

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОТРУБОК И НАНОТОРОВ

Руденко И.В., Михайленко А.В., Корнилов М.Ю.

Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко
triclosan@mail.ru

Среди последних грандиозных открытий и успехов химии следует справедливо отметить открытие в 1985 г. полиэдрической аллотропной модификации углерода, названной фуллереном. Авторы этой работы – Р. Смолли, Р. Керл и Г. Крото – были удостоены Нобелевской премии по химии 1996 г. Вслед за фуллеренами были получены другие "новинки" химии углерода, так называемые нанотрубки (1991, С.Иидзима) и наноторы (1999, Р. Мартел, Г. Шеа, П. Авоурис). Научно-исследовательские разработки по фуллеренам, нанотрубкам и наноторам (нанокольцам) ведутся во всем мире в огромных масштабах.

В связи с этим большое внимание уделяется проблеме моделирования указанных объектов, чем занимается, в частности, научная группа кафедры органической химии КНУ.

Наиболее наглядным инструментом моделирования может служить пакет компьютерных программ HyperChem от HyperCube, Inc. Мы написали к нему ряд приложений на языке сценариев tcl/tk, моделирующих листы графита, нанотрубки и наноторы с заданными параметрами, в т.ч. хиральных структур.

Поскольку нанотрубки и наноторы являются принципиально новыми химическими объектами, потребовался и новый подход к их номенклатуре, т.н. кодированию. Ранее было разработано несколько методов кодирования нанотрубок, каждый из которых имеет определенные недостатки; кодирование нанотрубок и наноторов по единой схеме вообще не было описано.

Наиболее универсален на сегодняшний день метод, разработанный киевскими учеными [1], так называемая p,q,w,t -номенклатура, где p, q – набор целых чисел, описывающих размер и форму структурного фрагмента трубки – инвариантной единицы, число w – количество инвариантных единиц в ожерельи, t – количество ожерелий в нанотрубке (нанокольце).

Составленные нами приложения к пакету HyperChem опирались именно на p,q,w,t -номенклатуру нанотрубок и наноторов и производили их автоматическую сборку практически любого размера (до 10 тысяч атомов углерода и более), не требуя традиционных и весьма утомительных приемов "ручной" сборки из отдельных атомов.

Время, затрачиваемое на построение грубой модели нанотрубки и нанотора в сотни и тысячи раз короче времени, которое приходилось ранее затрачивать на построение таких же моделей "классическими" приемами сборки молекулярных моделей. Кроме того, новый подход всегда дает высокосимметричную модель, геометрия которой гораздо быстрее оптимизируется программой HyperChem, чем прежние модели "ручной сборки".



1. Корнілов М.Ю., Плахотник В.В., Ісаєв С.Д., Михайленко О.В., Любчук Т.В., Реутов Д.В. "Новий підхід до кодування нанотрубок і 6-нанокілець". Наукові записки НАУКМА 20 (II), 509-515 (2002).