

Навигационная система не требует установки сложной инфраструктуры, использования спутникового GPS сигнала и радиочастоты Wi-Fi и может использоваться для решения многих задач. Обновление схемы передвижения происходит в реальном времени, т. к. скорость работы системы напрямую зависит только от мощности мобильного устройства. Система не требует больших энергетических и материальных затрат и с высокой точностью определяет конечную цель.

Литература

1. Навигация в помещениях // Хабрахабр [Электронный ресурс] – 2015. – Режим доступа: <http://habrahabr.ru/post/245325/> – Дата доступа: 09.12.2014
2. GPS — глобальная система определения координат // GPSsoft.ru [Электронный ресурс] – 2015. – Режим доступа: <http://www.gpssoft.ru/gps.html> – Дата доступа: 22.02.2015
3. ГЛОНАСС //НИС ГЛОНАСС [Электронный ресурс] – 2015. – Режим доступа: <http://www.nis-glonass.ru/glonass/description-of-technology/> – Дата доступа: 22.02.2015
4. GPS под крышей: Комнатный навигатор // Популярная механика [Электронный ресурс] – 2015. – Режим доступа: <http://www.popmech.ru/technologies/9216-gps-pod-kryshey-komnatnyu-navigator/> – Дата доступа: 16.06.2009
5. Технология // GETSY BEACON [Электронный ресурс] – 2015. – Режим доступа: <http://beacon.getsy.co/> – Дата доступа: 22.02.2015

УДК 004.4

РАЗРАБОТКА АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНЫХ МОДЕЛЕЙ ДЕФЕКТНЫХ ГРАФЕНОВЫХ СТРУКТУР

студентка гр. 103711 Григоренко Т.И.

Научный руководитель: к.ф.-м.н. доцент В.В.Баркалин

Белорусский национальный технический университет

Минск, Республика Беларусь

Основой каркасных углеродных наноструктур являются графеновые слои, состоящие из атомов углерода, каждый из которых находится в состоянии sp^2 -гибридизации и связан прочными ковалент-

ными связями с тремя соседними атомами, в результате чего атомы располагаются в вершинах правильных шестиугольников. Формирование каркасных углеродных наноструктур из фрагментов графеновых слоев является следствием добавления в эти слои топологических дефектов, т. е. перестройки слоя, так что кроме гексагонов в его структуре появляются четырех-, пяти-, семи- или восьмиугольники. Наличие в графеновых слоях топологических дефектов доказано экспериментально. Такие дефекты могут появиться на стадии роста или очистки наноматериала, в результате ионной бомбардировки и т. д. [1].

Исследование структуры графеновых слоев, содержащих различные топологические дефекты, было выполнено методами молекулярной механики с силовым полем MM+.

В ходе исследования была изучена структура графеновых слоев, содержащих топологические дефекты. В результате выполненных исследований установлено, что топологические дефекты графеновых слоев можно разделить на простые и комбинированные. Простые дефекты – это отдельные n -угольники ($n = 3, 4, 5, 7, 8, \dots$), содержащиеся в графеновом слое.

Комбинированные дефекты составлены из двух или более простых дефектов. Все комбинированные дефекты, искажающие структуру слоя локально, можно разделить на два класса – точечные и линейные. Особенность точечных дефектов такова, что они вызывают деформацию графенового слоя только в небольшой области, окружающей место расположения дефекта. При наличии в графеновом листе линейного дефекта искаженной оказывается структура всего слоя – слой перестает быть плоским даже вдали от дефекта [2].

Наличие в графеновом слое простых топологических дефектов приводит к его трехмерной деформации, полностью искажающей плоскость. Однако, в зависимости от знака дефекта графеновый лист изгибается по-разному. Внедрение в слой положительных дефектов 3, 4 и 5 вызывает выпуклый изгиб, графеновый слой принимает форму чашки (рис. 1).

