екстракти листя з евкаліпта макрокарпа. У процесі синтезу екстракт листя діяв як зменшуючий, так і стабілізуючий агент. Мікрофотографії ТЕМ показали наявність як сферичних, так і кубічних наночастинок срібла. Сферичні СНЧ розміром від 10 нм до 100 нм, тоді як розмір кубічних становив від 10 нм до 50 нм.

1.2.2 Синтез срібних нанострижнів

Взагалі, нанострижні можуть бути виготовлені термічними [23], фотохімічними [24] та методами електрохімічного шаблону [25]. В роботі [26] використовується мокрий хімічний метод для осадження срібних нанострижнів на звичайних скляних підкладках. Спочатку в розчині готували срібні насіння. Нітрат срібла зменшується до наночастинок срібла розміром $2 \text{ нм} \pm 4 \text{ нм}$ борогідридом натрію та у присутності цитрату натрію. Срібні нанострижні ростуть у розчині з впорскуванням насіння срібла в середовище, що містить нітрат срібла, аскорбінову кислоту та цетилтриметиламмоній бромід (ЦТАБ). Колір розчину був спочатку світлим, після чого змінився на зелений після завершення реакції .

Орендофф та ін. [27] Можуть синтезувати значні кількості срібних наностержнів з поперечними та поздовжніми піками плазмону. Процес синтезу включав зменшення AgNO_3 разом з NaBH_4 у присутності цитрату та наступний ріст насіння до нанострижнів у присутності аскорбінової кислоти та ЦТАБ. Синтезовану суміш сферичних і стержневих наночастинок можна ізолювати та очищати шляхом центрифугування.

Також в роботі [28] вченими були синтезовані срібні нанострижні. Вперше у своєму дослідженні вони використовували винний калій для зменшення нітрату срібла у присутності ПВП. Змінюючи співвідношення AgNO_3 / ПВП, можна контролювати діаметр і довжину срібних нанострижнів.

Сюй та ін. [29] змогли синтезувати срібні нанострижні (рисунок 1.2) за допомогою простого методу хімічного осадження за допомогою пористої алюмінієвої мембрани (ПАМ).

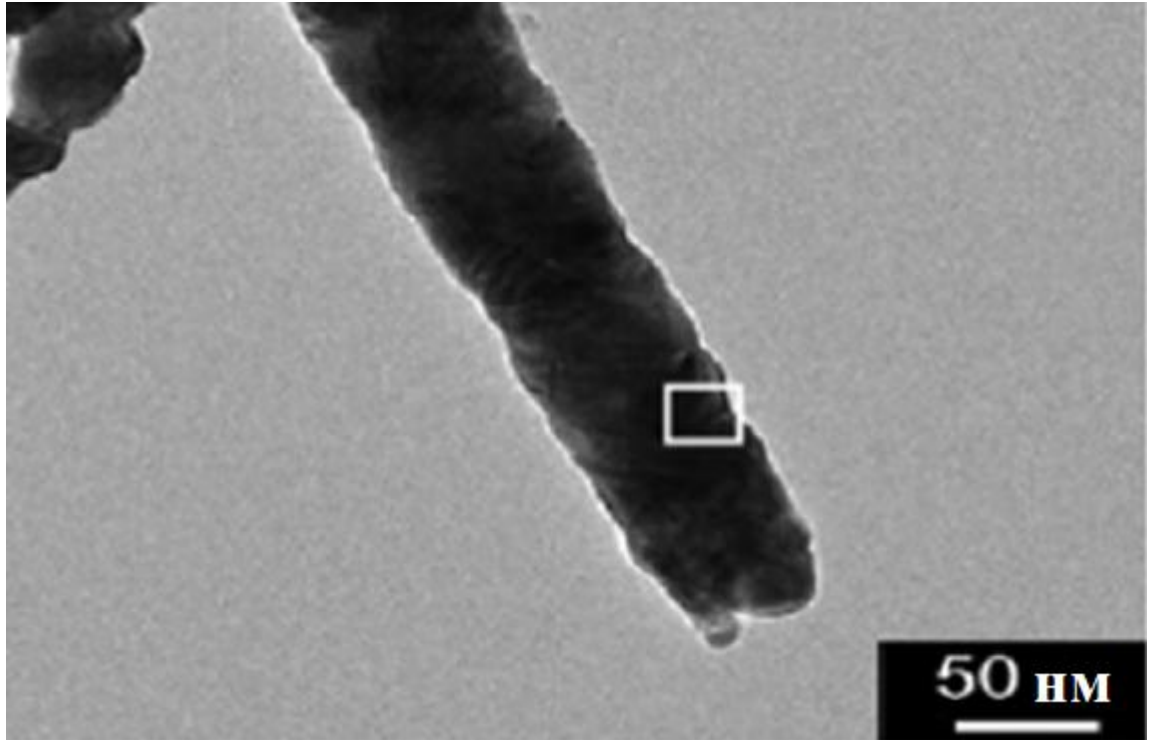


Рисунок 1.2 – ТЕМ срібних нанострижнів [29]

Іони Ag^+ в каналах ПАМ зменшуються ацетальдегідним способом і утворюють нанострижневі структури. Дослідження показало, що діаметр і довжина срібних нанострижнів визначаються шаблоном ПАМ, також їх довжина залежить від температури реакції.

1.2.3 Синтез срібних нанониток

Лю та ін. [30] повідомили, що утворення срібних нанониток неможливо виконати без шаблону. Ці дослідження призвели до переконання, що для утворення наноструктур 1D срібла потрібен фізичний шаблон, такий як вуглецеві нанотрубки або цеоліти, з метою досягнення форм нанониток. Таким чином, вони використовували кристали AgBr з желатиновим шаблоном і,

нарешті, змогли синтезувати срібні нанонитки з діаметром 80 нм та довжиною 9 мкм.

В роботі [31] використовували м'який розчин-фаза метод, який не потребував розчинення та розпаду твердих шаблонів для синтезу нанониток срібла. У своєму експерименті вони виявили, що зменшення нітрату срібла можливе за допомогою етиленгліколю при температурі 160 °С, подальше додавання розчину нітрату срібла та ПВП до розчину призводить до утворення срібних нанониток з діаметром 30 нм – 40 нм і довжиною 50 мкм.

В роботі [32] використовувався беззародковий поверхнево-активний спосіб виробництва високоякісних срібних нанониток у великій кількості. Нітрат срібла знижується цитратом триацетату ($\text{Na}_3\text{C}_6\text{H}_5\text{O}_7$) у присутності додецилсульфонату натрію. Триацетат цитрат був важливим фактором у цьому процесі, а додецилсульфонат натрію виступав у якості агента для утворення срібних нанониток. Доведено, що шляхом зміни концентрації тринатрієвого цитрату, можна контролювати діаметри виготовлених срібних нанониток. Було також зрозуміло, що при надто високих або занадто низьких концентраціях додецилсульфонату натрію срібні нанонитки не можуть бути виготовлені.

Стверджується, що використання фізичних шаблонів обмежило випуск срібних нанониток. Синтезовані срібні нанонитки з використанням поліолу для зменшення срібла з етиленгліколем у присутності ПВП. Діаметр вироблених наночастинок срібла, як повідомляється, знаходився в діапазоні 150 нм – 200 нм та довжиною 50 мкм – 100 мкм [33].

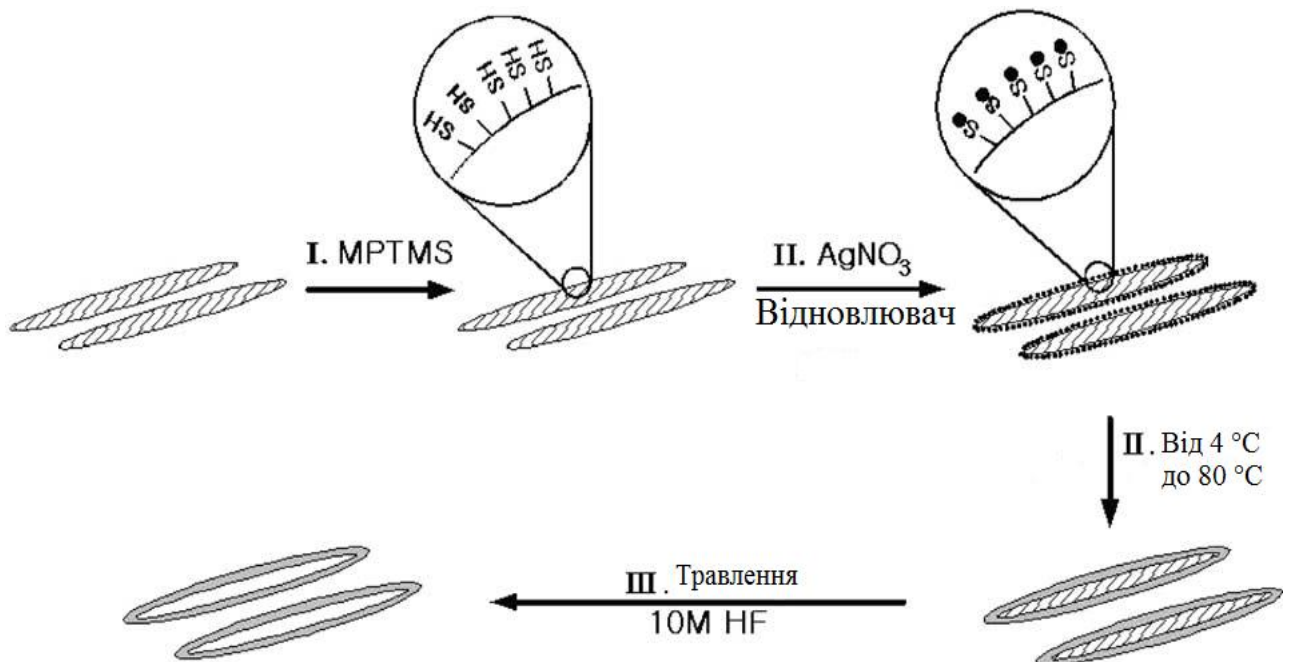
В роботі [34] стверджується, що вперше синтезовані срібні нанонитки з різними формами: Y-подібні, K-подібні та багатогалузеві нанонитки. Розгалужені наноструктури були синтезовані шляхом зменшення нітрату срібла (AgNO_3) у поліетиленгліколі (ПЕГ) з полівінілпіролідом (ПВП) як закупорювальний агент. Ці наноструктури зазвичай синтезуються за молярним співвідношенням 3,3 : 1 між одиницями ПВП та AgNO_3 . Синтез

розгалужених нанониток сильно залежить від молярного співвідношення ПВП до AgNO_3 , температури реакції, ступеня полімеризації відновлювача та ПВП.

Фу та ін. [35] синтезували біметалічні нанонитки Ag-Au мокрою хімічною методикою при кімнатній температурі. Нанонитки були отримані шляхом зменшення наночастинок оксиду ванадію (V_2O_5). Діаметр виготовлених срібних нанониток становив приблизно 20 нм, а їх довжина, як повідомляється, досягає 10 мкм.

1.2.4 Синтез срібних нанотрубок

Синтезування СНТ відбувається використовуючи процес самозбирання шляхом адсорбції наночастинок або іонів срібла на поверхні функціоналізованого кремнієвого стержня з подальшим його видаленням за допомогою хімічного травлення у розчині плавикової кислоти (рисунок 1.3).

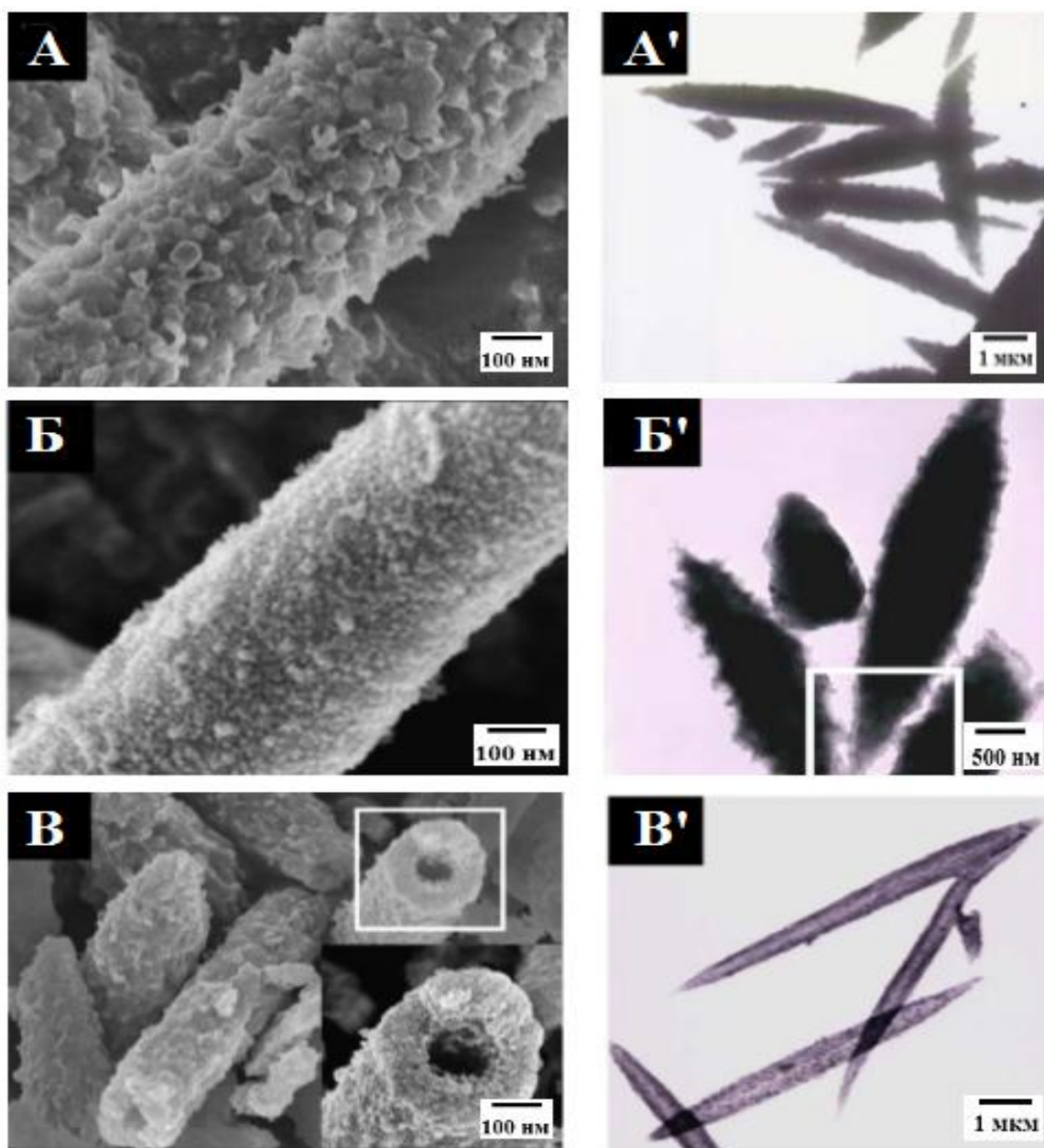


I – процес утворення функціональної групи на поверхні кремнієвого стержня; II – процес утворення та росту срібного покриття у водному розчині; III – процес видалення стержня шляхом хімічного травлення

Рисунок 1.3 – Схематична ілюстрація основних етапів синтезу срібних нанотрубок за допомогою використання тиол-функціоналізованого кремнію як шаблону (чорні кружечки ілюструють іони $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$) [36]

В якості функціонального агенту для отримання функціональних груп на поверхні кремнієвого стержня використовувався тримеркаптопропилтриметоксисилан (МРТМС).

На рисунку 1.4 зображено СЕМ і ТЕМ знімки структури СНТ після кожного кроку виготовлення, описаного вище.



А, А' – утворення срібного покриття на кремнієвому стрижні;
 Б, Б' – зростання срібного покриття на кремнієвому стрижні;
 В, В' – срібні нанотрубки після хімічного травлення

Рисунок 1.4 – СЕМ (А, Б, В) і ТЕМ (А', Б', В') знімки структури СНТ [36]

Механізм формування, товщина та властивості стінок СНТ сильно залежать від типу функціональних груп (силанова, амінова, тиолова) [36]. Це пов'язано з тим, що функціональні групи мають різну силу взаємодії (електростатичне притягання) з срібними наночастинками.

Автори [36] зазначають, що для спрощення експерименту, дослідження СНТ проводилось при кімнатній температурі, але після хімічного травлення на СНТ залишався невеликий вміст кремнію, вуглецю, сірки та кисню.

Для вирішення цієї проблеми автори намагалися видалити МРТMS групи використовуючи процес прокалювання при 550 °С протягом 2 годин з подальшим хімічним травленням. Дослідження отриманої системи показали, що порожниста структура СНТ в основному руйнується при такій температурі.

1.3 Комп'ютерне моделювання срібних наночастинок

В роботі [37] досліджено використання поверхнево-активних речовин для формування форми наночастинок срібла. Це дозволяє точно налаштувати морфологічну еволюцію та оптичні властивості металевих наночастинок. Полівінілпіролідон використовується як поверхнево-активна речовина для контролю росту наночастинок срібла при кімнатній температурі.

У цій роботі була проведена симуляція за допомогою молекулярної динаміки (МД) для розуміння регіоселективної адсорбції ПВП, що призводить до сприятливого зростання наночастинок срібла в диметилформаміді (ДМФА). Розраховано енергії взаємодії між ПВП та площинами кристала Ag (110), Ag (100) та Ag (111), а також було досліджено профіль щільності по довжині поверхнево-активної речовини на поверхні срібла.

Було доведено, що аналіз профілів розподілу довжин, отриманий з дослідження, повністю пояснив адсорбцію ПВП на поверхні наночастинок срібла через карбонільну групу кільця ПВП. Застосування методу МД має важливе значення для розуміння еволюції наночастинок срібла і є життєво важливим у виборі правильних поверхнево-активних речовин.

