



УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО – МАТЕМАТИЧКИ
ФАКУЛТЕТ
ДЕПАРТМАН ЗА ФИЗИКУ



УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО:	24 СЕП 2008
ОРГАНИЗ.ЈЕД.	БРОЈ
0603	9/1260

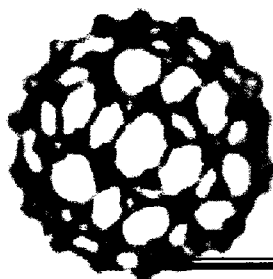
ДИПЛОМСКИ РАД

Конструкција нанотуба C_{60} - C_{210} и израчунавање њихових квантно-механичких параметара

Ментор
Проф. др Јован Шетрајчић

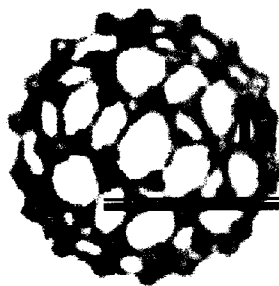
Кандидат
Смиља Крајиновић

Нови Сад, 2008. године



САДРЖАЈ

1. УВОД	1
2. ТЕОРИЈСКИ ДЕО	2
2.1. Историјат открића фулерена	2
2.1. Структура фулерена	4
2.3. Нанотубе	4
2.4. Софтверски пакет <i>HyperChem</i> 6.0	6
2.4.1. Теорије у основи <i>HyperChem</i> –а	6
3. ЦИЉ РАДА	10
4. РАЧУНСКИ ДЕО I – Избор оптималне методе	11
4.1. Избор алгоритма за геометријску оптимизацију	13
4.2. Избор рачунске методе за <i>single point</i> прорачуне	13
5. РЕЗУЛТАТИ I - Избор оптималне методе	14
5.1. Избор алгоритма за геометријску оптимизацију	14
5.2. Избор рачунске методе за <i>single point</i> прорачуне	15
6. РАЧУНСКИ ДЕО II - Конструкција нанотуба C60-C210 и израчунавање њихових квантно-механичких параметара	17
7. РЕЗУЛТАТИ II – Конструкција нанотуба C60-C210 и израчунавање њихових квантно-механичких параметара	18
7.1. Моделовање молекула нанотуба	18
7.2. Топлота формирања	20
8. ЗАКЉУЧАК	22
9. ЛИТЕРАТУРА	23



УВОД

*“Петсто година након што је Колумбо стигао до Западне
Индије, планаран угљеник је пошао путем планарне Земље “*
Х.

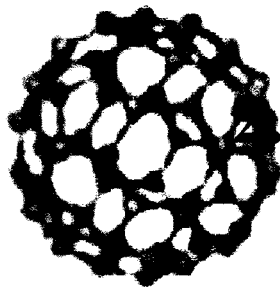
Крото

Фулерени представљају фамилију угљеничних кавезастих кластера. Они су трећа позната чиста кристална форма угљеника, а налазе се у космосу, у међузвезданим облацима, чак и у геолошким и археолошким узорцима са Земље. За разлику од графита и дијаманта са бесконачном структуром, фулерени су коначни, сферни молекули растворљиви у низу органских растварача.

Постоје два основна типа фулерена: сферни угљенични кавези и угљеничне нанотубе. Обе форме садрже sp^3/sp^2 орбитале и p_z електроне, али са неуобичајеном оријентацијом у простору. Према организацији хибридних орбитала угљеника, дијамант представља тродимензионално-растућу термокондуктивну структуру; графит је дводимензионално-растућа структура са особинама семиметала; угљеничне нанотубе су специфичне једнодимензионално-растуће структуре са полупроводничким особинама, док сферни фулерени имају тачкасту нулту димензионалност и многе занимљиве особине.

Теоријска истраживања и израчунавања показују да електричне особине нанотуба зависе највише од пречника и распореда угљеникових атома у њима. Стога је теоријско проучавање нанотуба интердисциплинарно подручје које повезује физику и хемију чврстог стања, науку о новим материјалима, квантну механику и органску и физичку хемију.

У овом раду коришћена је компјутерска симулација и математичко моделовање кратких једнослојних нанотуба изведених из фулерена C_{60} како би био одређен математички однос између дужине нанотуба и топлоте формирања, као параметра њихове стабилности.