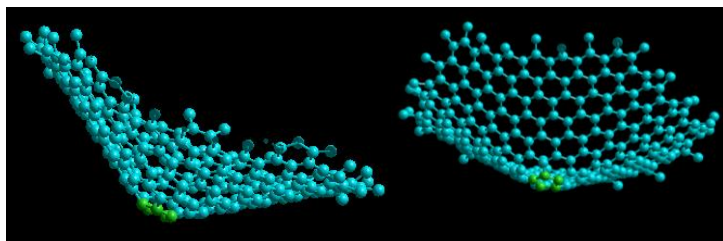


Рис. 1. Фрагмент графенового слоя, содержащий простой топологический дефект - пятиугольник

Отрицательные простые дефекты (7, 8, 9 и т. д.) вызывают искривление, в результате которого лист принимает форму так называемого открытого седла (рис. 2).

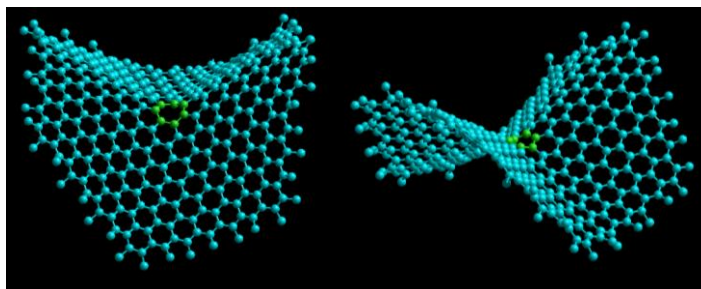


Рис. 2. Фрагмент графенового слоя, содержащий простой топологический дефект – семиугольник

В ходе работы с помощью прикладных программ MATLAB было выполнено внедрение в графеновый слой фрагмента, содержащего простой топологический дефект пятиугольник (рис. 3).

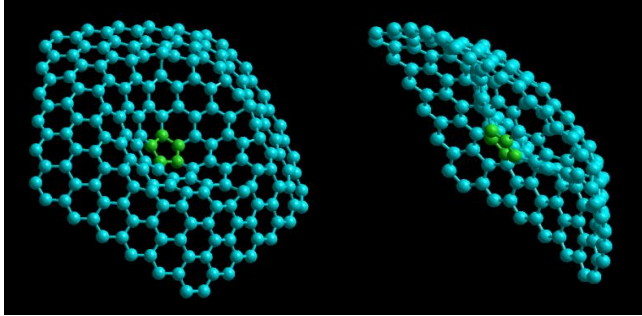


Рис. 3. Фрагмент графенового слоя, содержащий простой топологический дефект пятиугольник

Первоначально осуществлялось построение графенового слоя (10x10) (рис. 4).

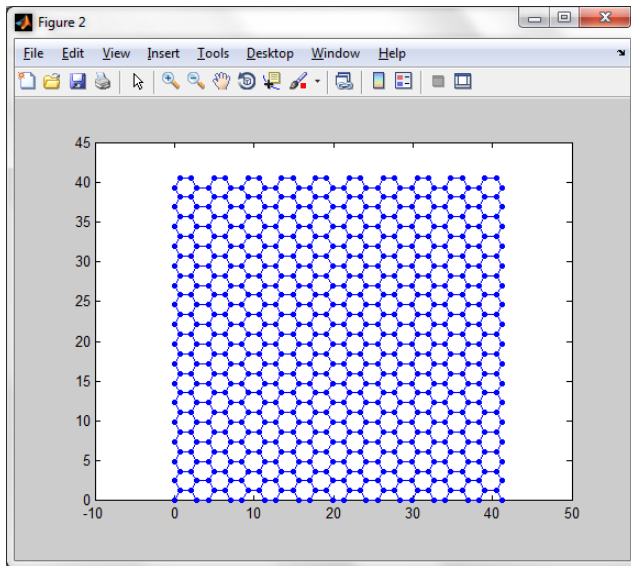


Рис. 4. Графеновый слой размерностью 10x10

Затем производилось удаление области атомов графенового слоя, количество атомов которой соответствует количеству атомов на границе вставляемого фрагмента (рис. 5).