В роботі [38] класична молекулярна динаміка була використана для імітації пружного розсіяння одиночних твердих наночастинок з плоскої жорсткої поверхні. Результати показали, що зі включенням рівнодіючої дисипативної сили метод здатний відтворити експериментальні вимірювання критичних швидкостей, необхідних натрію хлориду натрію та срібним наночастинок, щоб здійснити еластичне розсіювання з поверхні. Також відтворюється швидкість, при якій вплив частинок переходить від еластичного розсіювання та до пластичної деформації.

Модель молекулярної динаміки (МД) розроблена для моделювання низькотемпературного спікання наночастинок срібла та розрахунку результуючого питомого опору [39]. Завдяки високому співвідношенню поверхні до об'єму, фарби з наночастинками срібла можуть спікати при низьких температурах термічної обробки, які використовуються в процесі спікання інтенсивним імпульсним світлом (ПС). У цьому дослідженні, конфігураційна зміна СНЧ під час спікання досліджується з використанням моделі МД. Потім результуючий електричний опір розраховується за формулою Реймана-Вебера. Результати моделювання показують, що на початковій стадії спікання опір швидко зменшується завдяки швидкому утворенню і формуванню шийки. Окрім того, розрахована температурна залежність опору добре узгоджується як з експериментальними вимірами, так і з аналітичною моделлю спікання, показуючи, що опір зменшується з підвищенням температури спікання. Модель надає інструмент дизайну для оптимізації процесу ПС.

В роботі [40] наноз'єднання аксіально розташованих срібних нанониток здійснювалося шляхом моделювання методом МД. Результати показують, що температура і відстань між срібними нанонитками в осьовому напрямку сильно впливають на ефект наноз'єднання. Коли температура нанониток відносно висока, атоми розвпорядковані. При порівняно низькій температурі, агрегатні частинки можуть бути добре пов'язані з хорошою якістю переходу та своєю власною морфологією, яка аналогічна холодному зварюванню без

синтезу, тоді як відстань між срібними нанонитками повинна контролюватися взаємодією та дифузійною міжфазною атомів на кінчиках нанониток. Срібні нанонитки розміщують на підкладці Si і SiO₂, оскільки атомні види та структура решітки матеріалу підкладки можуть по-різному впливати на рухи атомів срібла через силу взаємодії між атомами, якість нанооз'єднання срібних нанониток на кремнієвій підкладці краще, ніж на підкладці SiO₂. Отже, для отримання ефективного та надійного нанооз'єднання без наноспайок та інших матеріалів температуру, відстань та поверхню субстрату слід обгрунтовано контролювати та підбирати, надаючи корисні теоретичні вказівки для експерименту та застосування нанооз'єднання.

В роботі [41] завдяки моделюванню методом МД досліджувались структури СНЧ, що утворились в процесі охолодження нанокрапель срібла різного розміру. Дослідники використовували квантовий потенціал Саттона-Чена (QSC). Показано, що протягом процесу затвердіння відбуваються безперервні фазові переходи.

За допомогою методу індексу кластерного типу (СТІМ-2) та тривимірного графічного спостереження були досліджені внутрішні структури кінцевих наночастинок. Окрім регулярних кристалічних десятигранних та ікосаедричних наночастинок, також знайдені деякі дуже цікаві морфології. З геометричних поглядів ці нові структури можна назвати поверхнево-ізомерними, оскільки вони можуть бути побудовані на основі регулярних кристалічних декаедричних або ікосаедричних частинок шляхом додавання декількох шарів з конкретним атомарним розташуванням. Ці нові морфології мають глобальну (трьох-або п'ятикратну) симетрію та меншу енергію, ніж інші структури, з однаковим розміром (кількістю атомів), і одна з них узгоджується з спостереженнями в експерименті.

Автори [42] досліджували атомні механізми початку пластичної деформації у наночастинках перехідних металів з ОЦК ґраткою. В роботі було показано, що рівень міцності наночастинок перехідних металів з ОЦК ґраткою попередньо визначається нестабільністю ґратки в межах локальної області

кристала. При одновісному напруженні навіть при низьких температурах ідеальний кристал стає схильним до зсуву ("орторомбічний" шлях), тобто місцевий зсуву є основним механізмом релаксації напружень у наночастинках перехідних металів з ОЦК граткою. Розглянуто специфіку локальної нестабільності наночастинки при гідростатичному напруженні. Запропонована модель залежності напруження від температури. Показано, що міцність наночастинки зменшується як функція квадратного кореню температури з підвищенням температури. Це істотна відмінність температурної залежності міцності наночастинок від тієї ж для "звичайних" моно- та полікристалів.

В цій роботі було показано, що максимальне значення напруження та тип сформованого дефекту залежать від напрямку ГЦК гратки наночастинки, вздовж якого прикладається навантаження. Результати симуляції показують, що у наночастинках перехідних металів з ОЦК граткою можуть утворюватися два види дефектів. При навантаженні в напрямках [110] та [111] локальна нестабільність гатки призводить до утворення дислокацій на поверхні наночастинки. Подальша деформація наночастинки реалізується рухом дислокацій. Релаксація напружень внаслідок локальної нестабільності при навантаженні в напрямку [100] реалізується в результаті локального повороту решітки від [100] до [110]. Подальша пластична деформація кристала здійснюється за рахунок продовження переорієнтації по всьому кристалу. Локальний поворот решітки може бути повторно представлений як утворення близнюка і подальший його ріст.

В роботі [43] проводились схожі дослідження наночастинок міді з ГЦК граткою методом МД. Також автори оцінили густину дислокацій, що утворюються під час пластичної деформації міді, залежно від температури, при якій відбувалось деформування.

В роботі [44] методом МД досліджується структурна еволюція біметалічної нанонитки, що має мідне ядро та срібну оболонку. Нанонитка піддавалася одновісному розтягу. Аналізували розподіл напружень та густину

дислокацій у нанонитці залежно від товщини срібної оболонки та температури, при якій відбувався розтяг.

В роботі [45] методом МД, використовуючи ЕАМ потенціал, досліджувалась структура та механічні властивості срібних нанониток. Було розглянуто три типи нанониток з різною геометричною формою поперечного перерізу (п'ятикутний, ромбічний і усічений ромбічний). Показано, що залежно від структури, всі нанонитки мають різні рівні міцності та деформуються різними механізмами. Розрахована межа міцності нанониток діаметром від 1 нм до 25 нм показує, що крім діаметра поперечного перерізу міцність нанопроводів сильно прив'язана до структури. Це дослідження показує, що структура та розмір нанониток можуть бути використані для отримання специфічних механічних властивостей в нанорозмірних пристроях.

У роботі [46] представлені теоретичні механічні властивості нанониток Ag, Cu та Ni. Для отримання теоретичних механічних властивостей цих металевих нанониток проводилось механічне згинання, за схемою трьохточкового згину, використовуючи метод МД та ЕАМ потенціал. Досліджено вплив температур на співвідношення силового зсуву зони навантаження різних металевих нанониток. Модуль Юнга та межа міцності різних металевих нанониток орозраховують з співвідношення силових переміщень в точках навантаження, використовуючи класичну теорію механіки. Коротко обговорюється вплив діаметрів ниток, температури на модуль Юнга та міцності нанониток Ag, Cu та Ni. Використовуючи центросиметричні параметри, візуалізацію зародження та сколювання дислокацій в зоні навантаження, докладно описується пластичність та розрив різних металевих нанониток.

Автори [47] досліджували вплив ефекту орієнтації поверхні срібних нанониток на їх механічні властивості, визначені методикою трьохточкового згину, що розраховувалась методом МД з використанням ЕАМ потенціалу. Виявилось, що від орієнтації поверхні та напрямку навантаження залежить структура та напрямки двійників, що утворюються під час деформування.

Деякі з них в свою чергу можуть виступати перешкодами для руху дислокацій, що призводить до збільшення міцності нанониток.

В роботі [48] механічні властивості п'ятикутних срібних нанониток під час стиснення досліджуються методом МД. Як порівняння, також досліджуються монокристалічні нанонитки. П'ятикутні межі близнюків збільшують не тільки міцність на розтяг, а й міцність при стискуванні, що дозволяє зробити висновок, що вихідний розподіл напружень не є основним чинником зміцнення. Пояснення на основі модуля пружності також вважається некоректним, оскільки спостерігається подібний модуль між цими двома типами нанониток. На відміну від "дислокаційного голодування", що спостерігається в монокристалічних нанонитках під час стиснення, використання п'ятикутної структури призводить до складних дислокаційно-дислокаційних та дислокаційно-близнюкових взаємодій, що сприяє підвищенню щільності дислокації. В п'ятикутних срібних нанонитках домінуючим механізмом деформування виявилось перехресне ковзання на відміну від звичайного дислокаційного ковзання в монокристалічних нанонитках. Досліджено вплив граничного стану та геометрії зразка на поведінку під час пластичної деформації.

В роботі [49] автори описують механічні властивості п'ятикутних срібних нанониток з унікальною близнюковою структурою, що були розраховані використовуючи методіку атомно-силової мікроскопії, в якій проводили трьохточковий згин. Криві зсуву сили демонструють надпружну поведінку з наступним несподіваним крихким руйнуванням без значної пластичної деформації. Термічний відпал призвів до поступового переходу до більш слабких, більш пластичних показників, пов'язаних з ліквідацією двійникової граничної структури. Ці результати вказують на критичну роль мікроструктури при інженерії механічних властивостей нанорозмірних матеріалів.

МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ

2.1 Матеріали, що застосовувались в комп'ютерному моделюванні

Для моделювання було обрано типовий метал з ГЦК ґраткою – срібло. Різні потенціали для даного матеріалу досить давно розраховані та перевірені в роботах багатьох вітчизняних та зарубіжних науковців.

Період ґратки при кімнатній температурі 0,4086 нм. Атомний радіус $r = 0,144$ нм.

Властивості срібла та більшості його сплавів в стаціонарних умовах досить добре вивчені.

2.2 Методика комп'ютерного моделювання

У техніці молекулярної динаміки обчислюється рух для кожного атома. Цей алгоритм протікає наступним чином:

1. Вказуються вихідні положення (геометрія досліджуваної системи) та швидкості (не обов'язково, оскільки вони можуть автоматично розраховуватись для отримання необхідної температури) кожного атома.

2. Використовуючи міжатомні потенціали, розраховуються сили, що діють на кожен атом, залежно від атомів, що знаходяться поблизу. Максимальна відстань взаємодії між двома атомами визначається "радіусом обрізання" кожного конкретного потенціалу.

3. Використовуючи ці сили, розраховуються нові атомні положення та швидкості через невеликий проміжок часу, що називається крок по часу. Ці нові позиції та швидкості стають новими входженнями до кроку (2). Кроки (2) та (3) повторюються, кожне повторення моделює додатковий часовий крок.

Як правило, молекулярно-динамічна симуляція складається з тисяч таких кроків по часу, характерна величина яких знаходиться в фемтосекундному діапазоні. Цей алгоритм є, по суті, інтегрування Ньютонівського рівняння руху по часу для отримання позицій і швидкостей частинок.

2.2.1 Вибір потенціалу взаємодії

При моделюванні класичними методами взаємодія описується за допомогою потенційної функції $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$, що визначає залежність потенційної енергії системи з N атомів від їх координат [50]. Сили, діючі на атоми, обчислюються з цього потенціалу:

$$\vec{F}_i = -\frac{\partial U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)}{\partial \vec{r}_i} \equiv -\nabla_i U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad (2.1)$$

Найбільш простим видом міжатомних потенціалів є парні потенціали. Ці потенціали не мають квантово-механічного обґрунтування. Проте, зважаючи на свою простоту, вони часто використовувалися раніше при моделюванні. У наближенні парних потенціалів енергія системи часток представляється у вигляді суми потенціальних енергій взаємодії усіх пар атомів :

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1(j \neq i)}^N \varphi(r_{ij}), \quad (2.2)$$

де $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ відстань між атомами пари $i - j$.

Парні потенціали відносяться до емпіричних потенціалів - потенціалів, заснованих на простих виразах, що містять параметри, які можуть бути вибрані так, щоб потенціал правильно описував деякі властивості речовини.

Найбільш поширеними парними потенціалами є потенціали Ленарда - Джонса і Морзе.

У разі багаточастинкових потенціалів розрахунок сили стає складнішим. При такому розрахунку завжди потрібно враховувати головне: будь-яка зміна повної потенціальної енергії, яка відбувається при зміщенні атома i , дає вклад в силу, діючи на цей атом.

Парні потенціали мають істотні недоліки. По-перше, парні потенціали не залежать від оточення, тобто атоми в кристалічній гратці і на поверхні або біля дефекту нічим один від одного не відрізняються. По-друге, парні потенціали не враховують залежність сили зв'язку від напрямку, який сильно виражений в ковалентних кристалах, а також в перехідних металах, в яких у зв'язок дають вклад d-електрони. Парні потенціали працюють краще для металів, в яких зв'язок здійснюється s- і p-електронами. По-третє, парні потенціали дають завищену оцінку енергії утворення вакансій. По-четверте, парні потенціали неправильно описують пружні властивості кристалів.

Сучасні потенціали, що враховують багаточастинковий характер взаємодії атомів, будуються з квантової теорії електронної структури кристалів або з перших принципів (*ab initio*).

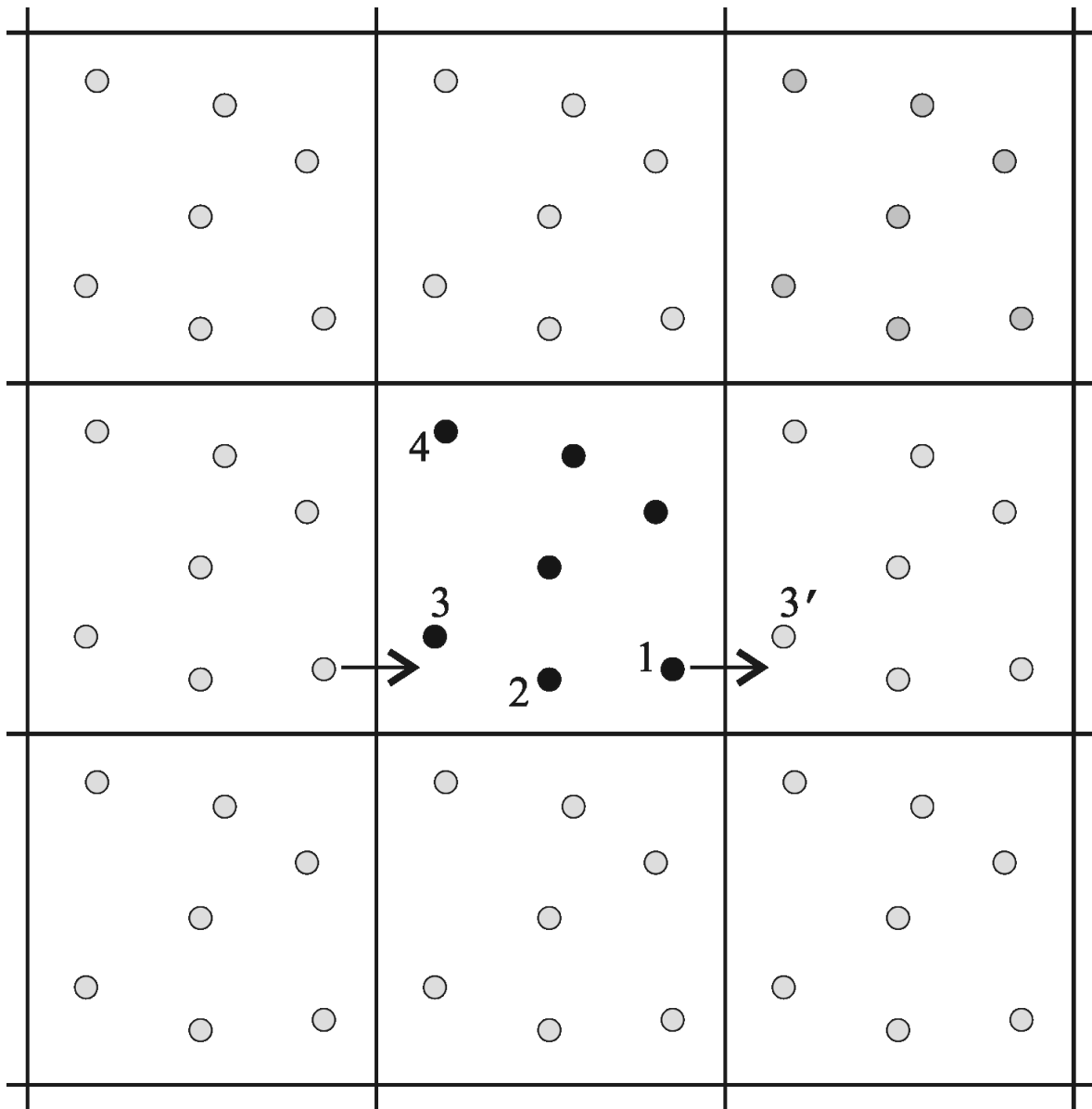
Перевагою методу зануреного (втіленого) атома (ЕАМ) в порівнянні з парними потенціалами є врахування багаточастинкової взаємодії. Цей потенціал здатний описувати зменшення енергії зв'язку, що припадає на один зв'язок, при збільшенні координаційного числа. Метод зануреного атома дозволяє уникнути і багатьох інших недоліків парних потенціалів. Він дає правильну оцінку енергії утворення вакансії, оскільки він до неї підганяється. Він підганяється також до усіх пружних констант.

Моделювання проводилось із використанням ЕАМ потенціалу для двокомпонентної системи Ag-Cu. Розробка та перевірка адекватності отримуваних даних цього потенціалу детально описана в роботі [51].

