

## ВЫЧИСЛЕНИЕ ИК-СПЕКТРОВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ В ПАКЕТЕ NAMD

Студент гр.103716 Плетежов А.А.,  
кандидат физ.-мат. наук, доцент Баркалин В.В.  
Белорусский национальный технический университет

В данной работе вычисляются оптические ИК-спектры углеродных нанотрубок, являющихся одним из самых перспективных объектов исследований в нанотехнике и сенсорике, методом молекулярной динамики, реализованным в пакете NAMD с интерфейсом VMD. В соответствии с идеологией молекулярной динамики спектр вычисляется как преобразование Фурье от автокорреляционной функции дипольного момента системы, которая получается усреднением по времени произведения дипольных моментов, взятых в различные моменты времени.

Исследовалась нанотрубка из 1690 атомов углерода с индексами хиральности (10,10) и длиной около ста ангстрем. Один из концов трубки заканчивался полусферической крышкой со структурой фуллерена, другой конец оставался открытым и фиксировался. Для получения низкочастотных изгибных движений трубки ее размещали между двумя точечными зарядами -990 и +1000, а на самой трубке двум атомам на крышке приписывались заряды по -5.

После расчета и построения ИК-спектра средствами NAMD обнаружены низкочастотные линии в спектре, начинающиеся с  $15 \text{ см}^{-1}$  (см. рисунок).

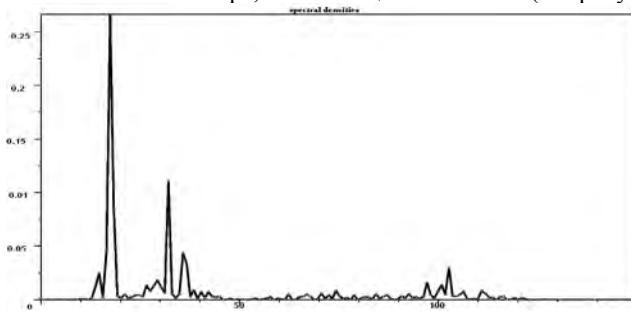


Рисунок – Низкочастотная область ИК-спектра нанотрубки

### Литература

J.C.Phillips, R.Braun, W.Wang, J.Gumbart, E.Tajkhorshid, E.Villa, C. Chipot, R.D.Skeel, L. Kale, and K.Schulten. Scalable molecular dynamics with NAMD// J. Comp. Chem. – 26.- 2005. – p.1781-1802.