

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ИК-СПЕКТРОВ МАССИВА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ПАКЕТЕ NAMD

*Белорусский национальный технический университет  
Минск, Беларусь*

При разработке наносистем различного назначения важное значение имеет развитие методов характеризации и контроля качества наноматериалов, используемых в их конструкциях. Вследствие малости размеров элементов наносистем традиционные методы контроля материалов, используемые в машиностроении, в данном случае неприменимы и требуется разработка новых подходов, основанных на более тонких физических эффектах. При этом необходимо получать как сведения о микроскопической структуре и состоянии образца, так и его интегральные характеристики. Поэтому представляется актуальным изучение спектральных характеристик наносистем в широком частотном интервале, включающем как собственные частоты индивидуальных элементов наносистем, так и частоты, характеризующие наносистему в целом. В применении с наносистемам на основе углеродных нанотрубок (УНТ) этот интервал включает область от СВЧ до ИК диапазонов электромагнитной шкалы [1].

Использование спектральных свойств для характеризации наносистем предполагает изучение влияния различных физических и структурных параметров материалов на спектральные характеристики, в котором важную роль играет компьютерное моделирование. Вследствие сложности динамики наносистем необходимо использовать иерархический подход к моделированию, включающий микроскопический, мезоскопический и макроскопический уровни [2]. С точки зрения затрат компьютерных ресурсов и точности наиболее приемлемым методом моделирования спектров наносистем на основе УНТ представляется метод молекулярной динамики. Этот метод подразумевает вычисление траекторий всех атомов системы численным решением классических уравнений движения с использованием эмпирически определяемых потенциалов межатомных сил [3].

В данной работе для молекулярно-динамического моделирования использовался свободно распространяемый пакет NAMD [4] под управлением операционной системы Fedora 11. Пакет NAMD базируется на силовом поле CHARMM, разработанном в основном для аппроксимации межатомного взаимодействия в биополимерах. Его применение для моделирования углеродных нанотрубок представляется поэтому вполне оправданным.

Пакет имеет следующие характерные черты:

- Силовое поле CHARMM учитывает многочастичные связывающие взаимодействия между 2, 3 и 4 атомами и парные несвязывающие взаимодействия: электростатические и вандерваальсовские.
- Пакет включает алгоритм Эвальда для расчета полного электростатического взаимодействия в системе.
- Пакет использует алгоритм Верле для расчета будущих значений координат и скоростей атомов. Для снижения временных затрат при расчете дальнедействующих электростатических сил применяется разностная схема с несколькими шагами по времени. Локальные взаимодействия вычисляются на каждом шаге, а дальнедействующие – один раз за несколько шагов.
- В пакете реализованы следующие возможности: молекулярная динамика при постоянной энергии, молекулярная динамика при постоянной температуре за счет переопределения скоростей, ланжевенковская динамика, возможность задать периодические граничные условия для рассматриваемой системы, молекулярная динамика при постоянном давлении, алгоритмы поиска минимума энергетической функции, возможность фиксации координат части атомов системы, использование жестких моделей для молекул воды, задание жестких водородных связей, возможность задания периодических воздействий на систему.
- Использование графического интерфейса VMD позволяет реализовать интерактивную молекулярную динамику с приложением сил к набору атомов.

- Сбалансированная нагрузка на все используемые процессоры.

Хотя моделирование больших систем, включающих сотни тысяч и миллионы атомов, методом молекулярной динамики требует больших вычислительных затрат, системы размером до нескольких десятков тысяч атомов могут моделироваться на персональном компьютере. Пакет NAMD работает эффективно в обоих случаях и обладает хорошей параллелизуемостью.