2.2.2 Вибір граничних умов

Існує декілька типів граничних умов. Найбільш часто застосовуються періодичні граничні умови (ПГУ). За таких умов, частинки розташовуються в розрахунковій комірці у вигляді паралелепіпеду. Ця комірка повторюється нескінченну кількість разів в напрямках, для яких задані ПГУ. Таким чином, якщо частинка розташовується в розрахунковій комірці та має координати $(x; y; z)$, то в дійсності вважається, що вона являє собою нескінченну

сукупність частинок, розташованих в координатах $(x + ma; y + nb; z + lc)$, де a, b, c – довжина сторін розрахункової комірки, m, n, l – цілі числа (рисунок 2.1). Ця сукупність частинок рухається разом та взаємодіє не тільки з частинками тої самої розрахункової комірки, але й сусідніх. В процесі руху частинка може перейти до сусідньої комірки, при цьому з іншого боку з'являється аналогічна частинка-«зображення», а число частинок в комірці залишається незмінним.



частинки, позначені чорним кольором відповідають частинкам
«оригіналам», сірим кольором – «зображенням»

Рисунок 2.1 – Схематичне зображення періодичних граничних умов [52]

При цьому, потенціал має скінченну область дії – так званий потенціал обрізання. При обчисленні взаємодії до уваги беруться тільки ті частинки, які знаходяться на відстані, меншій за потенціал обрізання. Це значно спрощує розрахунки, але розмір розрахункової комірки в напрямках, вздовж яких діють ПГУ, повинен бути більшим за два радіуси обрізання для запобігання впливу частинки на саму себе ж. В потенціалі, який використовувався для моделювання радіус обрізання становив 0,599 нм.

2.2.3 Методика контролю температури

У молекулярній динаміці, як правило, необхідно контролювати температуру симуляції. Є два типи контролю: ініціалізація температури та підтримка температури. Як правило, на початку моделювання визначається положення кожної частинки, але швидкості не відомі, відома лише бажана температура.

Ініціалізація реалізується шляхом задання випадкових швидкостей для всіх частинок з відповідним розподілом Максвелла-Больцмана для заданої температури. Є можливість призначити швидкості тільки в одному або двох з трьох x , y , z напрямків (залишаючи інші швидкості незмінними). Це може бути використано для імітації дво- або одновимірних твердих тіл, оскільки якщо початкові координати обмежуються площиною або лінією, а всі швидкості, нормальні до площини або лінії, дорівнюють нулю, то частинки залишаться обмеженими необхідною геометрією.

Підтримка температури використовується для реалізації симуляції при постійній температурі. Це необхідно в тому випадку, коли моделюються явища, які вивільняють тепло, такі як фазові перетворення або робота, виконана зовнішньою силою, або, можливо, буде моделюватися система, яка поглинає тепло. Для підтримки приблизної постійної температури застосовується "temperature clamp". Це алгоритм, який масштабує миттєві швидкості, щоб довести температуру до потрібного значення. Масштабування здійснюється шляхом множення кожної компоненти швидкості частинки на

один і той же коефіцієнт. Як правило, ви не бажаєте досягти потрібної температури за один крок, тому що зміна температури буде надто різкою. Ранні симуляції, що використовують саме таку схему, викликали значний шум у високочастотному кінці фононного спектра. Отже, замість цього швидкість масштабується коренем 33-го степеня (значення за замовчуванням) цього фактора "одного кроку". Це має приблизний ефект, як досягнення бажаної температури після 33 кроків. Таке моделювання корисно для тестування стабільності симуляції (розміру системи, кроку по часу). Якщо загальна енергія, яку розраховує програма для адіабатичної симуляції, не є постійною, то, швидше за все, значення кроку по часу занадто велике.

2.2.4 Вибір кроку по часу

Збільшення кроку за часом дає можливість простежити за поведінкою системи на більшому часовому проміжку. Однак, не повинно виникати похибок, пов'язаних з неточним розрахунком траєкторії руху атомів. При описі поведінки атомів у гратці крок не може перевищити 0,25 від періоду коливань атома, так як при цьому буде некоректно описуватися траєкторія коливального руху атомів поблизу положення рівноваги. Для того щоб забезпечити консервативність системи, крок вибирають меншим, ніж величина, зворотна максимальній частоті спектру коливань у даній системі [52]. Зазвичай, для одноатомних систем характерний крок за часом становить приблизно 10^{-15} с [52]. Значне зменшення кроку за часом також небажане, тому що це зменшує доступний реальний час спостереження за системою. Крім того, точність обчислень в міру зменшення кроку з певного значення, замість збільшення, починає падати. Це викликано тим, що накопичується похибка, пов'язана з похибкою округлення величин на комп'ютері.

Щоб оцінити максимально можливий крок по часу для досліджуваної системи, було змодельовано безкінечний срібний зразок (використовувалось 10000 атомів але накладались періодичні умови по всіх координатних осях). В

якості мінімального кроку по часу обрано значення 0,5 фс. Проводилось 1000 актів моделювання. Якщо сумарна енергія системи залишалася незмінною, крок по часу збільшувався на величину 0,5 фс і алгоритм повторювався заново. Таким чином значення кроку по часу, яке викликало зростання повної енергії системи, вже не придатне для використання.

Виходячи з вище перерахованих тверджень, для досліджуваної системи було обрано значення кроку по часу 8 фс.

2.2.5 Методика розрахунку напружень в системі

Програма XMD розраховує значення напруження між і-тою та j-тою частинками за формулою:

$$S_{ij} = m \times V_i \times V_j, \quad (2.3)$$

де m – маса частинок;

V_i, V_j – вектори швидкостей частинок.

Файл даних - це текстовий файл із 7 стовпчиками. Перший стовпець - це номер кроку, наступні шість стовпців - це середні внутрішні масштабовані напруження на атом в одиницях ергів. Щоб отримати справжні напруження, масштабовані потрібно розділити на об'єм одного атома. Програма не робить це автоматично, тому що коли є вільна поверхня та / або порожнечі гратки, то об'єм для атома не визначений [53].

2.2.6 Методика побудови срібної нанотрубки

Моделювання проводили в програмному забезпеченні XMD. Команди в кодї програмної реалізації описані у методичних вказівках до використання програмного забезпечення XMD [53].

Змодельовано три різні конфігурації срібних нанотрубок з різними зовнішнім та внутрішнім діаметрами. По осі X накладалися періодичні умови, що, з точки зору фізичної моделі, робить зразок нескінченним в цьому

напрямку. Зрештою було досліджено найбільш стабільну нанотрубку, яка має вільні кінці, довжиною 10 нм, зовнішнім та внутрішнім діаметрами 5 нм та 2 нм відповідно.

2.2.7 Візуалізація результатів моделювання

Візуалізація результатів моделювання проводилась в програмі VMD [54]. Результати моделювання записувались в текстовий файл, який містив номер, тип та координати кожного атома системи.

Зміна атомних конфігурацій у часі спостерігалась у вигляді слайд-шоу. Це дозволило аналізувати поведінку нанотрубок.

3 РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕННЯ

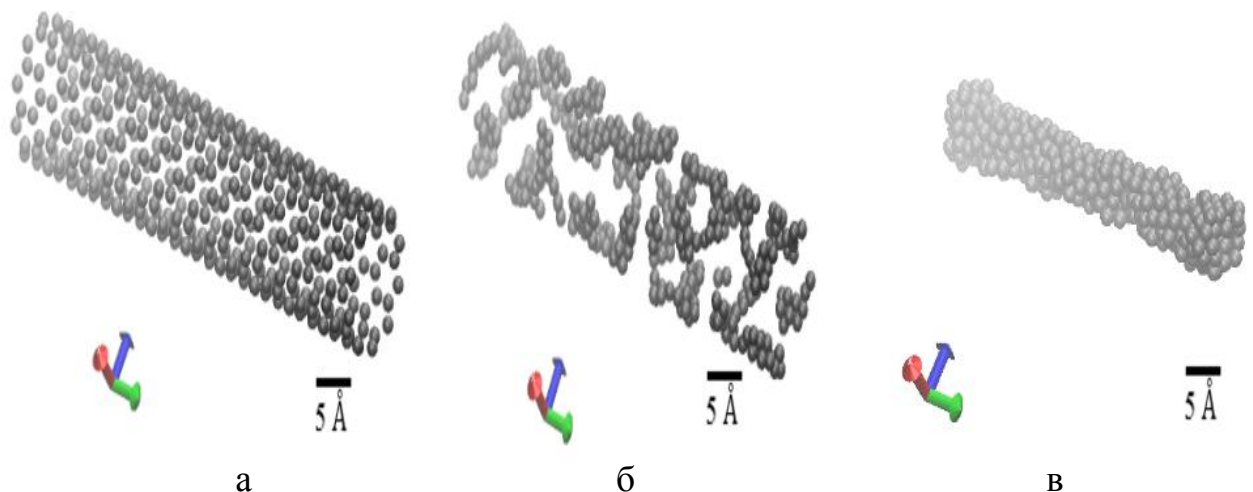
Було змодельовано срібну нанотрубку трьома різними способами. Першою була нанотрубка, отримана шляхом зкручування площини атомів срібла з графеноподібною структурою розташування атомів. Її діаметр складав 20 Å. Це був моношар, аналогічний карбоновим нанотрубкам.

Друга була отримана зкручуванням площини з кубічною структурою срібла. Товщина цієї площини становила чотири моноатомних шари (1,5 періоди ґратки $a = 4,09 \text{ Å}$), що відповідає приблизно 6 Å. Внутрішній діаметр цієї нанотрубки 100 Å.

Третя була отримана шляхом видалення внутрішнього об'єму із циліндру, що мав ГЦК кристалічну огранку. Зовнішній діаметр цієї нанотрубки становив 41 Å, а внутрішній – 23 Å.

3.1 Моделювання вуглецевоподібної срібної нанотрубки

Як зазначалося раніше, нанотрубка була отримана шляхом зкручування графеноподібною площини з гексагональною структурою (рисунок 3.1, а).



а – вихідний стан; б, в – після 3 пс моделювання

Рисунок 3.1 – Графеноподібна срібна нанотрубка

Якщо відстань між найближчими атомами була наближена до періоду ґратки срібла – 4,09 Å, то структура руйнувалася з утворенням багатьох невеликих кластерів срібла (рисунок 3.1, б). Коли відстань між найближчими атомами була менша, приблизно $a\sqrt{2}/2$, що дорівнює 2,89 Å (відстань між атомами срібла в ГЦК ґратці у напрямку найщільнішого пакування), структура СНТ перетворювалась у структуру срібної нанонитки (рисунок 3.1, в). Моделювання показало, що не існує такої рівноважної відстані між найближчими атомами, яка б забезпечувала стабільну структуру графеноподібної СНТ. Програмна реалізація наведена в додатку А.

3.2 Моделювання срібної нанотрубки скручуванням площини з кубічною структурою

Цей тип нанотрубки стабільний, якщо його внутрішній діаметр становить 100 Å та більше (рисунок 3.2).

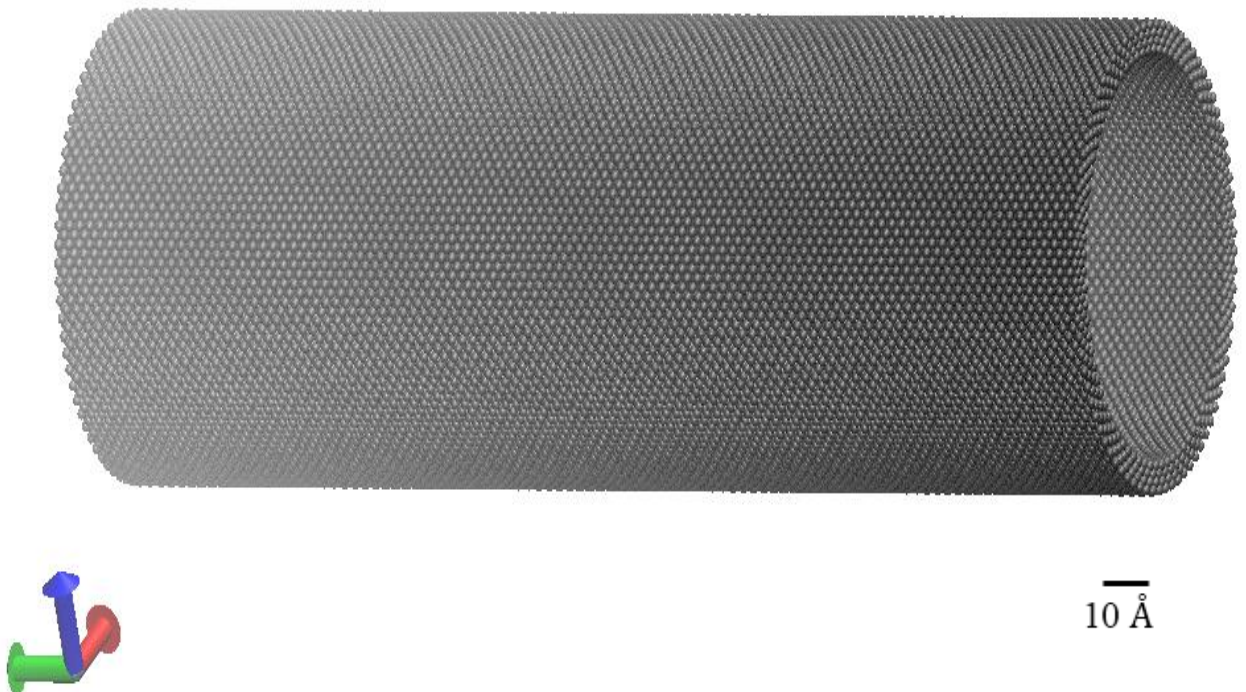
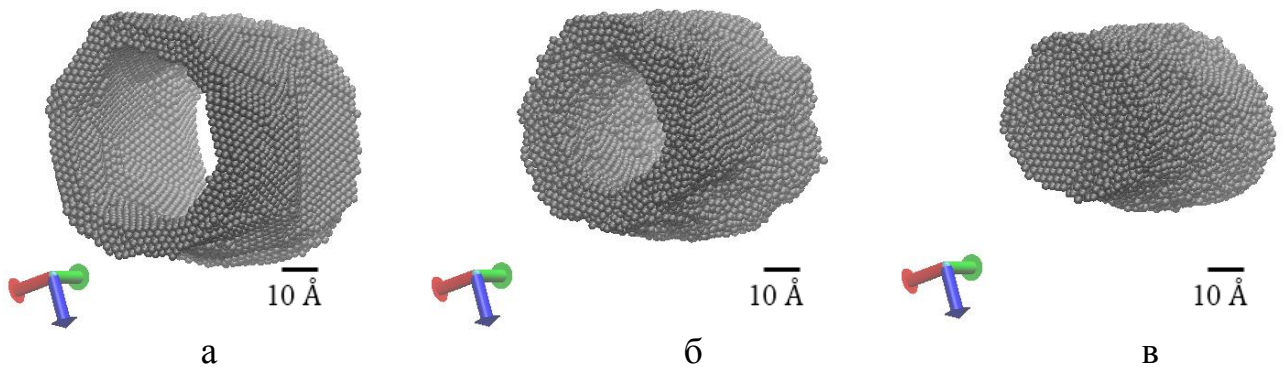


Рисунок 3.2 – Срібна нанотрубка, отримана скручуванням площини з кубічною структурою

Дослідження показало, що така структура стабільна лише коли стінка складається з чотирьох атомних площин. Якщо площин більше або менше, структура руйнується за рахунок напружень, викликаних наявністю радіусу кривизни в площині стінки.

У процесі релаксації, протягом 0,09 нс, циліндрична поверхня нанотрубки деформується, утворюючи складний багатогранник (рисунок 3.3, а) на зовнішніх і внутрішніх поверхнях.

З точки зору температурної стабільності, ця наноструктура стабільна до 700 К. При підвищених температурах (рисунок 3.3, б, в) внутрішня поверхня руйнується, і порожнина зникає. Програмна реалізація наведена в додатку Б.



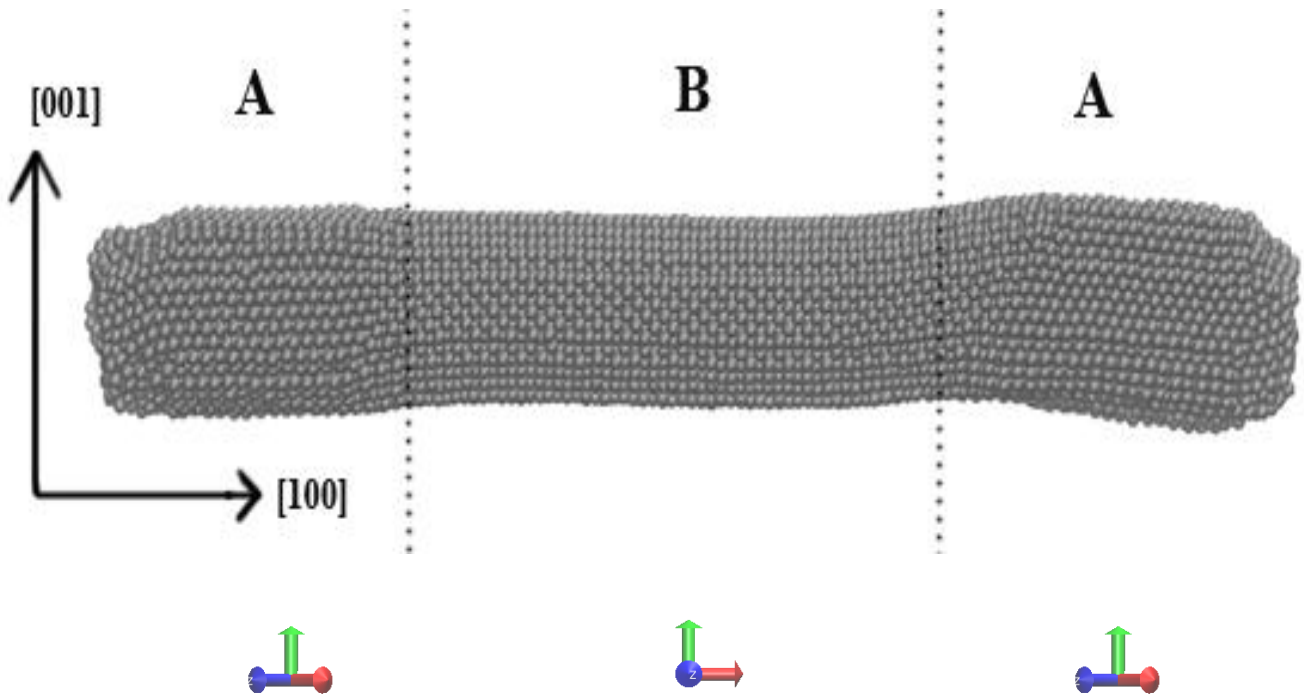
а – при 200 К протягом 0,09 нс; б – при 800 К протягом 0,03 нс;

в – при 800 К протягом 0,06 нс

Рисунок 3.3 – Срібна нанотрубка, отримана скручуванням площини з кубічною структурою (тут показано лише лівий кінчик нанотрубки)

3.3 Моделювання срібної нанотрубки шляхом видалення атомів з циліндра з ГЦК кристалічною огранкою

Була змодельована срібна нанотрубка, вісь якої збігається з напрямком [100] ГЦК ґратки. Виявилось, що ця структура нестабільна. На рисунку 3.4 видно, що структура нанотрубок деформується, а атоми зміщуються таким чином, що вісь збігається з напрямком [110] ГЦК ґратки, який є напрямом найщільнішого пакування для такої структури. Отримана конфігурація стабільніша. Програмна реалізація наведена в додатку В.



