

УДК 539.61:539.196.3:539.1.072

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ

Д.Н. Чаусов, Н.Н. Смирнов

Московский государственный областной университет (МГОУ)
105005, Москва, ул. Радио, д. 10а

Аннотация: Проводится моделирование углеродной нанотрубки типа «кресла» поверхностью «идеального многогранника», и предложен метод расчета координат атомов с возможностью варьирования диаметра. Показано, что молекуле дифенила, инкапсулированной в углеродную нанотрубку, энергетически выгодно плотно прилегать к ее стенкам.

Ключевые слова: углеродная нанотрубка, энергия взаимодействия, дифенил, инкапсулированная молекула.

Введение

Для создания материалов с заранее заданными свойствами широко применяется математическое моделирование, особенно это актуально для прогнозирования свойств материалов, в состав которых входят углеродные нанотрубки (УНТ).

Проведение математических экспериментов с УНТ методами молекулярной динамики [1-3] и квантовой химии [4-5] требует учета их структуры и потенциалов взаимодействия между ними и другими компонентами. В некоторых работах [6-9] поверхность УНТ моделируется цилиндром, при этом обычно не учитывается реальное расположение атомов. В последнее время появились работы [10-11], в которых учитывается реальное расположение атомов.

Как правило, УНТ моделируются сворачиванием плоскости графита [12], при этом валентные связи между атомами изгибаются по поверхности идеального цилиндра, что не совсем корректно. Радиус такой углеродной нанотрубки определяется набором символов (m, n) , указывающих номера шестиугольников, а величина вычисляется согласно выражению:

$$R_0 = \sqrt{m^2 + n^2 + n \cdot m} \cdot \frac{2,461}{2\pi} \quad (\text{Å}). \quad (1)$$

Цель настоящей работы заключается в разработке модели УНТ без искривления валентных углов и расчета координат атомов углеродной нанотрубки типа «кресла», с возможностью варьирования диаметра.

Математическая модель

Для описания УНТ нами была выбрана модель «идеального многогранника» (рис. 1), что позволило не искривлять валентные углы. Каждая грань представляет собой хорду к описанной окружности, на которых расположены правильные шестиугольники с атомами углерода в вершинах. Модель УНТ строилась в декартовой системе координат XYZ , где плоскость XY является поперечным сечением УНТ, а ось Z направлена вдоль продольной оси нанотрубки (рис. 1б). В качестве радиуса УНТ был выбран перпенди-

куляр, опущенный от центра грани в начало координат. Величина радиуса зависит от целого числа граней m (рис. 1а) и определяется выражением:

$$R_m = \frac{b}{2} \cdot \operatorname{tg} \beta. \quad (2)$$

Величина $b = 3 \cdot 1,42 \text{ \AA}$ равна длине хорды, а $\beta = \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{2}{m} \right)$ угол между радиусом описанной окружности и хордой. Грани УНТ находятся под углом $\alpha_k = \frac{2\pi}{m} (k-1)$ относительно начальной, а расположенный на k -й грани i -й атом УНТ имеет координату A_{ik} . В центре каждой грани лежат атомы A_{3k} (рис. 1.а), полярная координата которых имеет вид $\left\{ R_m, \frac{3}{2}\pi + \alpha_k \right\} \oplus$.

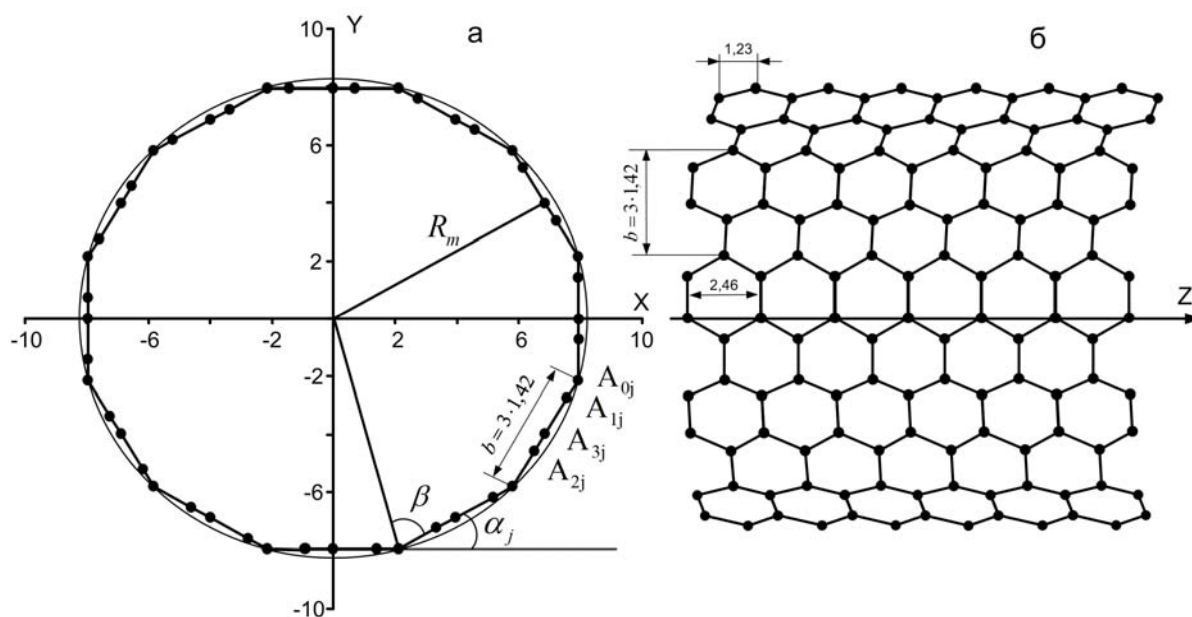


Рис. 1. Модель углеродной нанотрубки (на примере $m=12$)
а) - в плоскости XY , б) - вдоль оси Z

