

ФИЗИКА

Научная статья

УДК 539.19; 533.9.15

Структура углеродных наноструктур в аддитивном приближении

Аслан Хасанович Кяров¹, Павел Константинович Коротков², Амир Асланович Жугов³, Астемир Анзорович Тохов⁴, Идар Муратович Шомахов⁵, Азамат Анзорович Дышеков⁶

^{1,2,3,4,5,6}Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, Кабардино-Балкарская Республика, Нальчик, Россия

¹aslan.kyarov.61@mail.ru

²pkorotkov1984@mail.ru

³amirzugov@gmail.com

⁴tohov03@mail.ru

⁵taikobeatsuno@gmail.com

⁶dyshekov@azamat-email.ru

Аннотация. Рассмотрена задача моделирования простейших нанообъектов с использованием эмпирических потенциалов. Представлена модель, позволяющая рассчитать устойчивые нанокластеры, равновесные расстояния, число атомов в простейших нанообъектах.

Ключевые слова: потенциал Леннарда-Джонса, наноструктуры, энергия диссоциации, равновесный радиус

Для цитирования: Кяров А.Х., Коротков П.К., Жугов А.А., Тохов А.А., Шомахов И.М., Дышеков А.А. Структура углеродных наноструктур в аддитивном приближении // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2026. Т. 16, № 2. С. 26–31.

PHYSICS

Original article

Structure of carbon nanostructures in the additive approximation

Aslan Kh. Kyarov¹, Pavel K. Korotkov², Amir A. Zhugov³, Astemir A. Tokhov⁴, Idar M. Shomakhov⁵, Azamat A. Dyshekov⁶

^{1,2,3,4,5,6}Kabardino-Balkarian State University, Kabardino-Balkarian Republik, Nal'chik, Russia

¹aslan.kyarov.61@mail.ru

²pkorotkov1984@mail.ru

³amirzugov@gmail.com

⁴tohov03@mail.ru

⁵taikobeatsuno@gmail.com

⁶dyshekov@azamat-email.ru

Abstract: The problem of modeling simple nano-objects using empirical potentials is considered. A model is presented for calculating stable nanoclusters, equilibrium distances, and the number of atoms in the simplest components of nano-objects.

Keywords: Lennard-Jones potential, nanostructures, dissociation energy, equilibrium radius

For citation: Kyarov A.Kh., Korotkov P.K., Zhugov A.A., Tokhov A.A., Shomakhov I.M., Dyshekov A.A. Structure of carbon nanostructures in the additive approximation. *Proceedings Kabardino-Balkarian State University*. 2026;16(2):26–31. (In Russ.).

Введение

Межатомные (межионные) потенциалы могут быть определены как с использованием эмпирических данных, так и путем квантово-механического расчета энергии взаимодействия атомов при различных расстояниях между их ядрами. Неэмпирический расчет позволяет использовать рассчитанные потенциалы для материалов различных структурных типов, моделировать свойства материалов под действием сильных давлений, причем любые расхождения между величинами, полученными в неэмпирическом расчете и измеренными экспериментально, являются следствием хорошо осознаваемых приближений. Кроме того, ценность неэмпирического подхода заключается в обосновании применяемых и в стимулировании новых полуэмпирических моделей.

Существуют, конечно, и другие пути определения параметров парных потенциалов. Однако на сегодняшний день сложности, возникающие при решении подобных задач, не позволяют получить сколь либо удовлетворительные результаты.

Точное знание характера и величины сил межатомных и межмолекулярных взаимодействий крайне важны для правильного предсказания свойств наноструктур. Эти данные необходимы для проектирования и изготовления систем и устройств на основе наноструктур, таких как системы фазового перехода, самосборки, тонкопленочных транзисторов, полупроводниковых наностержней, композитов и т. д. [1–2]. Однако природа и роль межмолекулярных взаимодействий в наноструктурах критикуется в работах ряда авторов, они не до конца понятны.

Результаты и обсуждение

В данной работе в рамках простейших представлений (аддитивность парного взаимодействия атомов, интерполяция потенциалов взаимодействия) исследованы простейшие наноструктуры, их равновесные характеристики и когезионные свойства. Для практических целей бывает достаточно и удобно использовать аппроксимационные потенциалы, заданные в той или иной форме, например, в аналитической.