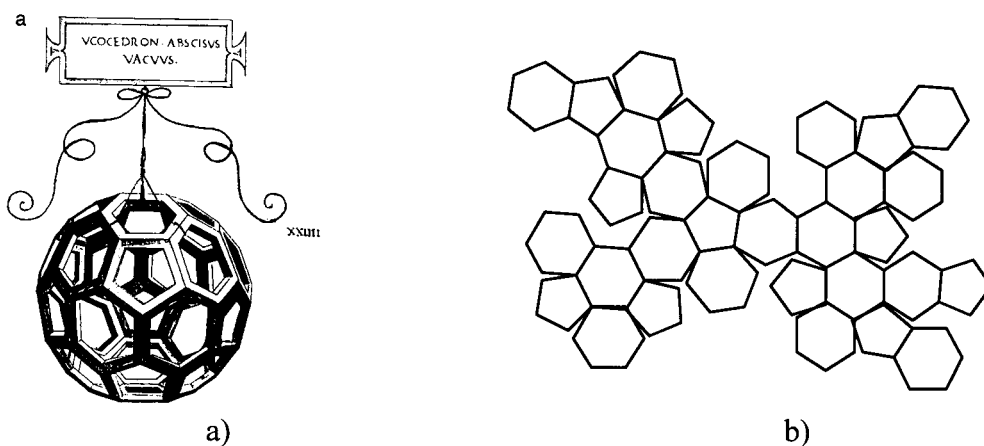
ТЕОРИЈСКИ ДЕО

2.1. ИСТОРИЈАТ ОТКРИЋА ФУЛЕРЕНА

Откриће икосаедарског молекула бакминстерфулерена има дугачку и врло занимљиву историју.

За експерименталну потврду постојања молекула фулерена додељена је 1996. године Нобелова награда за хемију тројци научника: Харолду Кроту (*Harold Kroto*, Sussex University, Велика Британија), Ричарду Смолију (*Richard Smalley*, Rice University, САД) и Роберту Курлу (*Robert Curl*, Rice University, САД). Они су предводили америчко-енглески истраживачки тим који је 1985. године ласером високе снаге синтетизовао овај молекул као најсавршенију тачкасту симетријску форму која постоји у природи.

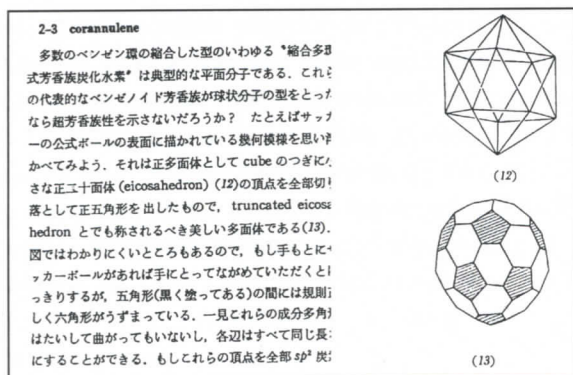
Геометрија зарубљеног икосаедра била је позната још Леонарду да Винчију око 1500. године. И рани приказ конструкције правилног зарубљеног икосаедра Албрехта Дирера потиче из истог периода (слика 1) [1].



Слика 1. (а) Правилни зарубљени икосаедар из књиге "De Divina Proportione" (Luca Pacioli, 1509); за нацрт се верује да потиче од Леонарда; (б) Диреров цртеж (~1500) конструкције зарубљеног икосаедра

Средином прошлог века веровало се (*Jones*, 1966) у могућност постојања шупљих кавеза састављених искључиво од атома угљеника. Ова хипотеза није наишла на одобравање шире научне јавности [2].

Подстакнута синтезом коранулена (облика чиније) јапанска истраживачка група Јошида-Осава (*Yoshida-Osawa*) је 1971. године дошла до закључка да би идеално ароматични угљоводоник требало да има сферну структуру [3]. Предложена је структура зарубљеног икосаедра - I_h -симетричне фудбалске лопте за молекул C_{60} , док коранулен представља половину ове сфере. Ицима (*Iijima*) је овај молекул синтетисао 1980. године, али га тада није препознао у експерименталним резултатима [4,5].