А – зміна орієнтації ґратки, напрямок $[110]$ ГЦК ґратки збігається з віссю нанотрубки; В – вихідний стан, вісь збігається з напрямком $[100]$ ГЦК ґратки

Рисунок 3.4 – Зміна кристалографічної структури нанотрубки від кінців до центру

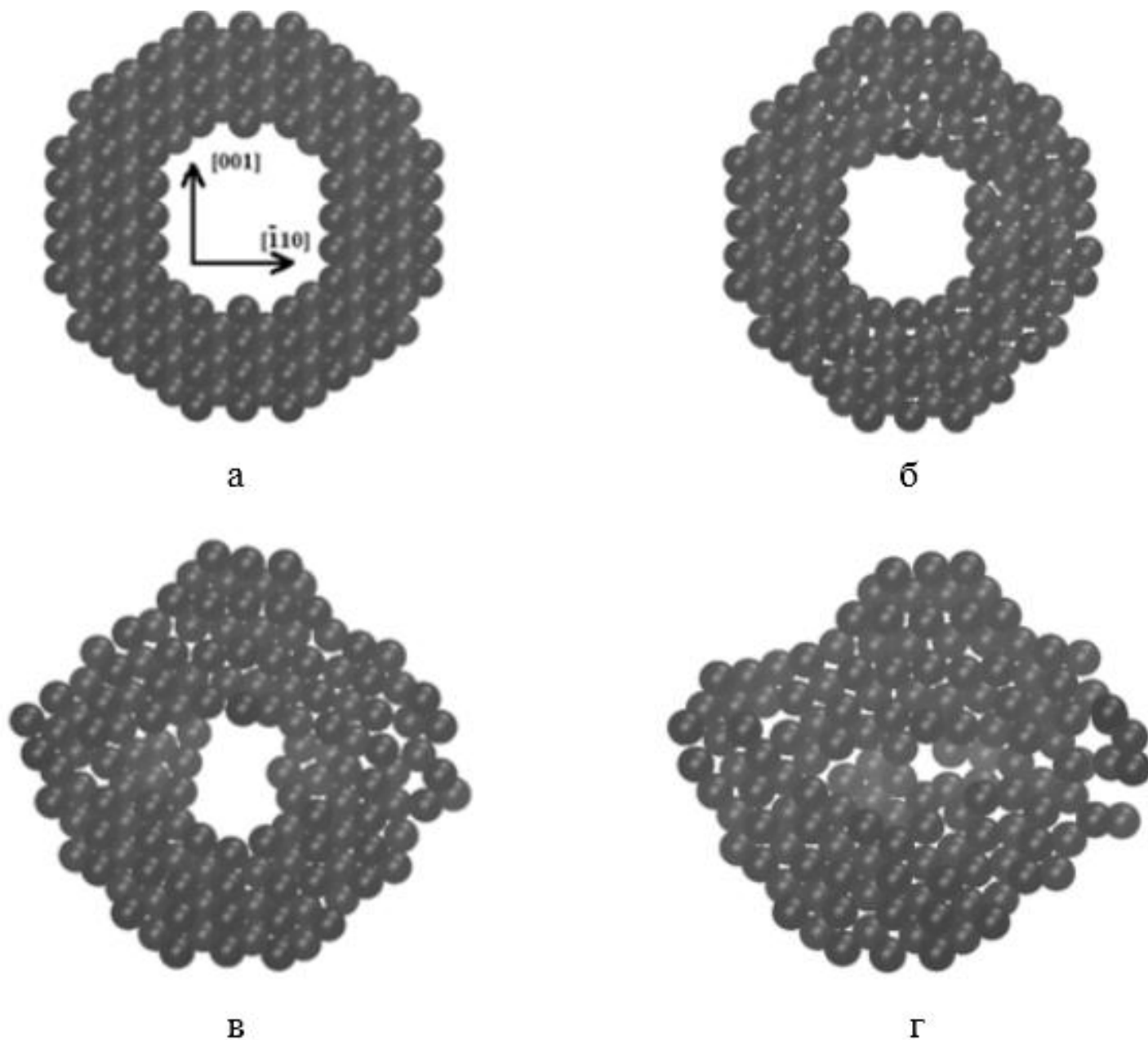
Якщо напрямок осі нанотрубок збігається з напрямком $[100]$ ГЦК ґратки, то ця конфігурація структури при температурі 300 К не є стабільною, тому для цієї і більш високих температур недоцільно вивчати його властивості.

3.4 Вивчення термостійкості нанотрубки срібла з напрямком осі $[110]$

Щоб дослідити термостійкість нанотрубки срібла, структура була релаксована при різних температурах до 600 К.

При температурі 550 К (що відповідає приблизно половині температури плавлення срібла), вільні кінці нанотрубки закриваються, зберігаючи порожнину всередині наноструктури. Процес закриття показаний на

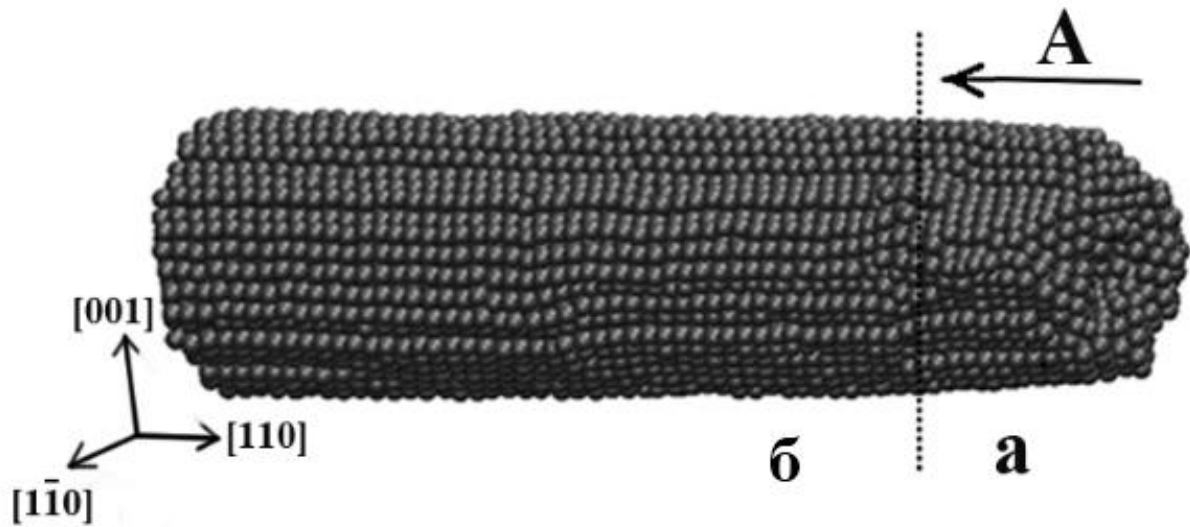
рисунку 3.5. Ця структура зберігається протягом усього часу моделювання (0,12 нс). Цей ефект виникає через наявність вільних зв'язків атомів, що розташовані на кінцях нанотрубки. Закриття вільних кінців нанотрубки зменшує поверхневу енергію цієї наноструктури, роблячи її більш стабільною.



а – початковий стан (до релаксації); б – після релаксації протягом 15 пс;
в – після релаксації протягом 22,5 пс; г – після релаксації протягом 30 пс

Рисунок 3.5 – Вибіркові знімки (після статичної релаксації) закриття вільного кінця нанотрубок при температурі 550 К

При температурі 600 К порожнина в структурі нанотрубок зникає. Процес захопування показаний на рисунку 3.6.



а – зхлопнута область; б – ще не деформована область (зберігається порожнина всередині)

Рисунок 3.6 – Зхлопування структури срібної нанотрубки при температурі 600 К (показана лише права половина нанотрубки)

Напрямок А показує напрямок закриття нанотрубки. Спочатку кінці нанотрубки виглядають, як на рисунку 3.5, після цього внутрішня поверхня руйнується в напрямку А з швидкістю $1130 \text{ м/с} \pm 40 \text{ м/с}$ (точність визначення зумовлена тим, що запис положень атомів відбувався лише кожні 10 кроків по часу). Швидкість звуку в сріблі 1600 м/с. Така деформація вказує на нестабільність структури при цій температурі.

3.5 Дослідження коефіцієнта лінійного теплового розширення нанотрубки срібла

В цьому дослідженні вісь срібної нанотрубки збігається з напрямком $[110]$ ГЦК ґратки. Залежність коефіцієнту лінійного термічного розширення (КЛТР) нанотрубок від температури показана на рисунку 3.7 і порівнюється з КЛТР срібних волокон та експериментальними даними [55].

Волокно (циліндр без порожнини) складалося з 6228 атомів, його довжина становила 100 Å, діаметр 36 Å. Вісь волокон була побудована у напрямку найщільнішого пакування [110] ГЦК ґратки, як і у нанотрубки. Періодичні граничні умови були встановлені на кінцях волокна (у напрямку вісь волокна).

Під час моделювання волокна нагрівають в інтервалі температур від 50 К до 850 К (0,7 температури плавлення) з кроком в 100 К і релаксувалися після кожного нагрівання. Потім на кожному етапі релаксації були розраховані рівноважні параметри ґратки структури, як це було зроблено з описаним раніше зразком. В цій моделі враховано вплив поверхні на поведінку зразків.

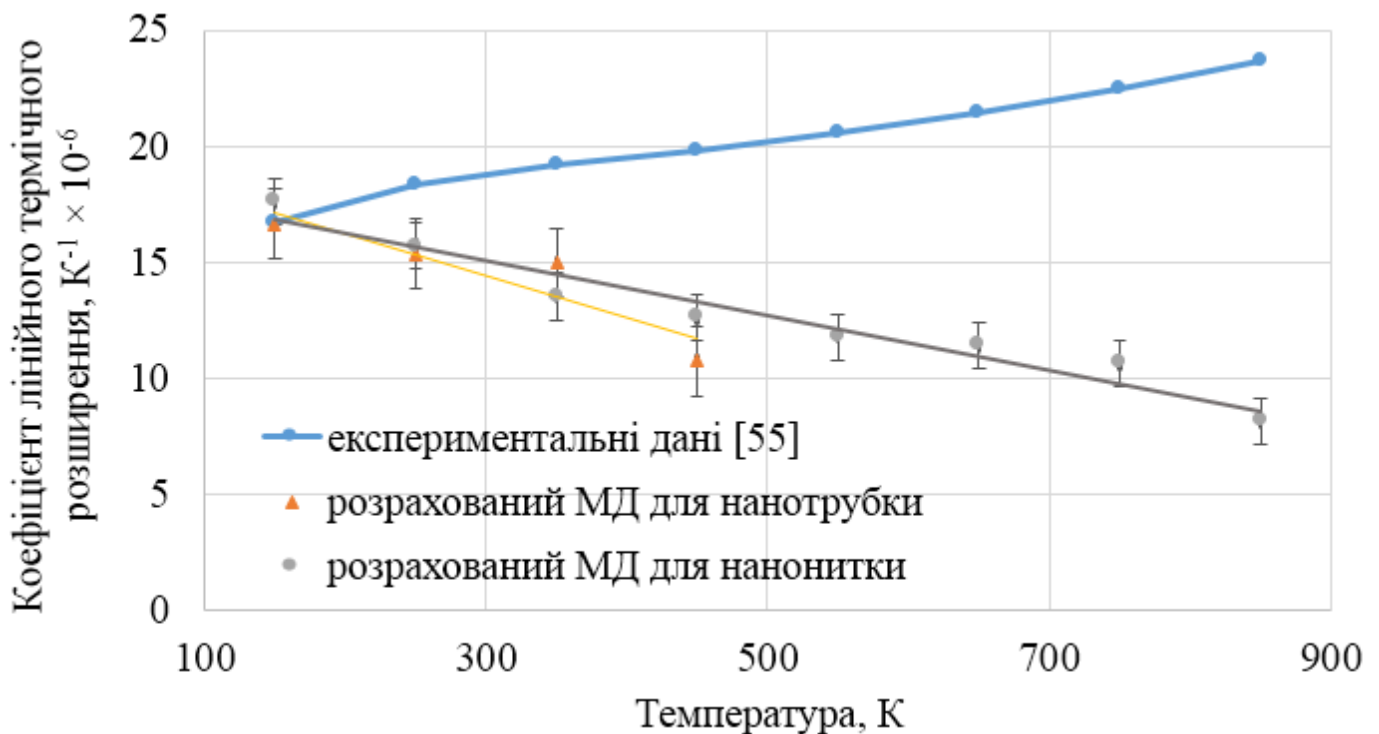


Рисунок 3.7 – Залежність коефіцієнта лінійного термічного розширення від температури для срібної нанотрубки та срібної нанонитки

Зниження КЛТР нанотрубки та волокна з температурою в порівнянні з експериментальними даними може бути пов'язане з невеликими розмірами зразків і з впливом поверхні. КЛТР для нанотрубки швидше зменшується, ніж КЛТР для волокна, оскільки нанотрубка має додаткову поверхню у порівнянні

з волокном. 49 % атомів у нанотрубці знаходяться на поверхні. Для волокна частина атомів на поверхні становить 25 %.

При температурах вище 450 К нанотрубки із зазначеними розмірами та структурою кристалів нестабільні та спостерігаються структурні перетворення, які впливають на КЛТР. Через це не можна адекватно провести розрахунки КЛТР для нанотрубок при температурах вище 450 К.

3.6 Дослідження механічних властивостей срібних нанотрубок

СНТ була змодельована як циліндр довжиною 16 нм, що складається з 7800 атомів. Поверхня циліндру має кристалографічну ГЦК огранку. Для отримання структури нанотрубки було видалено внутрішню частину циліндру. Утворена нанотрубка має внутрішній діаметр 1,6 нм та зовнішній 3,7 нм, враховуючи огранку кристалу.

Механічні властивості досліджувались використовуючи схему одновісного розтягу. Для симуляції навантаження атоми на кінцях СНТ зафіксувалися в одному положенні та з певним періодом часу переміщувалися в напрямку розтягу. Швидкість деформації була постійною та складала $1,25 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$.

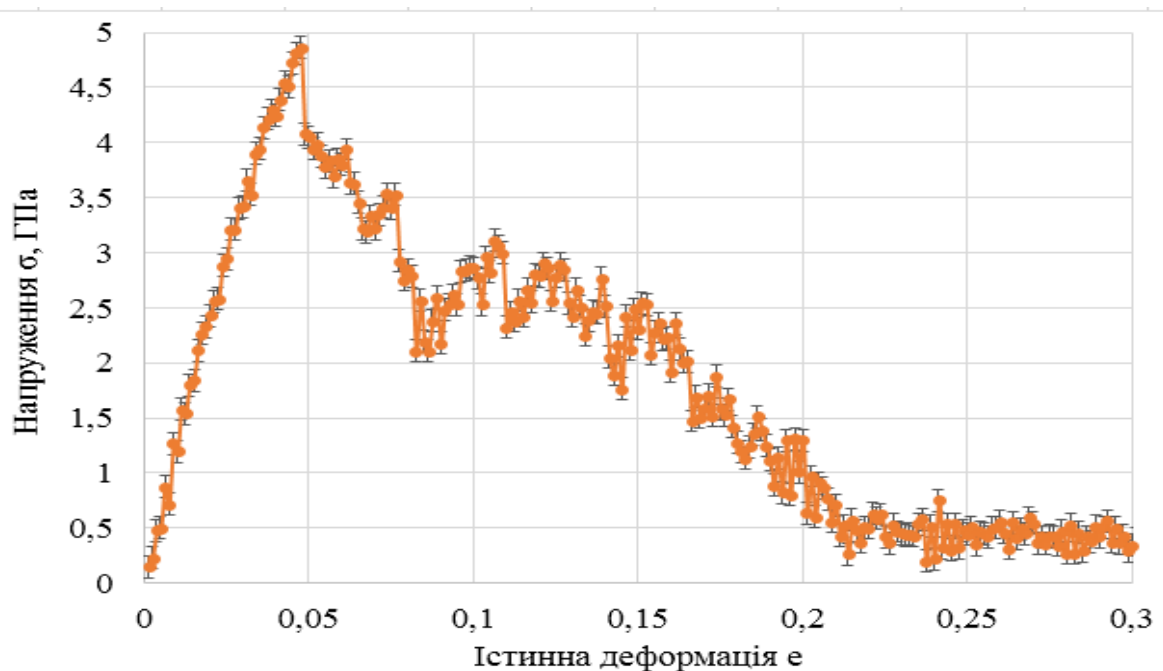


Рисунок 3.8 – Крива напруження-деформація для СНТ (300 К)

Згідно з результатами комп'ютерного моделювання, розраховуючи напруження в системі у процесі розтягу при температурі 300 К, було побудовано криву напруження-істина деформація для СНТ (рисунок 3.8). Програмна реалізація наведена в додатку Г.