Рассмотрим простейший нанообъект: N атомов углерода, расположенных на плоском кольце (окружности). Угол между ближайшими атомами:

$$\varphi_{\min} = \frac{2\pi}{N}. \quad (1)$$

Минимальное расстояние между ними:

$$r_{\min} = 2R \sin \frac{\varphi}{2} = 2R \sin \frac{\pi}{N}, \quad (2)$$

где R – радиус окружности.

Расстояния между выбранным (первым) и k – м атомами будут соответственно равны:

$$r_{1,k} = 2R \sin \frac{\pi(k-1)}{N}. \quad (3)$$

Наиболее известным среди аналитических аппроксимаций парного потенциала является потенциал Леннарда-Джонса [3]:

$$U_{\text{парн}}(r) = \varepsilon_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right], \quad (4)$$

где ε_0 – энергия диссоциации молекулы C_2 , r_0 – равновесное расстояние данной молекулы. С учетом (4) для полной энергии взаимодействия первого атома с другими атомами в кольце получим следующее выражение:

$$U(R, N) = \sum_{k=2}^N U_{\text{парн}}(r_{1,k}) = \varepsilon_0 \sum_{k=2}^N \left[\left(\frac{r_0}{r_{1,k}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r_{1,k}} \right)^6 \right]. \quad (5)$$

Подставляя (3) в (5), получим:

$$U(R, N) = \frac{r_0^6 \epsilon_0}{(2R)^6} \left(\frac{r_0^6}{(2R)^6} \sum_{k=2}^N \frac{1}{\left(\sin \frac{\pi k}{N} \right)^{12}} - 2 \sum_{k=2}^N \frac{1}{\left(\sin \frac{\pi k}{N} \right)^6} \right). \quad (6)$$

Для исследования устойчивой конфигурации данной структуры, определения равновесного расстояния между атомами углерода и энергии взаимодействия, необходимо минимизировать энергию (6).

Из уравнения

$$\frac{\partial U}{\partial R} = 0 \quad (7)$$

получим:

$$\frac{r_0^6}{(2R_0)^6} \sum_{k=2}^N \frac{1}{\left(\sin \frac{\pi k}{N} \right)^{12}} = \sum_{k=2}^N \frac{1}{\left(\sin \frac{\pi k}{N} \right)^6}. \quad (8)$$

Из уравнения

$$\frac{\partial U}{\partial N} = 0 \quad (9)$$

с учетом (8) следует, что:

$$\frac{\partial}{\partial N} \sum_{k=2}^N \frac{1}{\left(\sin \frac{\pi k}{N} \right)^6} = 0. \quad (10)$$

С учетом $\frac{\pi k}{N} = x$ и, переходя в (10) от суммирования к интегрированию, получим:

$$\int \frac{dx}{(\sin x)^6} = -\frac{\cos x}{5(\sin x)^5} - \frac{4}{15} \frac{\cos x}{(\sin x)^3} - \frac{8}{15} \operatorname{ctgx}. \quad (11)$$

Из (10) с учетом (11) получим:

$$-\sin^{-2}(\pi/N) \left(\sin^{-4}(\pi/N) + \frac{1}{3} \sin^{-2}(\pi/N) + \frac{2}{3} \right) + \frac{\cos(\pi/N)}{\sin(\pi/N)} \left(\frac{4\pi}{N^2} \frac{\cos \pi/N}{\sin^5(\pi/N)} + \frac{\pi}{N^2} \frac{\cos(\pi/N)}{\sin^3(\pi/N)} \right) = 0. \quad (12)$$

Считая N достаточно большим, так, чтобы в первом приближении

$$\cos \frac{\pi}{N} \approx 1, \quad \sin \frac{\pi}{N} \approx \frac{\pi}{N}, \quad (13)$$

и, подставляя (13) в (12), получим биквадратное уравнение относительно N :

$$N^4 - N^2 \left(\frac{4}{\pi} - \frac{1}{3} \right) - \pi^3 \left(3 - \frac{2\pi}{3} \right) = 0. \quad (14)$$