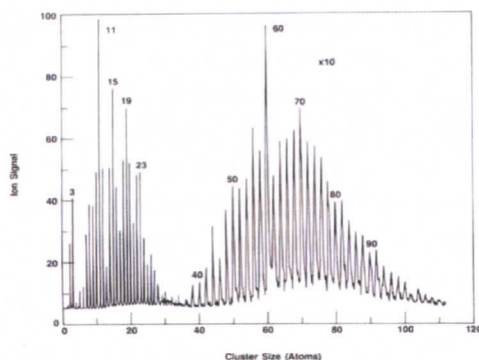


Слика 2. Страница Осавиног рада о икосаедарској структури идеалног ароматичног угљоводоника [5]

Слично се десило и америчко-немачком истраживачком тиму Хафман-Кречмер (*Huffman-Kraetschmer*) који је 1973. године започео изучавање појаве преламања светлости у срединама попут међузвездане прашине [6]. Они су произвели угљену прашину сличну међузвезданој, а да све до 1990. нису ни знали да се у њој налази око 14% фулерена C_{60} .

Руски истраживачки тим Бочвар-Галперн је на основу физичко-хемијских прорачуна предвидео постојање овог молекула још 1972. године. Рад о свом предвиђању су објавили у оквиру Руске академије наука [7], али је он остао незапажен. „Откривен“ је тек 1980-их, после експерименталних открића Кртоа и Смолија.

Истраживачка група Калдор-Кокс (*Kaldor-Cox*) америчке компаније Еххон је, у потрази за новим енергетским изворима који би могли заменити бензин и нафту, 1984. године синтетисала читаву фамилију угљеничних кластера, али нису успели да протумаче своје експерименталне резултате [8].

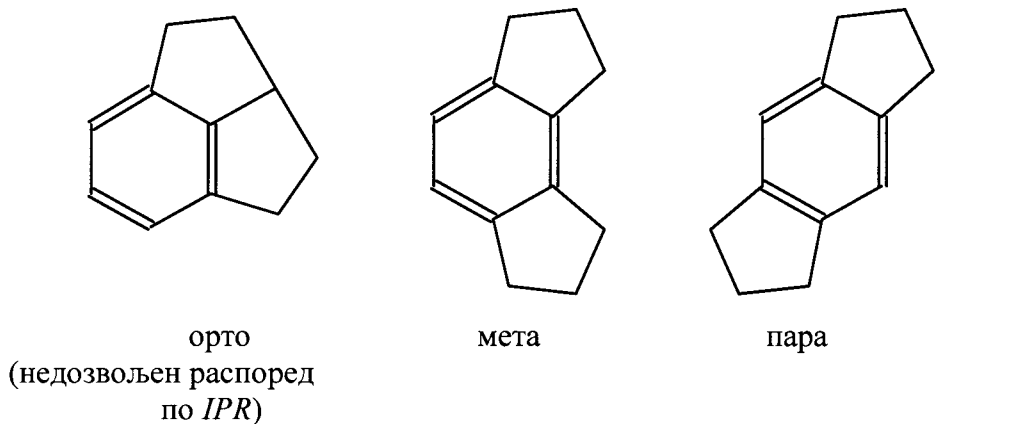


Слика 3. Масени спектар нових угљеничних материјала групе Калдор-Кокс [9]

2.2. СТРУКТУРА ФУЛЕРЕНА

Сферни молекул C_{60} и њему слични молекули из класе фулерена представљају затворене структуре лоптастог или капсуластог облика које чине атоми угљеника смештени у теменима полиедара, међусобно повезани хемијским везама. Ове везе формирају два типа прстенова: петочлане и шесточлане. Пентагони, којих нема у графиту, обезбеђују закривљеност површине.

У теоријским прорачунима структуре фулерена показано је [10] да је енергетски неповољно да два пентагона деле заједничку ивицу, јер то доводи до већег степена пирамидализације хибридизованог угљениковог атома и већег напона кавеза. Резултујућа тежња пентагона да буду раздвојени хексагонима назива се *правило изолованог пентагона (Isolated Pentagon Rule – IPR)*. Примена *IPR* знатно смањује број могућих изомера фулерена. Такође је показано да су структуре са отвореним кавезом енергетски неповољне и да су најстабилније оне структуре у којима је број двоструких веза у пентагонима минималан. Фаворизовани мета-распоред пентагона (слика 4) даље смањује број дозвољених изомера фулерена.



