

УДК 004.942-539.2-537.86

## МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЗОНАНСНЫХ СВОЙСТВ МАССИВОВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ПАКЕТЕ TINKER

студенты гр. 10307114 Севко Е.А., Кажарнович Ю.Ю., Селеня Д.С.  
*Научный руководитель - канд. физ.-мат. наук, доцент Баркалин  
В.В.*

Белорусский национальный технический университет  
Минск, Беларусь

Углеродные нанотрубки это протяженные цилиндрические структуры диаметром от одного до нескольких десятков нанометров и длиной до нескольких сантиметров (при этом существуют технологии, позволяющие сплести их в нити неограниченной длины), состоящие из одной или нескольких свёрнутых в трубку графеновых плоскостей и заканчивающиеся обычно полусферической головкой, которая может рассматриваться как половина молекулы фуллерена.

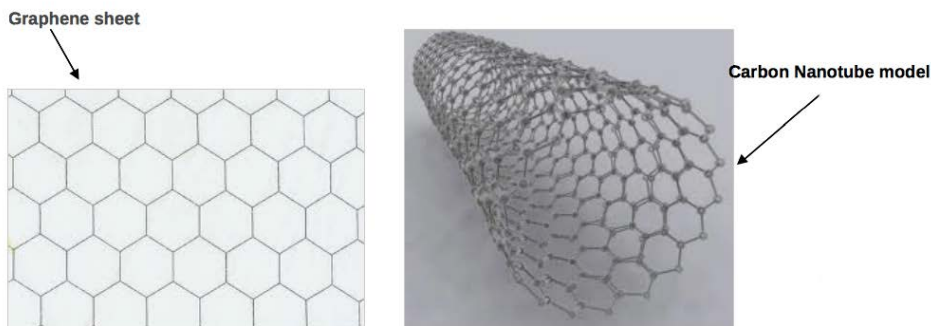


Рисунок 1- Атомная модель углеродной нанотрубки

Благодаря таким характеристикам, как прочность, изгиб, проводимость, используются во многих областях:

- в качестве добавок к полимерам;

- катализатором для осветительных устройств, а также плоских дисплеев и трубок в телекоммуникационных сетях;
- в качестве поглотителя электромагнитных волн;
- для преобразования энергии;
- изготовления анодов в различных видах батареек;
- хранения водорода;
- изготовления датчиков и конденсаторов;
- производства композитов и усиления их структуры и свойств.

На протяжении многих лет углеродные нанотрубки используются в научных исследованиях. Такой материал имеет слабые позиции на рынке, так как существуют проблемы с масштабным производством. Еще одним важным моментом является большая стоимость углеродных нанотрубок, которая составляет примерно 120 долларов за один грамм такого вещества. Они применяются как основной элемент для производства многих композитов, которые используются для изготовления многих спортивных товаров. Еще одна отрасль — автомобилестроение. Функционализация углеродных нанотрубок в данной области сводится к наделению полимеров проводящими свойствами. Коэффициент теплопроводности нанотрубок достаточно высок, поэтому их можно использовать в качестве охлаждающего устройства для различного массивного оборудования. Также из них изготавливают наконечники, которые присоединяются к зондовым трубам. Важнейшей отраслью применения являются компьютерные технологии. Благодаря нанотрубкам создаются особо плоские дисплеи. При помощи их можно существенно уменьшить габаритные размеры самого компьютера, а также увеличить его технические показатели. Готовое оборудование будет в несколько раз превосходить нынешние технологии. На основе этих исследований можно создать высоковольтные кинескопы.

Нанотрубки получают высокотемпературным и низкотемпературным способами. К высокотемпературным можно отнести способы лазерной абляции, соляной технологии или электродугового разряда. Низкотемпературный способ вобрал в себя химическое осаждение из паровой фазы с использованием

каталитического разложения углеводородов, газофазное каталитическое выращивание из монооксида углерода, производство путём электролиза, термообработка полимера, местный низкотемпературный пиролиз или местный катализ.

Для получения углеродных нанотрубок мы использовали трубку длиной 50 ангстрем и программу HyperChem. В ходе определённых операций построения мы получили 3 вида нанотрубок: длиной 100, 200 и 400 ангстрем.