Координат атома A_{0k} определяется добавлением поправки к координате атома A_{3k} в виде $\left\{ \frac{3}{2}a, \alpha_k + \pi \right\}$. Поправки для атомов A_{1k} и A_{2k} имеют вид $\{a, \alpha_k\}$, $\left\{ \frac{1}{2}a, \alpha_k + \pi \right\}$ соответственно, где a – длина связи между атомами углерода равная $1,42 \text{ \AA}$.

Расчеты показывают, что для УНТ с параметрами (10,10) отклонение радиуса R_m от R_0 составляет 1,3%, с параметрами (50,50) всего 0,2%, а для случаев, когда многогранник вырождается в цилиндр, отклонение радиусов стремится к нулю.

Из физических соображений понятно, что диаметр УНТ не может меняться непрерывно [13], и зависит от целого числа звеньев в поперечном сечении (плоскости XU) углеродной нанотрубки. Поэтому варьировать диаметр УНТ можно изменяя значение m .

Алгоритм расчета координат атомов углеродной нанотрубки разрабатывался на языке Pascal, который является одним из классических языков программирования. Выбор в качестве языка программирования Pascal обусловлен легкостью преобразования исходного кода в код более современных языков программирования Visual Studio, C++.

Результаты математического эксперимента

В качестве примера, приводится расчет энергии межмолекулярного взаимодействия методом атом-атом потенциалов [14, 15] молекулы дифенила с углеродной нанотрубкой, в которую она инкапсулирована, при различных диаметрах УНТ. Модель молекулы дифенила была построена по координатам атомов. При этом в расчетах группы СН были заменены модельными атомами, энергия взаимодействия которых достаточно хорошо описывает взаимодействие указанной группы [16].

Энергия взаимодействия представляется в виде суммы величин энергии взаимодействия между атомами молекулы дифенила и атомами УНТ, которая определяется потенциалом Леннард-Джонса:

$$E_{ij} = \frac{A}{R_{ij}^{12}} + \frac{B}{R_{ij}^6}, \quad (1)$$

где A, B – эмпирические параметры; R_{ij} – расстояние между атомом углеродной нанотрубки i и атомом молекулы дифенила j .

Особенности межмолекулярного взаимодействия различных молекулярных фрагментов с различными средами рассмотрен в [17, 18].

Стоит заметить, что метод атом-атом потенциалов, как правило, применяют для описания структурных особенностей, как многослойных УНТ [11], так и для описания инкапсулированных в УНТ веществ.

На рис. 2 представлены зависимости энергии взаимодействия для систем дифенил – поверхность углеродной нанотрубки типа (m, m) при различных диаметрах УНТ, начиная с (10,10) до (50,50) с шагом одно звено. Молекула дифенила расположена вдоль оси Z как в первом, так и во втором случае. При этом, когда молекула дифенила находится в центре УНТ, с ростом диаметра УНТ энергия убывает по абсолютной величине до нуля. В случае, молекулы дифенила плотно прилегающей к внутренней поверхности УНТ, энергия взаимодействия по абсолютной величине начинает убывать и достигает минимума при диаметрах трубки во много раз больших размеров дифенила.

Как видно из рисунка 2, молекуле дифенила энергетически выгодно при больших диаметрах УНТ плотно прилегать к стенкам, чем находиться в центре.

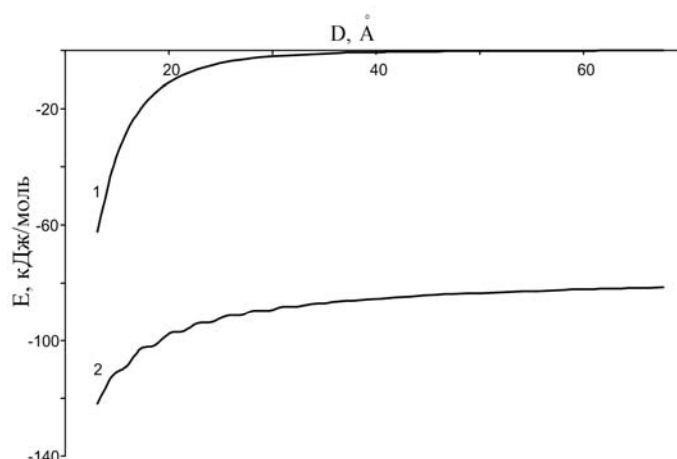


Рис. 2. Зависимость энергии взаимодействия молекулы дифенила от диаметра УНТ:
1 - дифенил инкапсулирован в центр УНТ,
2 - дифенил плотно прилегает к внутренней поверхности УНТ.