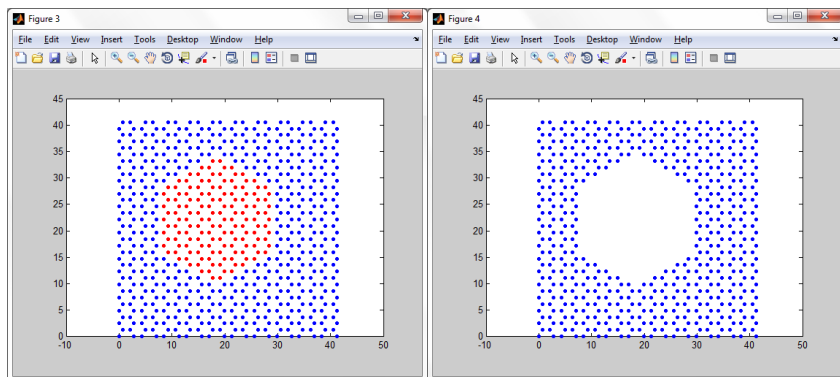


Рис. 5. Удаление области атомов графенового слоя

После вставки в освободившуюся область фрагмента с пятиугольником и замыкания связей получили графеновый слой, содержащий простой топологический дефект - пятиугольник (рис. 6). Следует отметить, что после замыкания возникают дополнительные 4 пятиугольника и 5 семиугольников. Только таким образом возможна локализация деформации дефектного графенового листа.

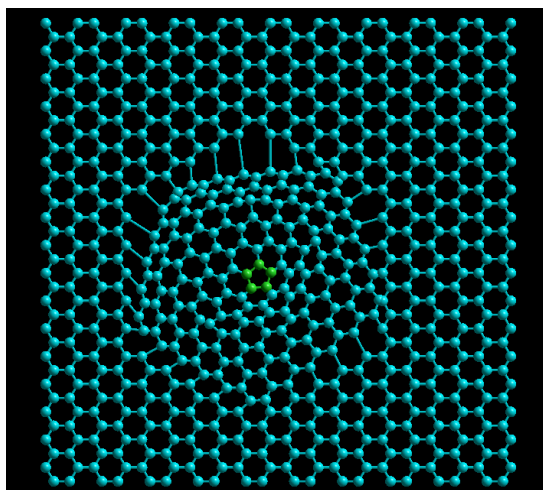


Рис. 6. Полученный графеновый слой с дефектом

После оптимизации графеновый слой, содержащий внедренный пятиугольник принимает выпуклый изгиб, как показано на рис. 7.

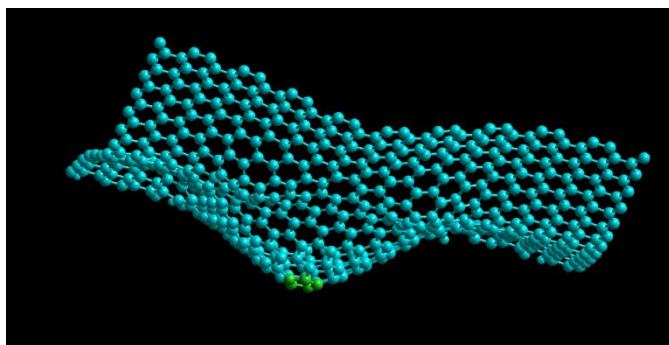


Рис. 7. Полученный графеновый слой после оптимизации

Аналогичным образом может быть получена локализованная вставка фрагмента с семиугольником.

Дефекты слоев могут существенным образом менять свойства исходных структур и являются причиной формирования каркасных углеродных наноструктур: фуллеренов, нанотрубок и др.

Исследование топологических дефектов графеновых слоев представляет интерес, так как они оказывают сильное влияние на электронные, механические и упругие свойства углеродных наноструктур.

Литература

1. Беленков Е. А., Зинатулина Ю. А. Топологические дефекты графеновых слоев // Научная библиотека ЧелГУ. – 2010, с. 32-38
2. Григоренко Т. И. Генерация спиральных и дефектных углеродных наноструктур для молекулярно-динамического моделирования / Т. И. Григоренко, В. В. Баркалин // НИРС МСФ – 2014. Сборник научных трудов по материалам студенческих научно-технических конференций машиностроительного факультета. – Минск: БНТУ, 2014 – с. 9-13