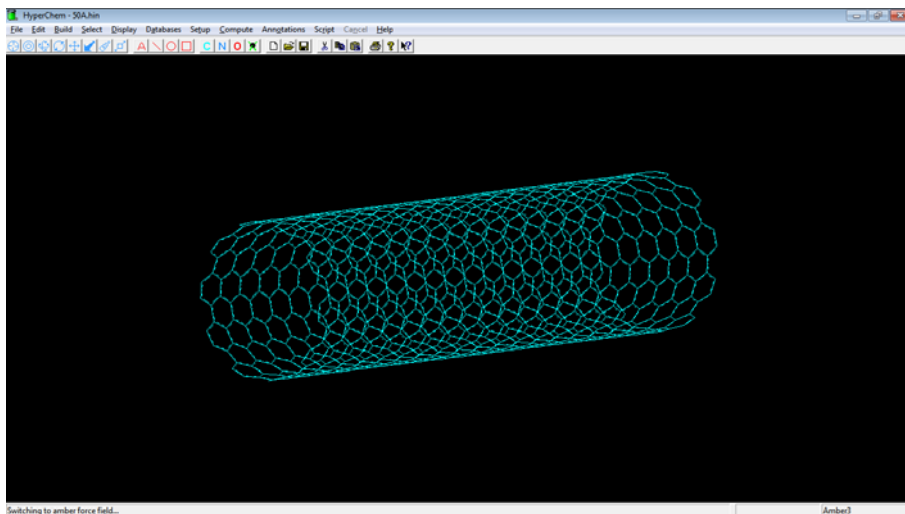


Рисунок 2 - Интерфейс программы HyperChem

После проведения геометрической оптимизации данных трубок, мы перешли к пакету Tinker. Программное обеспечение молекулярного моделирования TINKER является полным и общим пакетом для молекулярной механики и динамики, с некоторыми особенностями для биополимеров. TINKER имеет возможность использовать любой из нескольких общих наборов параметров, таких как Amber (ff94, ff96, ff98, ff99, ff99SB), CHARMM (19, 22, 22 / CMAP), Allinger MM (MM2-1991 и MM3-2000), OPLS (OPLS-UA, OPLS-AA), Молекулярное силовое поле Мерк (MMFF), поляризуемая модель Лиам Данга и поляризуемое многополюсное силовое поле АМОЕВА (2004, 2009, 2013 гг.). Наборы параметров

для других широко используемых силовых полей рассматриваются для будущих выпусков.

Пакет TINKER содержит множество интересных алгоритмов, таких как: гибкая реализация атомной мультипольной электростатики с явной дипольной поляризуемостью, различные методы континуальной сольватации, включая несколько обобщенных моделей Борна (GB / SA), обобщенная неявная сольватация по Кирквуду для АМОЕВА, интерфейс для APBS для расчетов Пуассона-Больцмана, эффективная усеченная локальная оптимизация Ньютона (TNCG), площади поверхности и объемы с производными, вычисления свободной энергии по методу Bennett Acceptance Ratio (BAR), колебательный анализ нормальных мод, минимизация в декартовом, крутильном или жестком пространстве тела, Симплектический множественный шаг временного шага RESPA для молекулярной динамики, стохастическая динамика скорости Верлета, парные списки соседей и сплайсированные сферические методы отсечки энергии, суммирование по Ewald (PME) для частичных зарядов и поляризуемых мультиполей, новая обработка реакционного поля для электростатики на больших расстояниях, метрическая геометрия с более эффективным методом выборки, чем стандартные методы, алгоритм реактивного пути Эльбера, методы сглаживания и поиска (PSS) для глобальной оптимизации, минимизация Монте-Карло (MCM) для эффективного потенциального сканирования поверхности, инструменты для подгонки заряда, мультиполей и поляризации к электростатическим потенциалам на основе QM и т.д. Force Field Explorer (FFE) - это графический интерфейс на основе Java для пакета TINKER.

