

УДК 539.3

Г.П.Черепанов (5 курс, каф. ФМиКТМ), А.И.Мелькер, д.ф.-м.н., проф.

### СВОРАЧИВАНИЕ И ПОВОРОТ НАНОТРУБОК

Такие свойства нанотрубки, как ее малые размеры, меняющаяся в значительных пределах в зависимости от условий синтеза, электропроводность, механическая прочность и химическая стабильность, позволяют рассматривать нанотрубку в качестве основы будущих элементов микроэлектроники. Они могут служить основой тончайшего измерительного инструмента, используемого для контроля неоднородностей поверхности электронных схем. Таким образом, актуальность исследований в этой области стимулируется развитием промышленных технологий, позволяющих использовать углеродные нанотрубки в различных областях науки и техники.

Целью работы является изучение программных средств для моделирования нанотрубок и динамики процессов формирования углеродных нанотрубок, определение наиболее вероятных моделей их образования, применение существующих программных средств для моделирования процесса поворота нанотрубки.

Ключевой проблемой в молекулярной динамике является выбор потенциала межатомного взаимодействия. Однако во всех опубликованных работах по моделированию образования фуллеренов и нанотрубок методом обычной молекулярной динамики не учитывались электронные взаимодействия и использовались обычные межатомные потенциалы. В молекулярной динамике проблема межатомных потенциалов решается следующим образом. Уравнения Лагранжа первого рода численно интегрируются для электронных степеней свободы, которые играют роль обобщенных координат и описываются волновыми функциями основного состояния, а неопределенные множители Лагранжа являются подгоночными параметрами. При этом автоматически вычисляется потенциальный рельеф для атомов, движение которых подчиняется классическим уравнениям механики Ньютона.

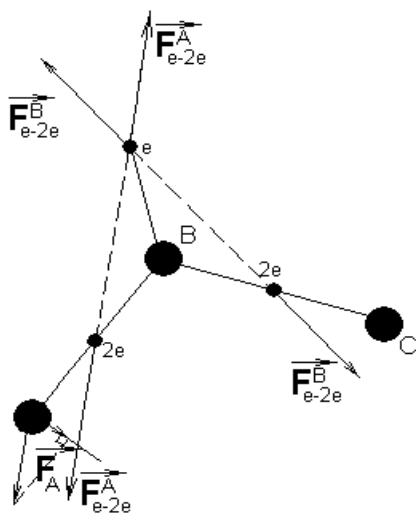


Рис. 1. Взаимодействия в электронной и ионной подсистемах.

Принципиальная разница вычислений состоит в том, что при моделировании нанотрубок исследовалась одновременно двухуровневая система, состоящая из электронов и ионов (рис. 1). Так как электроны более подвижны, чем атомы, то временной шаг для электронной подсистемы равнялся 1 фс, что на порядок меньше, чем для атомной. Чтобы повысить эффективность вычислений, слегка варьировалась длина жестких стержней (расстояние между атомом углерода и неподеленным электроном). Обычно это расстояние изменялось в пределах  $0.4 - 0.6 R$ , где  $R$  – длина межатомной связи. Все расчеты проводились при поддержании постоянной температуры.

Программа визуализации была реализована на языке C++ с помощью среды разработки Microsoft Visual C++ 7.0 в виде оконного приложения Windows. Для работы с трехмерными объектами использовалась библиотека OpenGL. Программа позволяет смоделировать фильтровать отображаемые объекты и запускать проигрывание анимации. По разработанной методике молекулярно-динамического расчета было решено промоделировать поведение углеродной нанотрубки без хиральности (рис. 2).

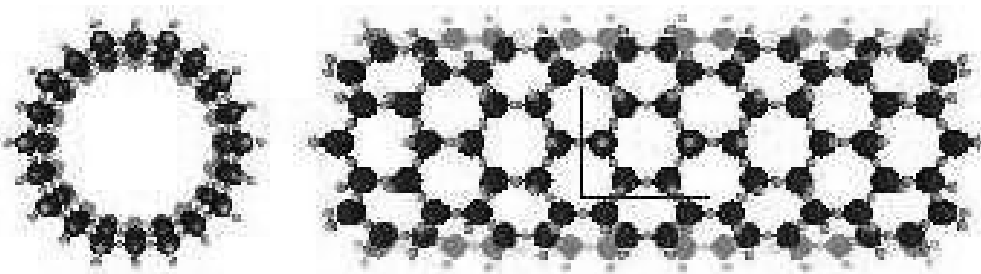


Рис. 2. Углеродная нанотрубка без хиральности.

Была проведена серия молекулярно-динамических экспериментов. В эксперименте был реализован захват с правой и левой стороны. Каждый атом испытывал угловое смещение. Поворачиваясь, вдоль продольной оси, нанотрубка испытывает деформацию. Это влечет за собой изменение структуры нанотрубки.

Основными результатами данной работы является следующее:

1. Изучена модель молекулярной динамики «зарядов на связях» и программное обеспечение для изучения самоорганизации и механических свойств нанотрубок;
2. Изучена динамика процессов формирования углеродных нанотрубок;
3. Проведено моделирование поворота нанотрубки;
4. Определены наиболее вероятные модели образования нанотрубки.