Нестабільність ґратки в межах локальної області наночастинки виступає критичним чинником, який обмежує рівень напружень, що можуть бути досягнуті у наночастинках. Ця локальна нестабільність спричиняє утворення дефектів наночастинки (рисунок 3.9).

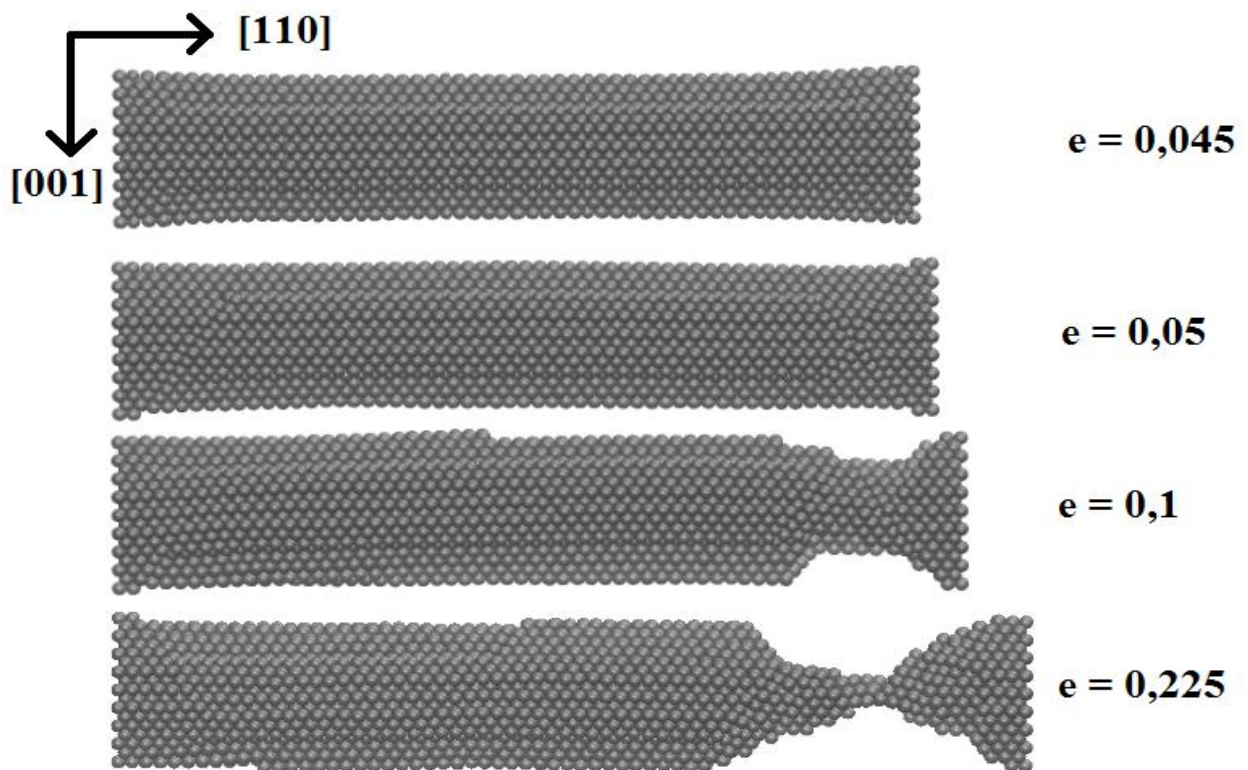


Рисунок 3.9 – Структура СНТ під дією одновісного навантаження в напрямку [110]

В результаті локальної нестабільності ґратки на поверхні СНТ утворюються дислокації. Подальша деформація СНТ реалізується рухом цих дислокацій. Утворені дислокації мають системи ковзання $(\bar{1} \bar{1} \bar{1})$ $[\bar{1} \bar{1} 2]$ та $(\bar{1} \bar{1} 1)$ $[112]$. Такі системи ковзання характерні для часткових дислокацій Шоклі в ГЦК ґратці. Використовуючи візуальне спостереження було

визначено швидкість руху дислокації в напрямку $[\bar{1}\bar{1}2]$, що становить $1240 \text{ м/с} \pm 40 \text{ м/с}$ (точність визначення зумовлена тим, що запис положень атомів відбувався лише кожні 10 кроків по часу). Швидкість звуку в сріблі 1600 м/с .

Використовуючи криву напруження-деформації було розраховано модуль Юнга, межу міцності на розтяг та максимальну пружню деформацію СНТ при 300 К .

Межу міцності розраховували як максимаьне напруження, для якого ще виконується закон Гука. Межа міцності на розтяг СНТ становить $4,9 \text{ ГПа} \pm 0,1 \text{ ГПа}$. Похибка розрахунку з'явилася через те, що кожна точка, представлена на діаграмі, являє собою усереднене значення напруження. Згідно з теорією похибок було розраховано похибку визначення середнього арифметичного значення з вибірки.

Модуль Юнга було визначено як тангенс кута нахилу апроксимованої методом найменших квадратів прямої, що будувалася в області пружньої деформації, де виконується закон Гука. Модуль Юнга СНТ становить $95,7 \text{ ГПа} \pm 2 \text{ ГПа}$. Похибка вимірювання знаходилась як середньоквадратична похибка розрахунку коефіцієнтів рівняння прямої використовуючи метод найменших квадратів.

Максимальну пружню деформацію СНТ знаходили як деформацію, що відповідає границі міцності. Максимальна пружня деформація СНТ становить $0,0475$ ($4,75 \%$).

3.7 Порівняння механічних властивостей з літературними даними

Автори [49], використовуючи атомно-силову мікроскопію, проводили випробування срібних нанониток п'ятикутної геометрії на згин. Вони розраховали значення модуля Юнга для нанониток різного діаметру (рисунок 3.10) до і після відпалу. Також була визначена середня межа міцності на згин.

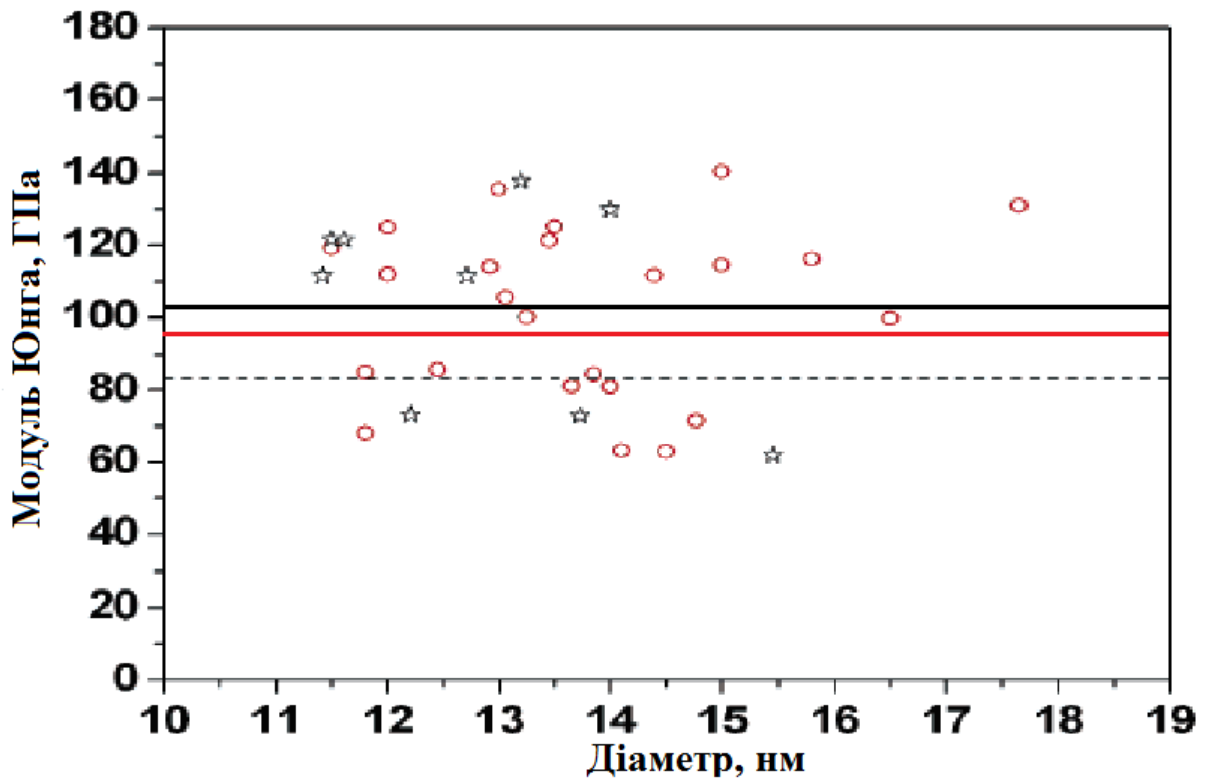


Рисунок 3.10 – Графік залежності модуля Юнга срібних нанониток від їх діаметру [49]

На рисунку 3.10 червоними кружочками позначений модуль Юнга срібних нанониток до відпалу, а чорними зірочками – після. Чорна пунктирна лінія показує середнє значення модуля Юнга для масивного срібла (83 ГПа). Усереднене значення модуля Юнга, визначене авторами [49], для срібних нанониток п'ятикутної геометрії, зображене чорною лінією (102 ГПа \pm 23 ГПа). Червона лінія ілюструє значення модуля Юнга, розрахованого в даній дипломній роботі методом МД (95,7 ГПа \pm 2 ГПа).

Середня межа міцності на згин становила 7,3 ГПа \pm 1 ГПа.

Модуль Юнга СНТ на 6 % менший від срібних нанониток та на 15 % більший від масивного срібла.

Автори [45], використовуючи методику МД, дослідили розмірний ефект межі міцності на розтяг срібних нанониток (рисунок 3.11) з різною геометричною формою поперечного перерізу (п'ятикутний, ромбічний і усічений ромбічний).

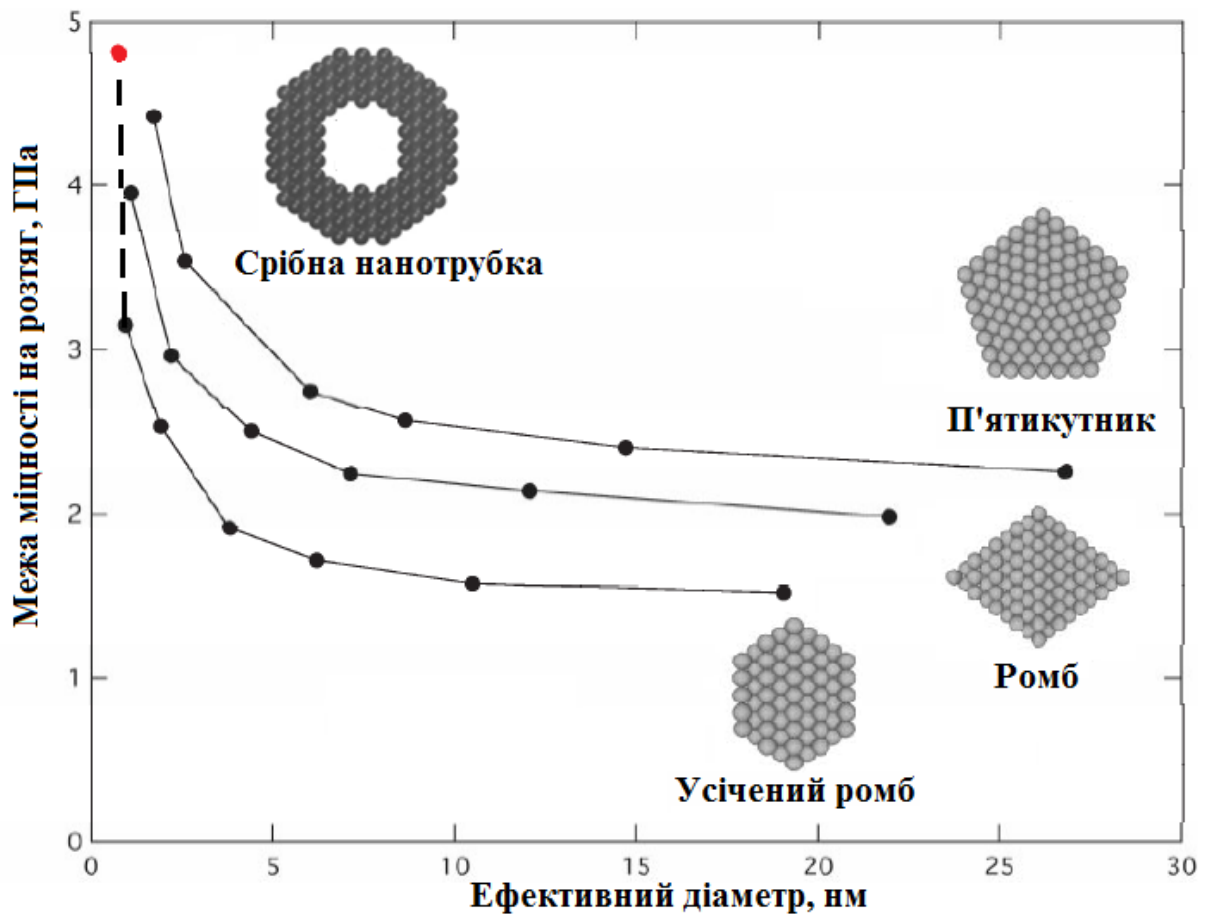


Рисунок 3.11 – Розмірний ефект межі міцності на розтяг срібних нанониток з різною геометричною формою поперечного перерізу [45]

Ефективним діаметром називається такий діаметр кола, площа якого ідентична площі поперечного перерізу досліджуваної структури без порожнин. Відповідно до цього, якщо досліджувана структура має порожнину, то в якості ефективного діаметру використовують значення товщини стінки цієї фігури. Отже, ефективний діаметр СНТ становить 0,8 нм.

На рисунку 3.11 межа міцності на розтяг змодельованих в даній роботі СНТ зображена червоним кружечком. Залежно від структури, всі нанонитки мають різні рівні міцності. Розрахована межа міцності нанониток показує, що крім діаметра поперечного перерізу міцність нанониткових матеріалів сильно залежить від структури.

РОЗРОБЛЕННЯ СТАРТАП-ПРОЕКТУ

4.1 Опис ідеї проекту

Ідея проекту полягає у наданні потенційним клієнтам послуг, що забезпечують розробку, використовуючи методику МД, ефективних та енергозберігаючих технік синтезу СНТ з необхідними властивостями та високим ступенем відтворюваності (табл. 4.1).

Таблиця 4.1 – Опис ідеї стартап-проекту

Зміст ідеї	Напрямки застосування	Вигоди для користувача
Розробка дешевших технологій синтезу СНТ з наперед відомими властивостями	Медицина	Зменшення вартості продукції, до складу якої входять СНТ
	Сонячна енергетика	Збільшення відсотку поглинання енергії сонячних панелей
	Наукові дослідження	Збільшення ступеня контролю необхідних властивостей СНТ

СНТ виступають важливим компонентом багатьох новітніх технологій та систем, для якісної роботи яких важливим чинником є повторюваність та чітка визначеність форми, розмірів і відповідно властивостей СНТ.

В даному проекті пропонується методика розробки технологій синтезу, які зможуть з високою точністю та ступенем повторюваності отримувати СНТ з необхідними властивостями.

Аналіз потенційних техніко-економічних переваг, згідно з методичними вказівками [56], ідеї, порівняно із пропозиціями конкурентів, наведено в табл. 4.2.

Конкурент 1 – компанія «First Solar», США. Займається розробкою та виробництвом модулів фотовольтаїки, забезпеченням устаткування для компаній даного профілю.

Конкурент 2 – компанія «Yurui Chemical», Китай. Дана компанія займається виготовленням та продажом наночастинок платини, золота, срібла, паладію, рутенію, родію та іридію.

Конкурент 3 – ООО "НАНОСВІТ ОРГАНІК", Україна. Компанія займається розробкою косметики та засобів гігієни на основі наночастинок срібла.

Таблиця 4.2 – Визначення сильних, слабких та нейтральних характеристик ідеї проекту

№ п/п	Техніко-економічні характеристики ідеї	Товари/концепції конкурентів			
		Мій проект	Конкурент 1	Конкурент 2	Конкурент 3
Технічні показники					
1	Екологічність (обсяг відходів)	висока	середня	середня	середня
		S	N	N	N
2	Кількість компонентів, з яких може складатись система	низька	середня	висока	середня
		W	N	S	N
3	Простота реалізації	простий	складний	простий	складний
		S	W	S	W
Економічні показники					
4	Вартість обладнання	середня	висока	висока	висока
		N	W	W	W
6	Енергоспоживання	низьке	високе	високе	високе
		S	W	W	W
7	Технологічна собівартість	низька	висока	середня	середня
		S	W	N	N

* W (слабка сторона), N (нейтральна сторона), S (сильна сторона)

Отже, дана методика має певні переваги відносно конкурентів та є доцільною для реалізації на підприємствах і в інших виробничих чи наукових структурах.

4.2 Технологічний аудит ідеї проекту

Технологічний аудит технологій, за допомогою яких можна реалізувати ідею проекту наведено в табл. 4.3.

Таблиця 4.3 – Технологічна здійсненність проекту

Технології її реалізації	Наявність технологій	Доступність технологій
Технологія 1 (мікроелектронна обчислювана машина)	Технологія існує	Доступна
Технологія 2 (супер електронна обчислювана машина)	Технологія існує	Недоступна
Технологія 3 (квантовий комп'ютер)	Технологія знаходиться на етапі розробки	Недоступна

За результатами аналізу таблиці 4.3 для реалізації ідеї проекту була вибрана технологія мікроелектронної обчислюваної машини, що задовольняє умовам проекту.