Особый интерес для исследования спектральных методов характеристики массивов нанотрубок представляет возможность вычисления электромагнитных спектров поглощения молекулярных систем, имеющаяся в графическом интерфейсе NAMD. Спектр вычисляется как преобразование Фурье от автокорреляционной функции дипольного момента системы, которая, в свою очередь, вычисляется по временным рядам метода молекулярной динамики. В данной работе вычислены спектры поглощения индивидуальной нанотрубки диаметром 13 и длиной 100 Å с хиральными параметрами {10,10} с внедренными в ее крышку положительным и отрицательным единичными зарядами на близком расстоянии и аналогичные спектры массивов из 7 и 19 УНТ, образующими правильные треугольные решетки с расстояниями между трубками в диапазоне 4-24 Å, в которых пары зарядов задавались только на центральной трубке. На рис. 1 представлена геометрия исследуемых систем, а на рис. 2 – полученные спектры поглощения в частотном диапазоне 0-500 см<sup>-1</sup>.

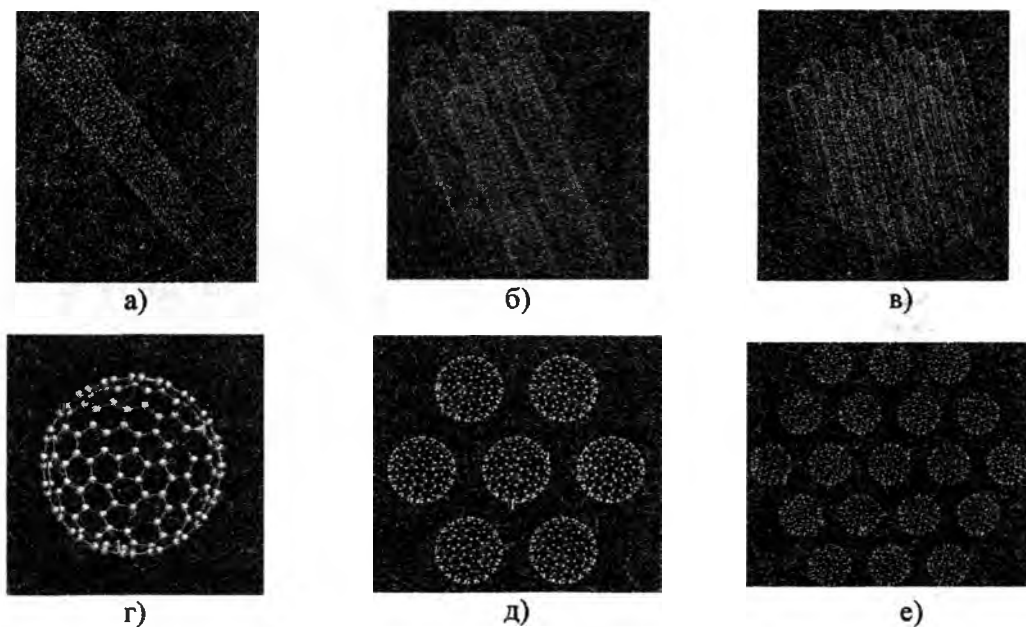


Рис. 1. Индивидуальная УНТ и массивы УНТ {10,10}: а)–в) вид сбоку; г)–е) вид сверху и расположение внедренной пары зарядов

Полученные спектры демонстрируют резонансный характер поглощения массивами УНТ электромагнитного поля, обусловленный наличием в системе собственных частот механических колебаний. Тем самым подтверждаются результаты расчетов в континуальном приближении, в которых взаимодействие нанотрубок в массиве осуществлялось только через подложку [1]. Особый интерес представляет наличие спектральных окон прозрачности массивов, разделяющих области острых резонансных пиков.