Данные результаты хорошо согласуются с ранее проведенными математическими экспериментами [15, 19-20] по определению энергии взаимодействия молекул алифатических углеводородов и мезогенов с поверхностью кристалла графита. В предельном случае, когда диаметр УНТ во много раз больше размеров плотно прилегающего дифенила, энергия взаимодействия стремится к энергии взаимодействия дифенила [15] с поверхностью кристалла однослойного графита (графена).

Выводы

1. Разработан алгоритм расчета координат атомов углеродной нанотрубки типа «кресла», с возможностью варьирования диаметра.
2. Показано, что молекуле дифенила, инкапсулированной в углеродную нанотрубку, энергетически выгодно плотно прилегать к стенкам нанотрубки при диаметрах углеродных нанотрубок значительно больших размеров дифенила.

Благодарность

Авторы выражают благодарность Виктору Васильевичу Беляеву за полезное обсуждение.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, гранты ##10-07-00385-а, 10-03-90028-Bel_a и Министерства образования и науки Российской Федерации, государственные контракты ##02.740.11.5218, 14.740.11.0977.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Natsuki, T., Tantrakarn, K., Endo, M.* [Text] // *Appl. Phys.* 2004, №79, P.117-124.
2. *Zho, L.G., Shi, S.Q.* [Text] // *Computational Materials Science*, 2002, №23, P.166-174.
3. *Глухова, О.В.* [Текст] // *Физика волновых процессов и радиотехнические системы*, 2009, Т.12, №1, с.69-75.
4. *Гольдштейн, Р.В.* [Текст] // *Изв. РАН. МТТ*, 2005, №4, с.57-74.

5. Аннин, Б.Д. [Текст] // Сибирский журнал индустриальной математики, 2008, Т.11, №33, с.3-22.
6. Федоров, А.С., Сорокин, П.Б. [Текст] // Физика твердого тела, 2005, Т.47, вып. 11, с.2106-2111.
7. Эминов, П.А., Ульдин, А.А., Сезонов, Ю.И. [Текст] // Физика твердого тела, 2011, Т.53, вып. 8, с.1621-1627.
8. Завитаев, Э.В., Юшканов, А.А. [Текст] // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики, 2006, Т.130, вып. 5, с.887 - 894.
9. Кузнецов, М.М., Кулешова, Ю.Д. [Текст] // Вестник МГОУ, 2010, №1, с.48-52.
10. Проценко, Е.Б., Емельяненко, В.В., Карпеченко, А.Д. [Текст] // Складні системи і процеси, 2010, №1, с.6-12.
11. Беленков, Е.А. [Текст] // Известия Челябинского научного центра, 2001, вып. 1, с.25-30.
12. Iijima, S, Ichihashi, T. [Text] // Nature, 1993, V.363, P.603-605.
13. Гольдштейн, Р.В., Гордцов, В.А., Лисовенко, Д.С. [Текст] // Физическая мезомеханика, 2009, Т.12, №5, с.5-14.
14. Дадиванян, А.К., Ноа, О.В., Чаусов, Д.Н. [Текст] // Вестник МГОУ, 2007, №1, с.96.
15. Dadivanyan, A.K., Ryabova, Y.M., Chausov, D.N., Belyaev, V.V. and Solomatin, A.S. [Text] // Mol. Cryst. Liq. Cryst., 2011, V.545, P.159-167.
16. Глушко, Н.К., Губина, Л.Н., Дубровицкий, В.И., Смехов, Ф.М., Кабанов, Н.М., Дадиванян, А.К. [Текст] // Высокомолек. соед. А, 1989, Т.31, с.2224.
17. Беляев, В.В. [Текст] // Известия РАН, сер. Физическая, 1996, Т.61, в.4, с.12.
18. Belyaev, V.V. [Text] // Physical Properties of Liquid Crystals: Nematics. Eds. D.A. Dunmur, A. Fukuda, G.R. Luckhurst. London, IEE. 2000, P.414.
19. Дадиванян, А.К., Чаусов, Д.Н., Пашина, Ю.М., Беляев, В.В., [Текст] // Жидкие кристаллы и их практическое использование, 2010, Вып. 4(34), с.61-69.
20. Пашина, Ю.М., Чаусов, Д.Н., Дадиванян, А.К., [Текст] // Вестник МГОУ. Физика-Математика, 2010, №3, с.48-57.

SIMULATION OF CARBON NANOTUBE SURFACE

D. Chausov, N. Smirnov

*Moscow Region State Universite
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

Abstract: Carbon nanotube of the «armchair» type is simulated by the ideal polyhedron surface. The technique of atoms coordinates calculation is proposed permitting to vary the tube diameter. For the diphenyl molecule incapsulated into the carbon nanotube the energetic advantage of the tight contact with tube wall is shown.

Keywords: carbon nanotube, energy of interaction, diphenyl, incapsulated molecule.