4.3 Аналіз ринкових можливостей запуску стартап-проекту

Визначено потенційні групи клієнтів, їх характеристики, та зформовано орієнтовний перелік вимог до товару для кожної групи.

Потенційні групи клієнтів, їх характеристики та вимоги наведено в табл. 4.4.

Таблиця 4.4 – Характеристика потенційних клієнтів стартап-проекту

Потреба, що формує ринок	Цільова аудиторія	Відмінності у поведінці різних потенційних груп клієнтів	Вимоги споживачів до технології
Потреба постійного вдосконалення методик синтезу СНТ	Підприємства, що займаються виготовленням срібних наночастинок або продукції на їх основі	Стандарти, Технічні регламенти, Специфікації, Обсяги закупок, Умови експлуатації	Собівартість, Швидкість виконання, Повторюваність результатів

Дані таблиці 4.4 свідчать про наявну потребу на ринку в ідеї, що пропонується. Наявна цільова аудиторія, яку може зацікавити дана технологія, і ця технологія задовольняє економічні та технологічні вимоги споживачів.

Проаналізовано фактори загроз (табл. 4.5) та фактори можливостей (табл. 4.6), що впливають на ринкове впровадження проекту.

Таблиця 4.5 – Фактори загроз

Фактор	Зміст загрози	Можлива реакція компанії
Нестабільність політичної та економічної ситуації	Зменшення фінансування та попиту	Застосування короткострокових стратегій. Приймання участі у програмах, в тому числі міжнародних, задля залучення додаткових інвестицій.
Вихід на ринок нових конкурентноспроможних компаній	Зменшення попиту	Застосування нових стратегій конкуренції. Пошук дешевших технологічних рішень

Таблиця 4.6 – Фактори можливостей

Фактор	Зміст можливості	Можлива реакція компанії
Можливість виходу на міжнародний ринок	Продукт не має обмежень для використання за кордоном	Застосування стратегій спрямованих на вихід на міжнародний ринок. Приймання участі у програмах, в тому числі міжнародних, задля залучення додаткових інвестицій.
Зменшення собівартості товару	Збільшення технологічної бази та зменшення часу пошуку технологічних рішень	Зменшення ціни на послуги для отримання переваги над конкурентами

Запропонована технологія задовольняє потреби потенційних клієнтів та має переваги над конкурентними технологіями.

ОХОРОНА ПРАЦІ ТА БЕЗПЕКА В НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЯХ

Законодавство України про охорону праці складається з Закону України «Про охорону праці», Кодексу законів про працю України, Закону України "Про загальнообов'язкове державне соціальне страхування від нещасного випадку на виробництві та професійного захворювання, які спричинили втрату працездатності".

Основоположним документом в галузі охорони праці є Закон України «Про охорону праці» (ст. 13, ст.14 та ст. 15), який визначає основні положення щодо реалізації конституційного права працівників на охорону їх життя і здоров'я у процесі трудової діяльності [57].

Охорона праці – система правових, соціально-економічних, організаційно-технічних, санітарно-гігієнічних і лікувально-профілактичних заходів та засобів, спрямованих на збереження життя, здоров'я і працездатності людини в процесі трудової діяльності [57].

Виходячи з того, що в житті, а тим більше у виробничому процесі, абсолютної безпеки не існує, нерозумно було б вимагати від реального виробництва повного викорінення травматизму, виключення можливості будь-якого захворювання. Але реальним і розумним є ставити питання про зведення до мінімуму впливу об'єктивно існуючих виробничих небезпек. Цю задачу вирішує охорона праці.

Метою даного розділу є аналіз небезпечних та шкідливих чинників, які можуть виникнути в процесі дослідження температурної стійкості та механічних властивостей срібних нанотрубок, умов, що можуть спричинити травмування організму людини і розробка заходів та засобів щодо їх усунення.

При виконанні даної НДР необхідно проаналізувати наступні чинники: мікроклімат в приміщенні, освітлення, електричний струм, випромінювання від комп'ютера, шум та вібрації, пожежонебезпека.

5.1 Аналіз параметрів приміщення та мікроклімату

Дослідження виконувалось в Інституті металофізики ім. Г. В. Курдюмова у відділі № 50 Фізики атомних транспортних процесів, лабораторія № 112. Розміри приміщення наведено в табл. 5.1.

Таблиця 5.1 – Розміри робочого приміщення

Параметр	Розмір, м
Розміри лабораторії	
Довжина, а	6
Ширина, b	4
Висота, с	4
Розміри вікон	
Ширина	1,25
Висота	2,5

Таким чином площа та об'єм приміщення становлять:

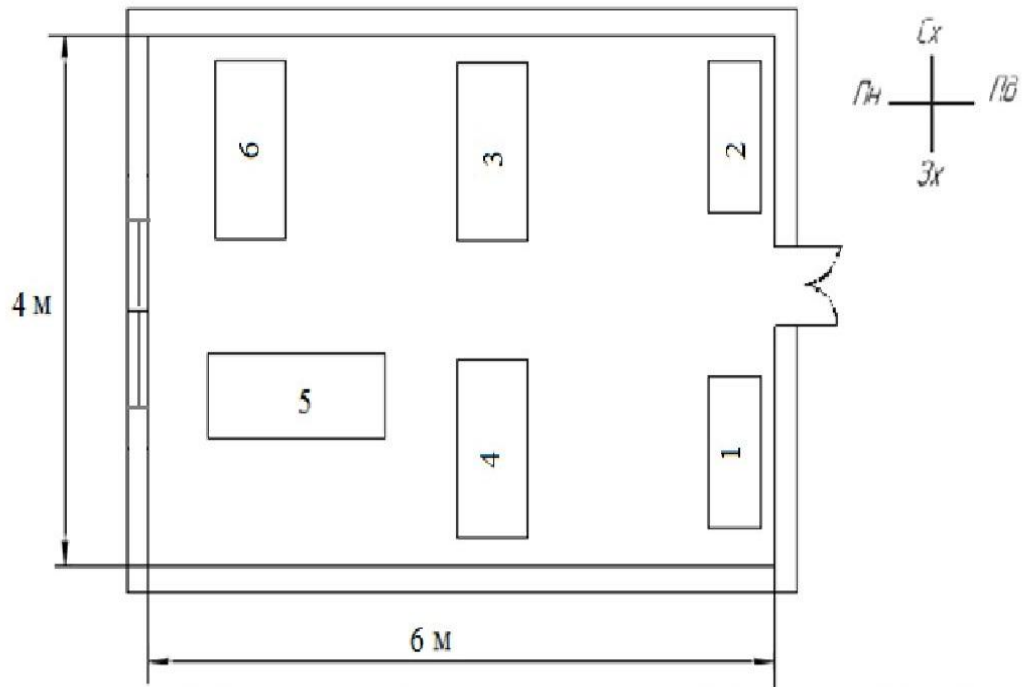
$$\text{Площа: } S = a \times b = 6 \times 4 = 24 \text{ м}^2;$$

$$\text{Об'єм: } V = a \times b \times c = 6 \times 4 \times 4 = 96 \text{ м}^3.$$

Схематичне зображення лабораторії, а також розташування предметів та обладнання показано на рис. 5.1.

Згідно з ДСанПіН 3.3.2 – 007 – 98, на одну людину повинно припадати не менше 6 м² площі та 20 м³ об'єму [58].

Для нашого приміщення, в якому працюють троє людей, ці показники становлять:



1,2 – шафи; 3 – робоче місце керівника НДР; 4,5 – столи; 6 – комп'ютер
(робоче місце)

Рисунок 5.1 – Схема лабораторного приміщення № 112

Площа, що приходить на одну людину: $S^1 = 8 \text{ м}^2$;

Об'єм, що приходить на одну людину: $V^1 = 32 \text{ м}^3$.

Отже, дані показники задовольняють норму.

Для забезпечення оптимального мікроклімату «Санітарні норми мікроклімату виробничих приміщень» ДСН 3.3.6.042–99 встановлюють оптимальну і допустиму температури, відносну вологість та швидкість руху повітря в робочій зоні в залежності від пори року та категорії важкості робіт [59].

Згідно з ДСН 3.3.6.042-99 категорія важкості робіт – Іб (табл. 5.2). До цієї категорії належать роботи, що виконуються сидячи, стоячи або пов'язані з ходінням та супроводжуються деяким фізичним напруженням. Витрати енергії при виконанні робіт такої важкості складають 141 Вт – 175 Вт (121 ккал/год – 150 ккал/год.).

Таблиця 5.2 – Параметри мікроклімату в лабораторному приміщенні № 112

Період року	Температура повітря, °С		Відносна вологість, %		Швидкість руху повітря, м/с	
	Виміряна	Допустима	Виміряна	Допустима	Виміряна	Допустима
Холодний	21	24...20	45	75	0,1	не більше 0,2
Теплий	23	28...21	50	55 при 28°С; 60 при 27°С; 65 при 26°С; 70 при 25°С; 75 при 24°С і нижче	0,2	0,3...0,1

Отже параметри мікроклімату даного виробничого приміщення відповідають допустимим санітарним нормам, встановлених для постійних робочих приміщень та наведених у таблиці 2 ДСН 3.3.6.042–99 [59].

5.2 Аналіз освітленості приміщення

Залежно від джерел світла освітлення може бути природним, що створюється прямими сонячними променями та розсіяним світлом небосхилу; штучним що створюється електричними джерелами світла та суміщеним, при якому недостатнє за нормами природне освітлення доповнюється штучним.

У лабораторії здійснюється природне бокове освітлення. Зовнішнє освітлення при небі вкритому хмарами становить 10000 лк.

Відстань від вікна до місця основної роботи складає 2 м. Робота з ПК відноситься до роботи високої точності. Освітлення лабораторії суміщене (природне та штучне) і відповідає встановленому ДБН В.2.5.28-2006 [60]. Для

місцевого освітлення використовуються лампи розжарювання, для загального – люмінесцентні ЛБ-40 (24 одиниці у лабораторії).

5.2.1 Розрахунок природного освітлення

Основне розрахункове рівняння при боковому природному освітленні має вигляд [60]:

$$\frac{100 \cdot S_0}{S_n} = \frac{(e \cdot K_3 \cdot \eta_0 \cdot K_{\text{буд}})}{\tau_0 \cdot r_1}, \quad (5.1)$$

де e – фактичне значення КПО;

S_0 – площа вікон;

S_n – площа підлоги;

K_3 – коефіцієнт запасу, який приймається згідно табл. 3 [60]. Для приміщень з нормальними умовами середовища (кабінети, навчальні, житлові кімнати, лабораторії, читальні зали) дорівнює 1;

η_0 – світлова характеристика вікон (визначається з табл. Л.1 [60]);

τ_0 – загальний коефіцієнт світлопроникнення для бокового освітлення;

$K_{\text{буд}}$ – коефіцієнт, який враховує затінювання вікон протилежними будинками, визначається з табл. Л.2 [60];

r_1 – коефіцієнт, який враховує підвищення КПО при боковому освітленні завдяки світлу, відбитого від поверхонь приміщення.

В даному випадку $\eta_0 = 34$ тому, що відношення довжини до глибини приміщення: $4/6 = 0,6$ (найближче 0,5). Відношення глибини приміщення до його висоти від рівня умовної робочої поверхні до верху вікна: $6/2,5 = 2,4$; висота верху вікна відносно робочої поверхні 2,5 м. Умовна робоча поверхня на рівні підвіконника.

τ_0 визначається за формулою:

$$\tau_0 = \tau_1 \times \tau_2 \times \tau_3 \times \tau_4, \quad (5.2)$$

де τ_1 – коефіцієнт світлопропускання матеріалу, який визначається з табл. Л.3. В даному випадку 0,8, оскільки в лабораторії склопакет;

τ_2 – коефіцієнт, який враховує втрати світла за рахунок віконних перетинів, який визначається за табл. Л.3 [60]. В даному випадку 0,7, оскільки рама дерев'яна, спарена;

τ_3 – коефіцієнт, який враховує втрати світла в несучих конструкціях і визначається за табл. Л.3 [60] (при боковому освітленні $\tau_3 = 1$);

τ_4 – коефіцієнт, який враховує втрати світла за рахунок сонцезахисних пристроїв і визначається з табл. Л.4 [60]. Оскільки в лабораторії присутні регулюючі жалюзі, що складаються, то – 1.

Отже, $\tau_0 = 0,56$.

$K_{\text{буд}}$ в даному випадку становить 1,2 тому, що:

$$P/H_{\text{буд}} = 30/18 = 1,7, \quad (5.3)$$

де P – відстань між двома будинками;

$H_{\text{буд}}$ – висота розміщення карнизу протилежного будинку над підвіконником вікна, що розглядається.

Значення коефіцієнта r_1 визначається за табл. Л.5 [60].

$$\rho_{\text{стелі}} = 80\%$$

$$S_{\text{стелі}} = 24 \text{ м}^2$$

$$\rho_{\text{стін}} = 50\%$$

$$S_{\text{стін}} = 76,88 \text{ м}^2$$

$$\rho_{\text{підлоги}} = 30\%$$

$$S_{\text{підлоги}} = 24 \text{ м}^2$$

$$\rho_{\text{ср}} = \frac{\rho_{\text{стелі}} \cdot S_{\text{стелі}} + \rho_{\text{стін}} \cdot S_{\text{стін}} + \rho_{\text{підлоги}} \cdot S_{\text{підлоги}}}{S_{\text{стелі}} + S_{\text{стін}} + S_{\text{підлоги}}}, \quad (5.4)$$

$$\rho_{\text{ср}} = \frac{0,8 \times 24 + 0,5 \times 76,88 + 0,3 \times 24}{24 + 76,88 + 24} = 0,52 \approx 0,5$$

Відношення відстані розрахункової крапки від зовнішньої стіни до глибини приміщення дорівнює 0,33.

Згідно таблиці Л.5 [60]: $r_1 \sim 1,2$. З рівняння (5.1) знайдемо e :

$$e = \frac{100 \cdot S_0 \cdot \tau_0 \cdot r_1}{S_n \cdot K_3 \cdot \eta_0 \cdot K_{\text{буд}}}, \quad (5.5)$$

Площа вікна дорівнює: $S_{\text{вікна}} = a \times b = 1,25 \times 2,5 = 3,125 \text{ м}^2$. Підставивши всі значення до формули (5.5), отримаємо:

$$e = \frac{100 \cdot 3,125 \cdot 0,56 \cdot 1,2}{24 \cdot 1 \cdot 1,2 \cdot 34} = 0,2.$$

Розрахуємо нормоване значення КПО, e_n для нашого приміщення, за формулою:

$$e_n = e_H \times m_n, \quad (5.6)$$

де e_H – значення КПО за табл. 1 та 2 [60]. Для зорових робіт високої точності e_H становить 1,2;

m_n – коефіцієнт світлового клімату за табл. 4 [60]. m_n для північної орієнтації вікон становить 0,9.

$$e_n = 1.2 \times 0.9 = 1.08$$

З розрахунків видно, що природне освітлення не достатнє, тому для забезпечення нормальної освітленості приміщення на кожному столі потрібно встановити місцеве освітлення. В разі невідповідності освітлення встановленим нормам, у працівників при тривалій роботі виникають послаблення зору, головні болі, розсіяння уваги, що в свою чергу може призвести до неточностей у виконанні роботи.

5.2.2 Розрахунок штучного освітлення

При штучному освітленні нормативною величиною є абсолютне значення освітленості, яке залежить від характеристики зорової праці та системи освітлення (загальне, комбіноване). Розрахунок освітлювальної системи може бути виконано різними способами, які базуються на двох основних методах розрахунку: за світловим потоком і точковий. Найбільш розповсюджений в проектній практиці розрахунок за методом коефіцієнта використання потоку світла. Цей метод використовується для розрахунку загального рівномірного освітлення і дає змогу визначити світловий потік джерел світла, необхідний для створення нормованого освітлення розрахункової горизонтальної площини. Цим методом враховується прямий та відбитий (від стелі, стін та підлоги) потік світла [61]. В даній роботі використаємо метод світлового потоку. Основне розрахункове рівняння має вигляд [60]:

$$F = \frac{E \cdot S \cdot K \cdot Z}{N \cdot n \cdot \eta}, \quad (5.7)$$

де F – світловий потік джерела світла, лм;

E – нормована освітленість, лк;

S – площа приміщення, м²;

K – коефіцієнт запасу, що враховує зниження освітленості в результаті забруднення та старіння ламп;

Z – коефіцієнт нерівномірності освітлення;

N – кількість світильників;

n – кількість ламп у світильнику;

η – коефіцієнт використання світлового потоку.

Коефіцієнт використання світлового потоку η визначається за світлотехнічними таблицями [62] залежно від показника приміщення i , коефіцієнтів відбиття стін та стелі. Показник приміщення i враховується за формулою:

$$i = \frac{a \cdot b}{h \cdot (a+b)}, \quad (5.8)$$

де a і b – ширина і довжина приміщення, м;

h – висота світильника над робочою поверхнею, м.

$$i = \frac{6 \times 4}{4 \times (6 + 4)} = 0,6$$

Користуючись даними таблиці, за умовою, що: $\rho_{\text{стелі}} = 80\%$,
 $\rho_{\text{стіни}} = 50\%$, знаходимо: $\eta = 37\%$, або 0,37.

З рівняння (5.7) знаходимо E :

$$E = \frac{F \cdot N \cdot n \cdot \eta}{K \cdot S \cdot Z}, \quad (5.9)$$

де F для ламп ЛБ = 3200 лм;

K для ламп ЛБ становить 1,5.