Зависимость спектров от геометрии массива носит весьма сложный характер из-за вклада дальнедействующих вандерваальсовых взаимодействий. На рис. 3 представлены индивидуальные спектры массивов с различным числом трубок и различным расстоянием между трубками в низкочастотной области 0 – 300 см<sup>-1</sup>, в которой резонансное поглощение индивидуальной нанотрубки практически отсутствует. Для контроля геометрии массива наибольший интерес представляет пик поглощения на частоте 25 см<sup>-1</sup>, что соответствует 750 ГГц. Величина этого пика явно коррелирует с расстоянием между нанотрубками в массивах. Положение этого пика зависит от длины нанотрубки и сдвигается вниз по шкале частот с ее увеличением

обратно пропорционально этой длине. Для трубок длиной 1 мкм пик попадает в диапазон 5–10 ГГц и может изучаться в СВЧ-резонаторах миллиметрового диапазона.

Полученные данные демонстрируют возможность разработки спектральных методов контроля геометрических характеристик массивов нанотрубок. Кроме того, существенные отличия спектров рассмотренных систем свидетельствуют о возможности использования массивов углеродных нанотрубок в наносенсорике.

Наличие корреляции других пиков с геометрией массивов требует дополнительного исследования.

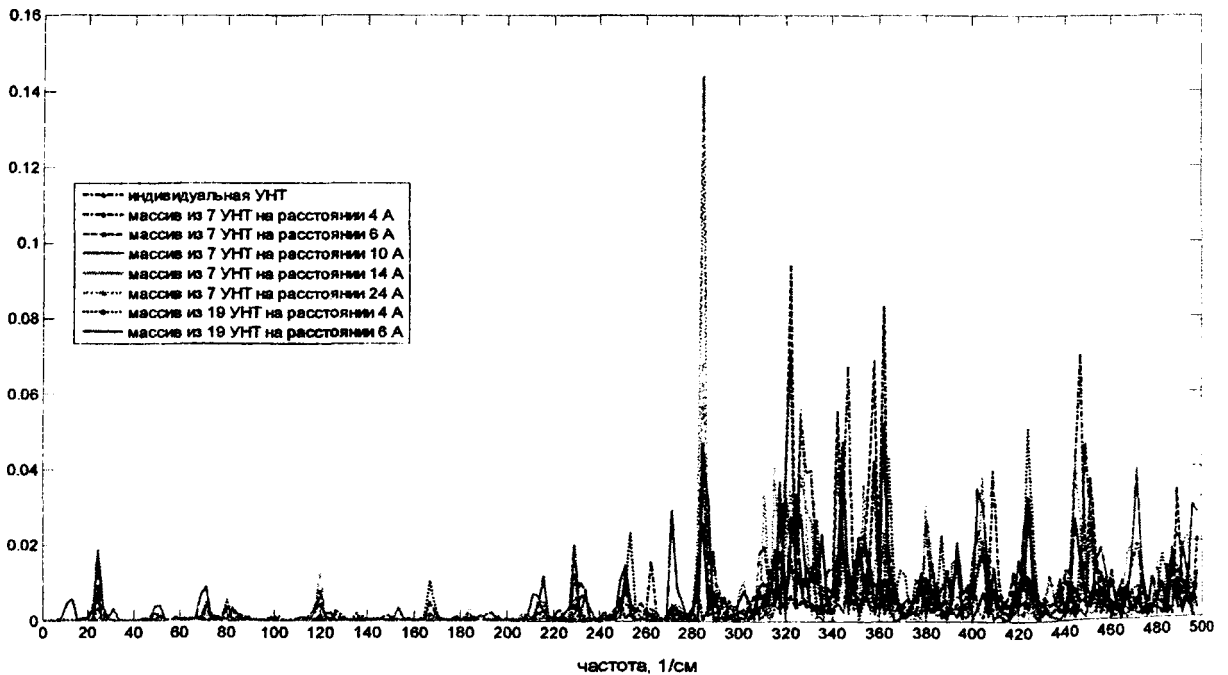


Рис. 2. Спектры поглощения индивидуальной УНТ и массивов УНТ



Рис. 3. Спектры поглощения индивидуальной УНТ и массивов УНТ в относительных единицах в низкочастотной области