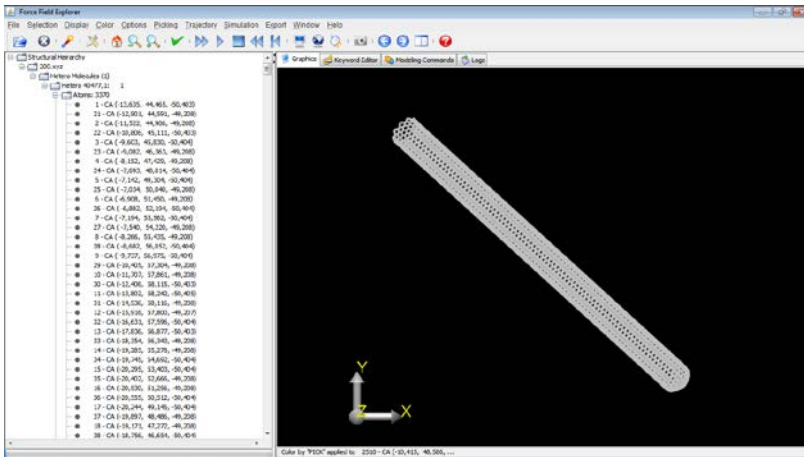
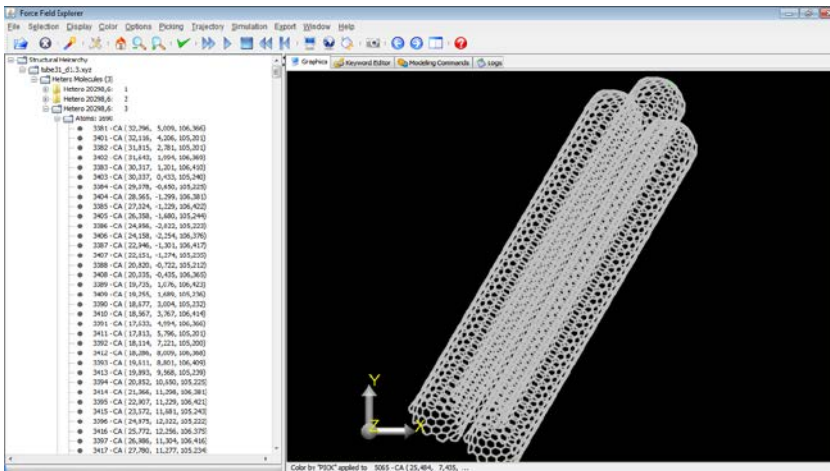
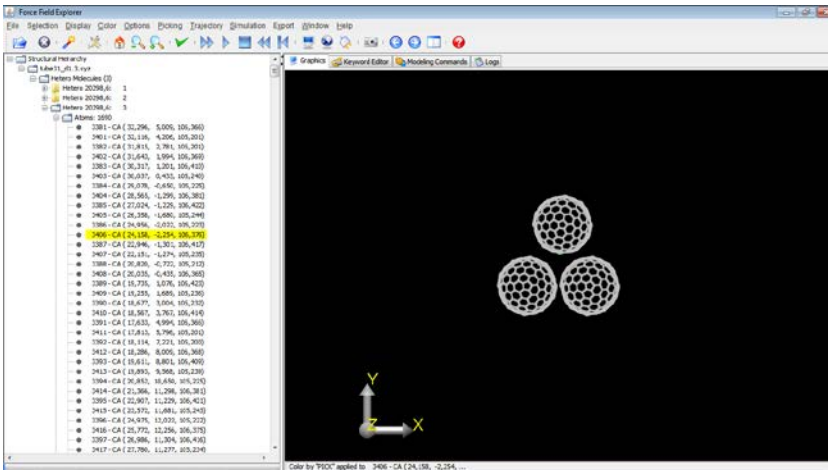


Рисунок 3 - Интерфейс программы Tinker с загруженной трубкой длиной 200А

Для создания массива из 3-х трубок, использовались инструменты пакета: `pdbxyz.exe` и `xyzedit.exe`. Расстояния между нанотрубками в массиве зависит от коэффициентов 1.3; 1.7; 2.0; 2.5; 3.0 и диаметра самих трубок.



(a)



(б)

Рисунок 4(а, б) - Массив нанотрубок длиной 100Å  
(расстояние между трубками 1.3d)

Чтобы получить взаимодействие между нашими объектами в массиве, мы запустили оптимизацию с помощью инструмента optimize.exe

Type	Atom Name	Atom Type	Expected	Found
Valence	1-CA	21	3	2
Valence	3-CA	21	3	2
Valence	5-CA	21	3	2
Valence	7-CA	21	3	2
Valence	9-CA	21	3	2
Valence	11-CA	21	3	2
Valence	13-CA	21	3	2
Valence	15-CA	21	3	2
Valence	17-CA	21	3	2
Valence	19-CA	21	3	2
Valence	22-CA	21	3	2
Valence	24-CA	21	3	2
Valence	26-CA	21	3	2
Valence	28-CA	21	3	2
Valence	30-CA	21	3	2
Valence	32-CA	21	3	2
Valence	34-CA	21	3	2
Valence	36-CA	21	3	2
Valence	38-CA	21	3	2
Valence	40-CA	21	3	2

Enter RMS Gradient per Atom Criterion [0.01] :

Рисунок 5 - Окно инструмента optimize

После получения уже оптимизированного массива, воспользуемся инструментом `vibrate.exe`