$Z = 1,1$ для люмінесцентних ламп;

$N = 6$ шт.;

$n = 2$ шт.;

$\eta = 0,37$;

$S = 24 \text{ м}^2$.

$$E = \frac{3200 \times 6 \times 2 \times 0,37}{1,5 \times 24 \times 1,1} = 359 \text{ лк.}$$

Згідно з табл. 2 ДБН В.2.5–28–2006 [60] норма освітлення становить 300 лк. Отримане значення E перевищує норму тобто, штучне освітлення є достатнім.

5.3 Виробничі випромінювання

Дані про виробничі випромінювання нормуються документом: "Норми радіаційної безпеки України (НРБУ-97)" [63].

5.3.1 Випромінювання від комп'ютера

При роботі з ЕОМ, яка входить в устаткування, виникає небезпека впливу на організм робітника ультрафіолетового випромінювання та електростатичного поля.

Враховуючи що робота більшою частиною проводиться за ЕОМ, запропоновано щоб час роботи за монітором не перевищував 4 години за зміну з технологічними перервами.

5.4 Виявлення та аналіз наявності шуму, вібрації, інфра- та ультразвуку

Рівні шуму та вібрації на робочих місцях осіб, що працюють з ПК, визначаються відповідно до ДСанПіН 3.3.2.007-98 [58]. Для забезпечення дотримання допустимих рівнів шуму на робочих місцях застосовуються засоби звукопоглинання, вибір яких обґрунтовується спеціальними інженерно-акустичними розрахунками (п. 3.3.3 ДСанПіН 3.3.2.007-98).

Перелік організаційно-технічних заходів щодо обмеження несприятливого впливу шуму та вібрації на працюючих наведено в ДСН 2.3.6.037-99 [64] та ДСН 3.3.6.039-99 [65], серед яких зменшення шуму та вібрації на шляху розповсюдження засобами ізоляції та поглинання, наприклад, за рахунок використання гумових, поролонових, інших шумо- чи вібропоглинаючих матеріалів, або інших матеріалів аналогічного призначення, що дозволені для оздоблення приміщень органами державного санітарно-епідеміологічного нагляду.

5.5 Електробезпека

При роботі за комп'ютером, відповідно до розд. VI Правил № 65 щодня перед початком роботи необхідно очищати монітор від пилу та інших забруднень. Після закінчення роботи персональний комп'ютер і периферійні пристрої повинні бути відключені від електричної мережі. У разі виникнення

аварійної ситуації необхідно негайно відключити персональний комп'ютер і периферійні пристрої від електричної мережі [66].

Персональні комп'ютери, периферійні пристрої повинні підключатися до електромережі тільки за допомогою справних штепсельних з'єднань і електророзеток заводського виготовлення (п. 2.9 Правил № 65). Штепсельні з'єднання та електророзетки, окрім контактів фазового та нульового робочого провідників, повинні мати спеціальні контакти для підключення нульового захисного провідника. Конструкція їх має бути такою, щоб приєднання нульового захисного провідника відбувалося раніше, ніж приєднання фазового та нульового робочого провідників. Порядок роз'єднання при відключенні має бути зворотнім. Необхідно унеможливити з'єднання контактів фазових провідників з контактами нульового захисного провідника. Неприпустимим є підключення комп'ютерів, периферійних пристроїв до звичайної двохпровідної електромережі, в тому числі – з використанням перехідних пристроїв. Є неприпустимими:

- експлуатація кабелів та проводів з пошкодженою або такою, що втратила захисні властивості за час експлуатації, ізоляцією;
- застосування саморобних подовжувачів, застосування для опалення приміщення нестандартного (саморобного) електронагрівального обладнання або ламп розжарювання;
- користування пошкодженими розетками, розгалужувальними та з'єднувальними коробками, вимикачами та іншими електроприборами, а також лампами, скло яких має сліди затемнення або випинання;
- використання електроапаратури та приладів в умовах, що не відповідають вказівкам (рекомендаціям) підприємств-виготовлювачів.

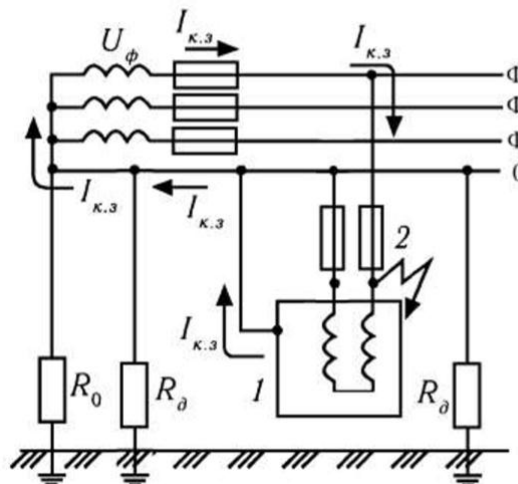
5.5.1 Розрахунок заземлення

Конструктивними заходами безпеки, призначеними для запобігання можливості дотику людини до струмопровідних частин комп'ютерів, є захисні корпуси моніторів і системних блоків.

Відповідно до ГОСТ 12.1.009-76 [67], захисне заземлення – це навмисне електричне з'єднання з землею чи її еквівалентом металевих не струмопровідних частин, які можуть опинитися під напругою. В електричних мережах до 1000 В із глухозаземленою нейтраллю (зазвичай це мережі з напругою 660/380 В, 380/220 В і 220/127 В) застосовується занулення.

Занулення – це заплановане з'єднання неструмопровідних частин електрообладнання з нульовим провідником, які можуть опинитись під напругою в результаті пошкодження ізоляції.

Мета занулення – перетворити струм пробую, який виникає у випадку пошкодження ізоляції у струм короткого замикання (КЗ), і відімкнути електрообладнання від мережі живлення. Принципова схема занулення показана на рис. 5.2.



1 – корпус споживача електроенергії; 2 – апарат захисту від струмів короткого замикання (запобіжники, автомати тощо); R_0 – опір нейтралі джерела живлення (робоче заземлення); R_d - повторне заземлення нульового проводу; $I_{к.з}$ – струм короткого замикання

Рисунок 5.2 – Принципова схема занулення ПК в трьохфазній мережі

Згідно з ГОСТ 12.1.030-81 («Електробезпека. Захисне заземлення. Занулення») [68], граничне допустиме значення опору заземлення для установки з напругою живлення до 1000 В з ізольованою нейтраллю складає $R_n < 4,00$ Ом.

Визначимо розрахунковий питомий опір землі за формулою:

$$\rho = \rho_{\text{вим}} \times \psi, \quad (5.10)$$

де ψ – розрахунковий кліматичний коефіцієнт питомого опору ґрунту (1,5);

$\rho_{\text{вим}}$ – питомий електричний опір ґрунту (100 Ом×м).

Отже, $\rho = 100 \times 1,5 = 150$ Ом×м.

Опір одного заземлювача визначається формулою:

$$R_{з1} = \frac{\rho}{2\pi l} \cdot \left[\ln\left(\frac{2l}{d}\right) + \frac{l}{2} \cdot \ln\left(\frac{4t+l}{4t-l}\right) \right], \text{ Ом}, \quad (5.11)$$

де l – довжина труби, 2 м;

d – зовнішній діаметр труби, 0,06 м;

t – глибина закладання заземлювача, 1,8 м, ($H = 0,8 + 1/2$).

Тобто, $R_{з1} = 53,4$ Ом. Визначаємо кількість заземлювачів:

$$N = \frac{R_{з1}}{R_{ш} \cdot \eta_e}, \quad (5.12)$$

де η_e – коефіцієнт використання електродів, який враховує їх взаємне екранування, прийmemo його рівним, згідно табл., 0,6 ($a / l_{\text{тр}} = 2$);

$R_{ш}$ – припустимий опір всіх вертикальних електродів по нормам, 3,5 Ом.

Отримуємо $N = 26$ заземлювачів.

Визначимо довжину горизонтального електроду, що застосовується для зв'язку вертикальних електродів враховуючи, що вертикальні електроди розташовані в ряд:

$$L = 1,05 \times a \times (N - 1) = 1,05 \times 4 \times (26 - 1) = 105 \text{ м}, \quad (5.13)$$

Опір розтіканню струму цього електроду визначаємо за формулою:

$$R_r = \frac{\rho}{2\pi \cdot L} \cdot \ln\left(\frac{2L^2}{d \cdot t_0}\right), \quad (5.14)$$

$$R_r = \frac{150}{2 \times 3,14 \times 105} \cdot \ln\left(\frac{2 \times 105^2}{0,06 \times 0,8}\right) = 2,96 \text{ Ом}$$

Враховуючи все це, еквівалентний опір розтікання струму штучного заземлювача визначається за формулою:

$$R'_{31} = \frac{R_{31} \times R_r}{R_{31} \times \eta_r + R_r \times N \cdot \eta_B}, \quad (5.15)$$

де η_r – коефіцієнт використання горизонтального електроду з врахуванням вертикальних електродів; визначаємо, що $\eta_r = 0,5$.

$$R'_{31} = \frac{53,4 \times 2,96}{53,4 \times 0,5 + 2,96 \times 26 \cdot 0,6} = 2,16 \text{ Ом},$$

З розрахунку можна бачити, що $R'_{31} < 4 \text{ Ом}$, тобто опір, розрахований вище, повністю відповідає ГОСТ 12.1.030-81 [67].

5.6 Забезпечення безпеки та запобігання надзвичайним ситуаціям

Під час виконання науково-дослідницької роботи можливе виникнення наступних надзвичайних ситуацій: пожежа, вибух, землетрус, аварія на електроенергетичних системах, раптове руйнування будівлі.

До першого класу надзвичайних ситуацій (ситуацій техногенного характеру) відноситься пожежа.

Відповідно до таблиці 1 ДСТУ Б. В.1.1-36:2016 [69] лабораторія за пожежною безпекою належить до категорії В, тому що в ній знаходяться тверді та важко горючі матеріали, та не відноситься до категорій А та Б.

У лабораторії № 112 найнебезпечніші місця – місце, де розміщено комп'ютерну техніку та місця де прокладена електропроводка. Також горіти можуть столи, шафи з книгами та іншими паперами. Виникнення пожеж в лабораторіях можливе за наступних причин: порушення технологічного режиму; несправність електроустаткування; необережне поводження з вогнем; конструктивні недоліки устаткування; неправильне користування устаткуванням.

Для запобігання пожеж необхідно виключити перераховані недоліки і строго дотримуватись заходів і засобів протипожежної безпеки. Засобами виявлення й оповіщення про пожежу є автоматичні датчики-сигналізатори про пожежу типу ДТП, що реагують на підвищення температури.

У випадку пожежі на електроустановці, що знаходиться під напругою, виникле полум'я не гаситься водою, а використовується вуглекислотний вогнегасник. На випадок пожежі в лабораторії є водопровід, вогнегасник вуглекислотноброметиловий ОУБ-3 (ГОСТ 111564-65), а в коридорах – шухляди з піском, вогнегасники ОХП-10, ОП-1Б, пожежні крани.

Приміщення обладнане пожежною сигналізацією автоматичної дії комбінованого типу (оповісник КИ-1).

План евакуації на випадок виникнення пожежі наведено на рис.5.3.

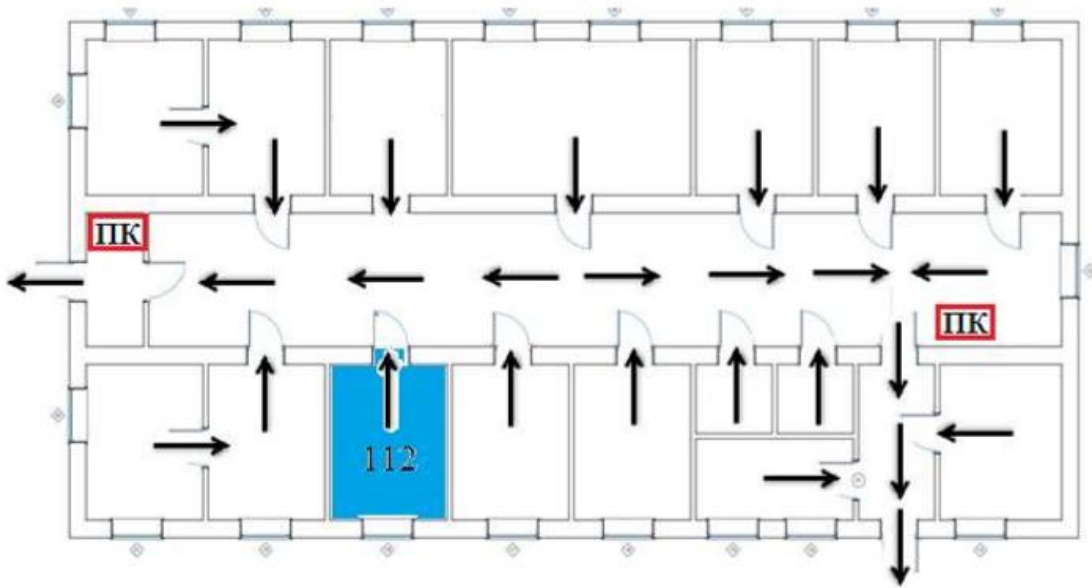


Рисунок 5.3 – План евакуації із приміщення

Основними заходами з пожежної безпеки є регулярна перевірка працездатності засобів гасіння пожежі і систем пожежної сигналізації; перевірка справності електричної проводки; щорічне випробування опору ізоляції підвищеною напругою (близько 500В); обережне поводження з легкоплавкими речовинами.

ВИСНОВКИ

1. Для вивчення коефіцієнта лінійного термічного розширення, термічної стійкості та механічних властивостей нанотрубок срібла використано методику молекулярної динаміки з використанням методу втіленого атома.

2. Розглянуто три моделі нанотрубок: вуглецевоподібна срібна нанотрубка з графеноподібною площиною, срібна нанотрубка, отримана згином площини з кубічною структурою та нанотрубка, отримана шляхом видалення з циліндра внутрішньої області. Тільки останні дві з них стабільні. Нанотрубка, отримана шляхом скручування площини з кубічною структурою, стабільна до температури 700 К. Нанотрубка, отримана шляхом видалення внутрішньої області з циліндра, стабільна до 550 К. В третій моделі нанотрубки при температурі 550 К вільні кінці закриваються, але порожнина в структурі нанотрубок зберігається. При температурі 600 К внутрішня поверхня замикається, і порожнина в наноструктурі зникає.

3. Одновісна деформація СНТ відбувається шляхом розтягу вздовж осі нанотрубки, в процесі чого спостерігається утворення та руху часткових дислокацій Шоклі. Розрахований модуль Юнга СНТ становить $95,7 \text{ ГПа} \pm 2 \text{ ГПа}$ і на 6 % менший від модуля Юнга срібних нанониток та на 15 % більший від модуля Юнга масивного срібла.

Срібні нанонитки володіють найбільшою межею міцності на розтяг серед розглянутих в роботі структур.

4. Розроблено та представлено стартап-проект, який полягає наданні послуг проектування методик синтезу СНТ. Здійснений маркетинговий аналіз свідчить про перспективність реалізації запропонованого проекту. Виділені фактори можливостей та загроз з відповідними рекомендаціями щодо реакції компанії.

5. Проаналізовано шкідливі та небезпечні фактори, які можуть завдати шкоду організму людини, умови, що можуть призвести до травмування в

процесі виконання НДР. Розроблено заходи, спрямовані на усунення небезпечних чинників.

CONCLUSIONS

1. The molecular dynamics method using the embedded atom method was used for studying the coefficient of linear thermal expansion, temperature stability and mechanical properties of silver nanotubes.

2. There were considered three models of the nanotubes: scrolled from graphene-like plane, bended from plane with cubic structure and cut from cylinder. Only last two of them are stable. The nanotube obtained by scrolling cubic plane is stable up to the temperature 700 K . The nanotube obtained by cutting from cylinder is stable up to 550 K . In the third model at a temperature 550 K free ends of the nanotube close while retaining a cavity inside nanostructure. At the temperature 600 K the cavity in the nanotubes structure disappears.

3. There is observed the formation and moving of Shockley partial dislocations in the process of an uniaxial deformation of silver nanotube in the direction of nanotubes axis. The calculated Young`s modulus of silver nanotube is $95.7\text{ GPa} \pm 2\text{ GPa}$ and at 6 % is higher than Young`s modulus of silver nanofiber and at 15 % is less than Young`s modulus of bulk silver.

Silver nanofibers have the highest tensile strength between silver nanostructures.

4. The laboratory, in which the research work was carried out, meets all the specified safety standards.

5. A startup project for the rendering services of designing methods of synthesis has been developed.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Iijima S. Helical microtubes of graphitic carbon / S. Iijima // Nature – 1991. – Vol. 354. – P. 56.
2. Harada M. Surfactant-mediated fabrication of silica nanotubes / M. Hadara, M. Adachi // Adv. Mater. – 2000. – Vol. 12. – P. 839.
3. Bong D. Self-assembling organic nanotubes / D. Bong, T. Clark, J. Granja, M. Ghadiri // Angew. Chem. Int. Ed. – 2001. – Vol. 40. – P. 988.
4. Tenne R. Graphical abstract / R. Tenne // Angew. Chem. Int. Ed. – 2003. – Vol. 42. – P. 5124.
5. Aligned Nanotubes / L. Dai, A. Patil, X. Gong, Z. Guo, L. Liu, Y. Liu, D. Zhu // Chem. Phys. Chem. – 2003. – Vol. 4. – P. 1150.
6. Балабанов В. И. Нанотехнологии. Наука будущего / Балабанов В. И. М.: Эксмо, 2009. 256 с.
7. Kheshen E. Effect of reducing and protecting agents on size of silver nanoparticles and their antibacterial activity / E. Kheshen, E. Rab // Pharm. Chem. – 2012. – Vol. 4. – P. 53–65.
8. Cao G. Nanostructures & Nanomaterials: Synthesis, Properties & Applications. World scientific publishing Co. Pte. Ltd. / G. Cao // Imperial College Press, London. – 2004.
9. Krutyakov Y. Synthesis and properties of silver nanoparticles: advances and prospects / Y. Krutyakov, A. Kudrinskiy, A. Olenin, G. Lisichkin // Russ. Chem. Rev. – 2008. – Vol. 77 (3). – P. 233–257.
10. Haruta M. Nanoparticulate gold catalysts for low temperature CO oxidation / M. Haruta // J. New Mater. Electrochem. Syst. – 2004. – Vol. 7. – P. 163–172.
11. Xu R. Shape-dependent catalytic activity of silver nanoparticles for the oxidation of styrene / R. Xu, D. Wang, J. Zhang, Y. Li // 2006Chem. Asian J. – 2006. – Vol. 1 (6). – P. 888–893.