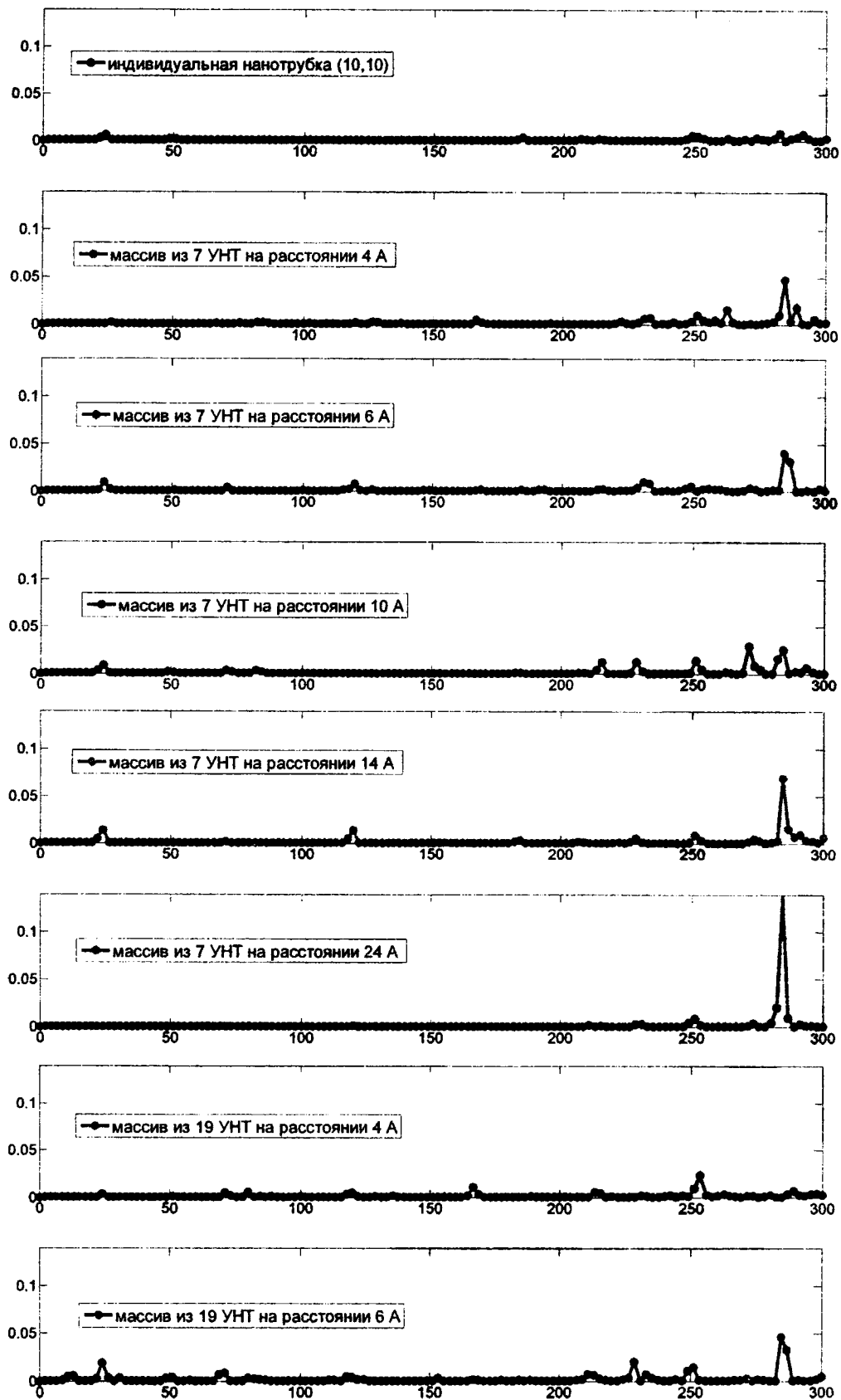


Рис. 3 (продолжение). Спектры поглощения индивидуальной УНТ и массивов УНТ в относительных единицах в низкочастотной области