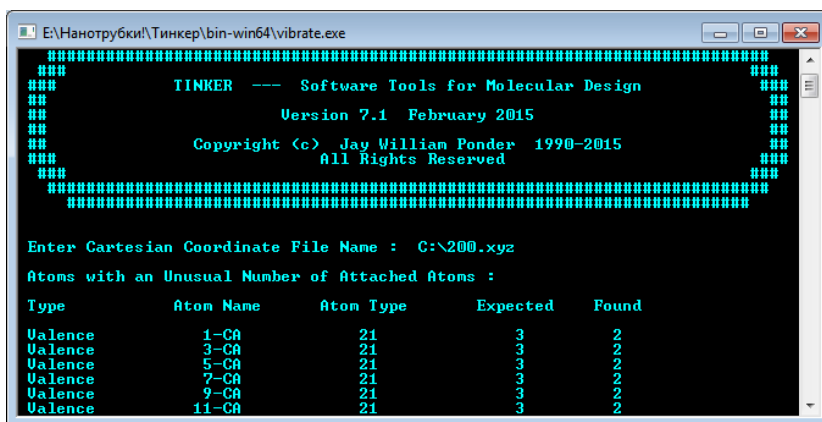


Рисунок 6 - Окно инструмента `vibrate`

Благодаря данному инструменту, после запущенных колебаний, мы получаем резонансные частоты в нашем массиве.

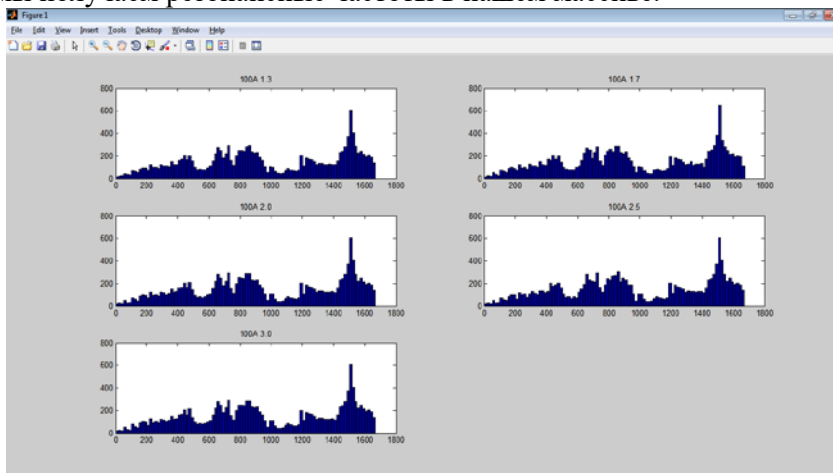


Рисунок 7 - Гистограммы резонансных частот в массиве углеродных нанотрубок, длиной 100 ангстрем или 10 нм, с количеством интервалов частот равным 100.

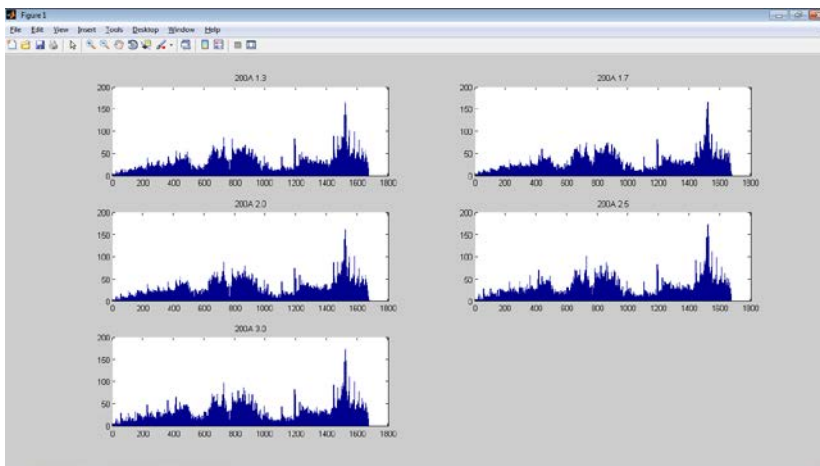


Рисунок 8 - Гистограммы резонансных частот в массиве углеродных нанотрубок, длиной 200 ангстрем или 20 нм, с количеством интервалов частот равным 1000.

На данных гистограммах можно увидеть накопление числа резонансных частот в определённых интервалах при изменении расстояния между трубками в массиве. Данное явление определяется множителями (1,3; 1,7; 2,0; 2,5; 3,0), которые использовались при построении массивов для задания расстояния между трубками с диаметром трубки в качестве базовой величины. На всех промежутках наблюдается изменение колебаний частот. Но наибольшие колебания наблюдаются на промежутках:

- Трубка длиной 100 Å: 0-200; 400-500; 600-1000  $\text{см}^{-1}$ ;
- Трубка длиной 200 Å: 0-200; 400-500; 600-800; 1400-1680  $\text{см}^{-1}$ .

Полученные результаты будут использоваться при определении возможности использовать массивы углеродных нанотрубок в качестве процессорных элементов в осцилляторных нейронных сетях.