12. Abid J. Preparation of silver nanoparticles in solution from a silver salt by laser irradiation / J. Abid, A. Wark, P. Brevet, H. Girault // *Chem. Commun.* – 2002. – Vol. 7 (7). – P. 792–793.
13. Sun Y. Shape-controlled synthesis of gold and silver nanoparticles / Y. Sun, Y. Xia // *Science.* – 2002. – Vol. 298 (5601). – P. 2176–2179.
14. Im S. Large-scale synthesis of silver nanocubes: the role of HCl in promoting cube perfection and monodispersity / S. Im, Y. Lee, B. Wiley, Y. Xia // *Angew. Chem.* – 2005. – Vol. 44. – P. 2154–2157.
15. Maneuvering the surface plasmon resonance of silver nanostructures through shape-controlled synthesis / B. Wiley, S. Im, Z. Li, J. McLellan, A. Siekkinen, Y. Xia // *J. Phys. Chem.* – 2006. – Vol. 10. – P. 15666 – 17675.
16. Siekkinen A. Rapid synthesis of small silver nanocubes by mediating polyol reduction with a trace amount of sodium sulfide or sodium hydrosulfide / A. Siekkinen, J. McLellan, J. Chen, Y. Xia // *Chem. Phys. Lett.* – 2006. – Vol. 432. – P. 491–496.
17. Young K. Synthesis and galvanic replacement reaction of silver nanocubes in organic medium / K. Young, Y. Xia, X. Lu // *J. Young Invest.* – 2007. – Vol. 16 (4). web publication.
18. Skrabalak S. Facile synthesis of Ag nanocubes and Au nanocages / S. Skrabalak, L. Au, X. Li, Y. Xia // *Nat. Protoc.* – 2007. – Vol. 2. – P. 2182–2190.
19. UV-induced synthesis, characterization and formation mechanism of silver nanoparticles in alkalic carboxymethylated chitosan solution / L. Huang, M. Zhai, D. Long, J. Peng, L. Xu, G. Wu, J. Li, G. Wei // *J. Nanopart. Res.* – 2008. – Vol. 10. – P. 1193–1202.
20. Facile synthesis of Ag nanocubes of 30 to 70 nm in edge length with CF₃COOAg as a precursor / Q. Zhang, W Li, L. Wen, J. Chen, Y. Xia // *Chem. – Eur. J.* – 2010. – Vol. 16 (33). – P. 10234–10239.
21. Controlling the shapes of silver nanocrystals with different capping agents / J. Zeng, Y. Zheng, M. Rycenga, J. Tao, Z. Li, Q. Zhang, Y. Zhu, Y. Xia // *J. Am. Chem. Soc.* – 2010. – Vol. 132 (25). – P. 8552–8553.

22. Poinern G. Green biosynthesis of silver nanocubes using the leaf extracts from *Eucalyptus macrocarpa* / G. Poinern, P. Chapman, M. Shah, D. Fawcett // *Nano Bull.* – 2013. – Vol. 2 (1). – P. 1–7.

23. Pe´rez-Juste J. Gold nanorods: synthesis, characterization and applications / J. Pe´rez-Juste, I. Pastoriza-Santos, L. Liz-Marza´n, P. Mulvaney // *Coord. Chem. Rev.* – 2005. – Vol. 249. – P. 1870–1901.

24. Kim F. Photochemical synthesis of gold nanorods / F. Kim, J. Song, P. Yang // *J. Am. Chem.* – 2002. – Vol. 124 (48). – P. 14316–14317.

25. Martin C. Nanomaterials: a membrane-based synthetic approach / C. Martin // *Science* – 1994. – Vol. 266 (5193). – P. 1961–1966.

26. Aslan K. Fast and slow deposition of silver nanorods on planar surfaces: application to metal-enhanced fluorescence / K. Aslan, Z. Leonenko, J. Lakowicz, C. Geddes // *J. Phys. Chem. B* – 2005. – Vol. 109 (8). – P. 3157–3162.

27. Orendoff C. Aspect ratio dependence on surface enhanced Raman scattering using silver and gold nanorod substrates / C. Orendoff, L. Gearheart, N. Jana, C. Murphy // *Phys. Chem.* – 2006. – Vol. 8. – P. 165–170.

28. Gu X. Synthesis of silver nanorods and nanowires by tartrate-reduced route in aqueous solutions / X. Gu, C. Nie, Y. Lai, C. Lin // *Mater. Chem. Phys.* – 2006. – Vol. 96. – P. 217–222.

29. Xu J. Controllable synthesis of highly ordered Ag nanorod arrays by chemical deposition method / J. Xu, G. Cheng, R. Zheng // *Appl. Surf. Sci.* – 2010. – Vol. 256. – P. 5006–5010.

30. Liu S. Synthesis of long silver nanowires from AgBr nanocrystals / S. Liu, J. Yue, A. Gedanken // *Adv. Mater.* – 2001. – Vol. 13 (9). – P. 656–658.

31. Sun Y. Shape-controlled synthesis of gold and silver nanoparticles / Y. Sun, Y. Xia // *Science* – 2002. – Vol. 298 (5601). – P. 2176–2179.

32. A simple and effective route for the synthesis of crystalline silver nanorods and nanowires / J. Hu, Q. Chen, Z. Xie, G. Han, R. Wang, B. Ren, Y. Zhang, Z. Yang, Z. Tian // *Adv. Funct. Mater.* – 2004. – Vol. 14 (2). – P. 183–189.

33. Machinable long PVP-stabilized silver nanowires / P. Jiang, S. Li, S. Xie, Y. Gao, L. Song // *Chem. Eur. J.* – 2004. – Vol. 10. – P. 4817–4821.

34. Cong F. A facile synthesis of branched silver nanowire structures and its applications in surface-enhanced Raman scattering / F. Cong, H. Wei, X. Tian, H. Xu // *Front. Phys.* – 2012. – Vol. 7 (5). – P. 521–526.

35. Fu H. Bimetallic Ag–Au nanowires: synthesis, growth mechanism, and catalytic properties / H. Fu, X. Yang, X. Jiang, A. Yu // *Langmuir* – 2013. – Vol. 29 (23). – P. 7134–7142.

36. Park J. Fabrication of silver nanotubes using functionalized silica rod as templates / J. Park, S. Oh, B. Jo // *Materials Chemistry and Physics* – 2004. – Vol. 87. – P. 301–310.

37. Selective adsorption of PVP on the surface of silver nanoparticles: A molecular dynamics study / S. Phumlani, M. Ndabenhle, N. Philani, Tebello Nyokong, R. Tshikhudo, A. Skepu, E. Lingen // *Journal of Molecular Structure* – 2011. – Vol. 1004. – P. 131–137.

38. Stace A. Molecular dynamics study of the surface scattering and capture of nanoparticles at high velocities / A. Stace // *Journal of Aerosol Science* – 2015. – Vol. 83. – P. 32–38.

39. Molecular dynamics simulation of electrical resistivity in sintering process of nanoparticle silver inks / Y. Zhang, W. Linmin, G. Xingye, J. Yeon-Gil, Z. Jing // *Computational Materials Science* – 2016. – Vol. 125. – P. 105–109.

40. Molecular dynamics study of nanojoining between axially positioned Ag nanowires / J. Cui, B. Theogene, X. Wang, X. Mei, W. Wang, K. Wang // *Applied Surface Science* – 2016. – Vol. 378. – P. 57–62.

41. Freezing structures of free silver nanodroplets: A molecular dynamics simulation study / Z. Tian, R. Liu, P. Peng, Z. Hou, H. Liu, C. Zheng, K. Dong, A. Yu // *Physics Letters A* – 2009. – Vol. 373. – P. 1667–1671.

42. Kotrechko S. Peculiarities of plastic deformation and failure of nanoparticles of b.c.c. transition metals / S. Kotrechko, O. Filatov, O. Ovsjannikov // *Materials Science Forum* – 2008. – Vol. 567 – 568. – P. 65–68.

43. Kardani A. Temperature-based plastic deformation mechanism of Cu/Ag nanocomposites: A molecular dynamics study / A. Kardani, A. Montazeri // *Computational Materials Science* – 2018. – Vol. 144. – P. 223–231.

44. Structural evolution of copper-silver bimetallic nanowires with core-shell structure revealed by molecular dynamics simulations / P. Li, Y. Yang, X. Luo, N. Jin, G. Liu, Y. Gao // *Computational Materials Science* – 2017. – Vol. 137. – P. 289–296.

45. Leach A. Deformation of Top-Down and Bottom-Up Silver Nanowires / A. Leach, M. McDowell, K. Gall // *Advanced Functional Materials* – 2007. – Vol. 17. – P. 43–53.

46. Nath S. Elastic, elastic–plastic properties of Ag, Cu and Ni nanowires by the bending test using molecular dynamics simulations / S. Nath // *Computational Materials Science* – 2014. – Vol. 87. – P. 138–144.

47. Zhang S. Microstructure- and surface orientation-dependent mechanical behaviors of Ag nanowires under bending / S. Zhang // *Computational Materials Science* – 2014. – Vol. 95. – P. 53–62.

48. Zhang S. Mechanical behaviors of single crystalline and fivefold twinned Ag nanowires under compression/ S. Zhang // *Computational Materials Science* – 2015. – Vol. 98. – P. 320–327.

49. Wu B. Microstructure-Hardened Silver Nanowires / B. Wu, A. Heidelberg, J. Boland // *Nano Letters* – 2006. – Vol. 6. – P. 468–472.

50. Назаров А. А. Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии. Учебное пособие для студентов-физиков / А. А. Назаров, Р. Р. Мулюков. – Уфа: РИО БашГУ, 2010. – 156 с.

51 Williams P. An embedded-atom potential for the Cu-Ag system. / P. Williams, Y. Mishin, J. Hamilton // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2006. – Vol. 14. – P. 817–833.

52. Хокни Р. Численное моделирование методом частиц / Р. Хокни // Дж. Иствуд. – М.: Мир, 1987. – 640 с.

53. XMD - Molecular Dynamics for Metals and Ceramics: [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <http://xmd.sourceforge.net>.
54. Humphrey W. VMD – Visual Molecular Dynamics / W. Humphrey, A. Dalke, K. Schulten // J. Molec. Graphics. – 1996. – Vol. 14. – P. 33-38.
55. Лариков Л.Н. Тепловые свойства металлов и сплавов: Справочник / Л.Н. Лариков, Ю.Ф. Юрченко. — Киев: Наукова думка, 1985. - 439 с.
56. Гавриш О. А. Розроблення стартап-проекту. Методичні рекомендації до виконання розділу магістерських дисертацій для студентів інженерних спеціальностей / О. А. Гавриш та ін. – Київ : НТУУ «КПІ», 2016. – 28 с.
57. Основи охорони праці: Підручник. 2-ге вид. / К.Н.Ткачук, М.О. Халімовський, В.В. Зацарний та ін. – К.: Основа, 2006. – 448 с.
58. ДСанПіН 3.3.2-007-98 – Державні санітарні правила і норми роботи з візуальними дисплейними терміналами електронно-обчислювальних машин.
59. ДСН 3.3.6.042-99 – Санітарні норми мікроклімату виробничих приміщень.
60. ДБН В.2.5-28-2006 – Інженерне обладнання будинків і споруд // Природне і штучне освітлення, затверджені наказом Міністерства будівництва, архітектури та житлово-комунального господарства України від. – 2006. – Т. 15.
61. Зацарний В.В. Освітлення виробничих приміщень. Принципи створення та використання засобів захисту від шуму, вібрації та ультразвуку. Захист від випромінювань / В. В. Зацарний // Матеріали лекції 6.
62. Практикум із охорони праці. Навчальний посібник / Жидецький В. Ц., Джигирей В. С., Сторожук В. М. та ін. За ред. В. Ц. Жидецького. – Львів, Афіша, 2000. – 352 с.
63. Желібо Є.П, Безпека життєдіяльності : Навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів освіти України I-IV рівнів акредитації / Є.П. Желібо, Н.М. Заверуха, В.В. Зацарний. – Київ : «Каравела» ; 2001. – 320 с.
64. ДСН 3.3.6.037 – 99 – Санітарні норми виробничого шуму, ультразвуку та інфразвуку. – К. – 1999.

65. ДСН 3.3.6.039-99 – Державні санітарні норми виробничої загальної та локальної вібрації. – К. – 1999.

66. Куликов Г.Б. Основы электробезопасности. Действие электрического тока на организм человека / Безопасность жизнедеятельности // Учебник / [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://hiedu.ru/ebooks/xbook908/01/part-009.htm>

67. ГОСТ 12.1.009-76 - Система стандартов безопасности труда. электробезопасность.

68 ГОСТ 12.1.030-81 - Електробезпека. Захисне заземлення. Занулення.

69. ДСТУ Б. В.1.1-36:2016 – Визначення категорій приміщень, будинків та зовнішніх установок за вибухопожежною та пожежною небезпекою.

ДОДАТОК А

Вихідний код моделювання вуглецевоподібної нанотрубки для
програми XMD

```
read Ag-Cu.txt
eunit joule
calc Mass=107.8682
calc DTIME=3e-15
calc A0=4.09
calc SizeX=10
calc SizeY=10
calc SizeZ=10
box SizeX SizeY SizeZ
particle 4
  1  0+1/4  0+1/6  5+0
  1  0+1/4  0+5/6  5+0
  1  0+3/4  0+2/6  5+0
  1  0+3/4  0+4/6  5+0
dup SizeX-1 1 0 0
dup SizeY-1 0 1 0
scale sqrt(3) 3.0 1.0
scale sqrt(2)*A0/2
WRITE PDB koordinata.pdb
select all
mass Mass
dtime DTIME
clamp 300
itemp 300
repeat 2000
cmd 1
WRITE PDB +koordinata.pdb
End
```

ДОДАТОК Б

Вихідний код моделювання срібної нанотрубки скручуванням площини
з кубічною структурою для програми XMD

```

read Ag-Cu.txt
eunit joule
calc Mass=107.8682
calc DTIME=9e-15
calc A0=4.09
calc Xbegin = 0
calc Ybegin = 0
calc Zbegin = 0
calc NX=78
calc NY=20
box 200 NY 200
particle 4
  1 Xbegin+1/4 Ybegin+1/4 Zbegin+1/4
  1 Xbegin+3/4 Ybegin+3/4 Zbegin+1/4
  1 Xbegin+3/4 Ybegin+1/4 Zbegin+3/4
  1 Xbegin+1/4 Ybegin+3/4 Zbegin+3/4
dup NX-1 1 0 0
dup NY-1 0 1 0
dup 1 0 0 1
calc L=NX
move ang=2*pi*(x-Xbegin)/L r=(z-Zbegin)+(L/(2*pi)) r*cos(ang)+L/2-x 0
r*sin(ang)+L/2-z
scale A0
WRITE PDB koordinata.pdb
select all
mass Mass
dtime DTIME
clamp 700
itemp 700
repeat 1000
cmd 10
WRITE PDB +koordinata.pdb
end

```


ДОДАТОК В

Вихідний код моделювання срібної нанотрубки з ГЦК кристалічною
огранкою для програми XMD

```
read Ag-Cu.txt
eunit joule
box 25.456 20 20
FILL BOUNDARY CYLINDER 4.5 25.49 12.5 10 10 1 0 0
fill particle 4
1 0.0 0.0 0.0
1 0.5 0.5 0.0
1 0.5 0.0 0.5
1 0.0 0.5 0.5
fill cell
  1 0 0
  0 1 0
  0 0 1
fill orient 1 1 0 -1 1 0 0 0 1
fill align 12.5 10 10
fill go
select box 25.227 0 0 25.229 20 20
remove select
select ellipse 12.5 10 10 50 2 2
remove select
select all
scale 4.06
mass 107.8682
dtime 8e-15
calc TEMP = 350
itemp TEMP
clamp TEMP
WRITE PDB Ag.pdb
ssave 1 4_06.txt
repeat 500
  repeat 10
    cmd 1
  end
WRITE PDB +Ag.pdb
End
```

ДОДАТОК Г

Вихідний код моделювання розтягу срібної нанотрубки для програми

XMD

```
read Ag-Cu.txt
eunit joule
box 80 20 20
FILL BOUNDARY CYLINDER 4.5 40 40 10 10 1 0 0
fill particle 4
1 0.0 0.0 0.0
1 0.5 0.5 0.0
1 0.5 0.0 0.5
1 0.0 0.5 0.5
fill cell
  1 0 0
  0 1 0
  0 0 1
fill orient 1 1 0 -1 1 0 0 0 1
fill align 40 10 10
fill go
select ellipse 40 10 10 80 2 2
remove select
select box 20.19 0 0 20.91 20 20
set add 1
select box 59.08 0 0 59.81 20 20
set add 2
select all
calc a0 = 4.052
scale a0
mass 107.8682
dtime 8e-15
calc TEMP = 300
itemp TEMP
clamp TEMP
select set 1
FIX on
select set 2
FIX on
select all
WRITE PDB Ag_0_10.pdb
ssave 10 stres_0_10.txt
repeat 250
cmd 10
```

```
WRITE PDB +Ag_0_10.pdb
end
repeat 40
select set 1
FIX off
move -a0/20 0 0
FIX on
select set 2
FIX off
move +a0/20 0 0
FIX on
select all
repeat 250
cmd 10
WRITE PDB +Ag_0_10.pdb
end
end
WRITE STATE Deform_10prosentov.sta
```