## ЛИТЕРАТУРА

1. V.V. Barkaline, P.A. Zhuchak. Resonant properties of ordered carbon nanotube arrays// *Proc. SPIE 7377, 73770I* (2008) p.1-9.
2. В.В. Баркалин, С.В. Медведев, В.В. Нелаев, П.А. Случак, С.Н. Юркевич. Иерархическая система моделирования физических процессов и свойств материалов на базе суперкомпьютерной конфигурации СКИФ К-1000// Научный сервис в сети Интернет: решение больших задач: Труды Всероссийской научной конференции (22-27 сентября 2008 г., г. Новороссийск).- М.: Изд-во МГУ, 2008. - 468 с. с.101-105.
3. D. Frenkel, B. Smit. *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications* – San Diego, San Francisco, New York, Boston, London, Sydney, Tokio: Academic Press, 2002, 658 p.
4. 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.

УДК 621.7.044.2

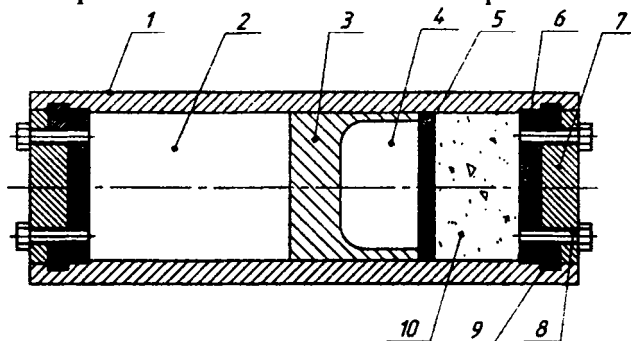
*Загурняк М.В., Драгобецкий В.В., Пирогов Д.Л.,  
Коноваленко А.Д., Маркевич А.Б.*

### **МОДУЛЬНАЯ ВЗРЫВОУДАРНАЯ УСТАНОВКА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ НАНОПОРОШКОВ, НАНОПОКРЫТИЙ И НАНОЛЕГИРОВАНИЯ**

*Кременчугский государственный университет имени Михаила Остроградского,  
Кременчуг, Украина*

Регенерация утилизированных изделий из твердых сплавов связана с необходимостью их дробления. Одной из перспективных технологий дробления является метод дробления утилизированных изделий из твердых сплавов с использованием импульсных источников энергии, в частности, бризантных взрывчатых веществ. Многократное воздействие ударно-волнового нагружения на твердый сплав приводит к получению фракций размерами от  $10^{-8}$ - $10^{-2}$  м. Ультрасупердисперсные фракции могут после обогащения использоваться для получения твердосплавных пластин, волок, пластин бронезилетов, элементов конструкции штампов.

Многофакторность явлений, сопровождающих процессы ударно-волнового нагружения позволяет помимо дробления лома твердых сплавов, производить взрывное легирование инструмента из углеродистых, легированных и быстрорежущих инструментальных сталей наночастицами карбида вольфрама, осуществлять процесс быстрой кристаллизации. Последнее достигается в специальных камерах с намагниченным поршнем, который обеспечивает косое соударение утилизированных твердых сплавов с образованием встречных кумулятивных струй. Для этих целей наиболее целесообразно использование многокамерных систем.



*Рис. 1. Модель конструкции взрывоударного контейнера с демпфирующей подушкой: 1 - цилиндр; 2 - ударная камера; 3 - поршень-ударник; 4 - взрывная камера; 5 - разделительная шайба; 6 - опорная крышка; 7 - стопорная крышка; 8 - болт; 9 - опорное полукольцо; 10- демпфирующая подушка.*

Модульная конструкция многокамерного взрывоударного контейнера позволяет комбинировать, в зависимости от параметров и свойств твердосплавных отходов; типа, применяемой