Решая полученное уравнение, получим:

$$N = \left(\frac{2}{\pi} - \frac{1}{6} + \sqrt{\left(\frac{2}{\pi} - \frac{1}{6} \right)^2 + \pi^4 \left(\frac{3}{\pi} - \frac{2}{3} \right)} \right)^{\frac{1}{2}} \approx 5,7892. \quad (15)$$

Таким образом, с учетом принятых в модели приближений, можно утверждать, что наиболее устойчивыми конфигурациями углеродных наноструктур будут гексагональные, но с меньшей долей вероятности будут присутствовать и конфигурации с пятью атомами, что вполне соответствует экспериментальным данным.

Для гексогональной структуры в предложенной модели связь между r_0 и равновесным расстоянием между атомами углерода определяется следующим образом:

$$r_{\min} \approx 2r_0 \sin \frac{\pi}{N} = r_0. \quad (16)$$

При этом энергия взаимодействия атома:

$$E_{\min} \approx -2\varepsilon_0, \quad (17)$$

что близко к экспериментальным данным.

1. Рассмотрим линейную структуру – цепочку атомов углерода. Потенциал парного взаимодействия имеет характерную форму (рисунок 1).

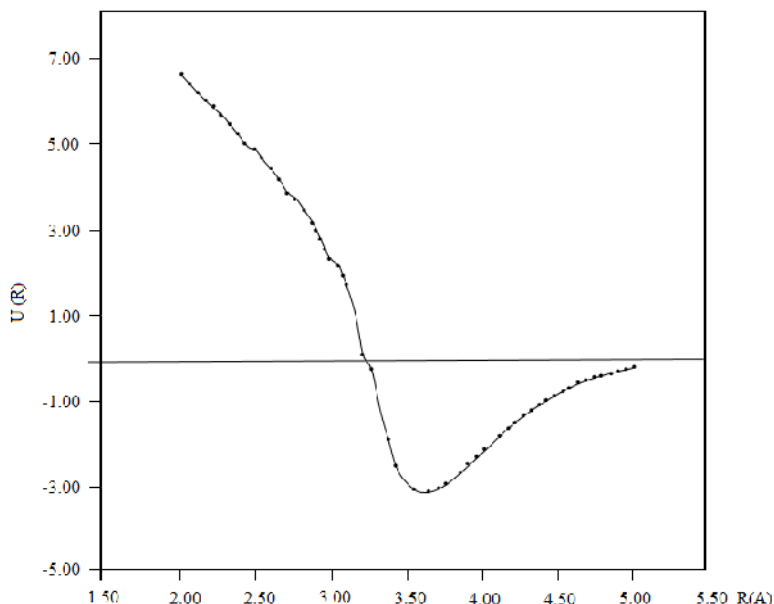


Рисунок 1 – Типичный потенциал парного взаимодействия (в данном случае атомов Ar – Ar)

Минимизируя энергию, получим для нового равновесного расстояния с учетом второй координационной сферы без учета отталкивательной части потенциала взаимодействия:

$$r_{\min} = 0,99444r_0.$$

Учет отталкивательной части потенциала дает следующее значение:

$$r_{\min} = 0,994925r_0,$$

т. е. приводит к незначительному изменению равновесного радиуса меньше 0,02 %.

Линейная цепочка, очевидно, неустойчива (даже в первом приближении) и стремится свернуться в правильную геометрическую фигуру определенной симметрии. Для потенциалов, зависящих только от $|\vec{r}|$ симметричная конфигурация дает наименьшую полную потенциальную энергию системы. Это легко проверяется для трехатомной системы. В приближении потенциала Леннарда-Джонса в полярной системе координат производная по φ от потенциала приводит к условию минимума при $\varphi = 60^\circ$, что означает: три атома складываются в равносторонний треугольник.

Полная энергия атома углерода в бесконечной цепочке:

$$U_{\min} = 2,1355U_0,$$

что более чем в 2 раза больше энергии связи парного взаимодействия C – C, и на 7,5 % больше, чем если бы мы учитывали только приближение ближайшего соседа.

2. Рассмотрим плоскую наноструктуру. Расчеты показали, что с большой точностью достаточно учитывать приближение второй координационной «сферы». В этом случае потенциал взаимодействия атома можно выписать в виде

$$U(r)_{\min} = 6U(r) + 4U(2r) + 4U(\sqrt{5}r) + 4U(\sqrt{4,5}r),$$

Минимизируя потенциал взаимодействия, получим для равновесного расстояния:

$$r_{\min} = 0,9963r_0.$$

При этом

$$U_{\min} = 6,2155U_0,$$

Таким образом, полная энергия связи более чем в 6 раз больше энергии связи парного взаимодействия $C - C$, и на 3,47 % больше, чем если бы мы учитывали только приближение ближайшего соседа.

3. Для расчета цилиндрической наноструктуры с большой точностью достаточно приближения второй координационной сферы. Потенциал взаимодействия атома в этом случае:

$$U(r)_{\min} = 6U(r) + 4U(\sqrt{3}r),$$

$$r_{\min} = 0,9961r_0,$$

$$U_{\min} = 6,44U_0.$$

Таким образом, полная энергия связи чуть менее чем в 6,5 раз больше энергии связи парного взаимодействия $C - C$, и на 7,3 % больше, чем если бы мы учитывали только приближение ближайшего соседа.

4. Если вдоль цилиндра находится линейная цепочка, то в этом случае к выписанному выше потенциалу добавится слагаемое вида:

$$\Delta U(r)_{\min} = 2U(\sqrt{3}r).$$

Это приводит к следующим результатам:

$$r_{\min} = 0,995r_0,$$

$$U_{\min} = 7,4427U_0.$$

Полная энергия связи чуть менее чем в 7,5 раз больше энергии связи парного взаимодействия $C - C$ и на 6,9 % больше, чем если бы мы учитывали только приближение ближайшего соседа.

5. Для сферического нано объекта

$$U(r)_{\min} = 6U(r) + 6U(\sqrt{3}r),$$

Минимизируя потенциал взаимодействия, получим для равновесного расстояния:

$$r_{\min} = 0,9942r_0.$$

При этом

$$U_{\min} = 6,4438U_0.$$

Полная энергия связи чуть менее чем в 6,5 раз больше энергии связи парного взаимодействия $C - C$ и на 7,4 % больше, чем если бы мы учитывали только приближение ближайшего соседа.

6) Для сферического нано объекта с атомом внутри:

$$U(r)_{\min} = 7U(r) + 6U(\sqrt{3}r).$$

Минимизируя потенциал взаимодействия, получим для равновесного расстояния:

$$r_{\min} = 0,9942r_0.$$

При этом

$$U_{\min} = 7,5178U_0.$$

Полная энергия связи чуть более чем в 7,5 раз больше энергии связи парного взаимодействия $C - C$ и на 7,4 % больше, чем если бы мы учитывали только приближение ближайшего соседа

Полученные потенциалы позволяют рассчитать характерные частоты ν для изучаемых нанообъектов:

$$\nu = \frac{3}{\pi r_0} \sqrt{\frac{2|\epsilon_0|}{m}}.$$

Для изучаемых наноструктур $r_{\min} < r_0$, а энергия связи больше, чем у $C - C$ молекулы, и, хотя расчеты пока не приведены, очевидно, что это приводит к возрастанию их собственной частоты.

Выводы

1. Предложена новая модель, позволяющая моделировать структуру простейших нанообъектов.
2. Проведенные расчеты показали хорошее совпадение как по числу атомов в стабильном простейшем нанообъекте, так и по равновесным характеристикам.

Библиография

1. Гусев А.И., Ремпель А.А. Нанокристаллические материалы. М.: Физматлит, 2000. 224 с.
2. Суздаев И.П. Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. М.: Комкнига, 2006. 484 с.

References

1. Gusev A.I., Rempel A.A. Nanocrystalline Materials. Moscow: Fizmatlit; 2000. 224 p.
2. Suzdalev I.P. Physical Chemistry of Nanoclusters, Nanostructures, and Nanomaterials. Moscow: Komkniga; 2006. 484 p.