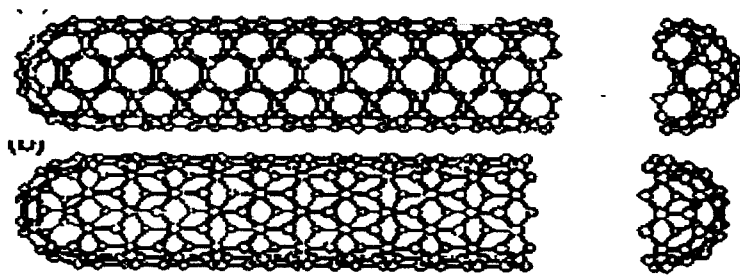
Слика 4. Могући распореди пентагона око једног хексагона у фулеренским структурама

2.3. НАНОТУБЕ

Од открића фулерена, хемија ковалентних и нековалентних деривата фулерена је у сталној експанзији. Експерименти у електричном луку показали су да је поред фулерена облика сфере могуће синтетисати и тубуларне фулерене (нанотубе). Угљеничне нанотубе су тубуларне структуре, хибриди фулерена и класичних угљеничних влакана која садрже цилиндричне графенске слојеве састављене од sp^2 -хибридизованих угљеникових атома. Нанотубе су шупље графитне тубуле са заобљеним крајевима налик на сфере код фулерена. Настају паралелно са фулеренима у процесу кондензације испареног графита на зидовима суда за испаравање. Око 25% исталоженог угљеника „дестилује” и враћа се на катоду; ове насlage су веома богате нанотубама.

Једнослојну нанотубу можемо замислити као структуру насталу пресецањем молекула лоптастог фулерена по екватору и спајањем две хемисфере једнослојним цилиндром изграђеним од хексагона истог пречника као што је пречник самог молекула фулерена. Ако се молекул C_{60} пресече

нормално на осу петог реда, настаје тубула облика столице; „цик-цак” тубула добија се пресецањем молекула C_{60} нормално у односу на осу трећег реда (слика. 5.а,б).



Слика 5. а) “Столица” и б) “цик-цак” структура нанотуба

Ицима и сарадници су утврдили да је спољашњи пречник једнослојних нанотуба 0,7-6,0 nm, а њихова дужина $\geq 1 \mu\text{m}$. Најдужа описана једнослојна нанотуба имала је дужину од 700 nm и пречник 0,9 nm, уз велики однос дужина/пречник (аспектни однос) од ~ 800 . Због релативно малих пречника у односу на дужину (велики аспектни однос dt/L , у опсегу 50-1500) нанотубе се са електронске тачке гледишта могу сматрати једнодимензионалним структурама.

У истраживањима нанотуба и осталих фулеренима сличних угљеничних структура микроскопија се показала као најважнија метода, а нарочито ТЕМ (*transmission electron microscopy*) са високом резолуцијом. Прва запажања везана за вишеслојне угљеничне нанотубе са веома малим пречницима (реда нанометра) изведена су на основу ТЕМ мерења материјала насталог у графитном електронском луку. ТЕМ истраживања нанотуба показују да оне имају структуру тубуларних угљеничних кавеза са максималним димензијама од приближно 10 μm дужине и 5-30 nm спољашњег пречника, што одговара молекулу са око 10^7 угљеникових атома. Снимци добијени када је електронски сноп готово паралелан са осом тубуле показују да се често у унутрашњости таквог кавеза налази низ коаксијалних унутрашњих структура на међусобном растојању од 3-4 nm.

Јоситака Јосида (*Yositaka Yosida*) [11] је предложио механизам раста циновских тубуларних суперфулерена. По њему, раст почиње од спољашњег кавеза и наставља се према центру. Унутар најмањег коаксијалног кавеза се без икаквог нарушавања структуре формира „воз” малих тубуларних фулерена који се додирују на крајевима. Њихови врхови нису заобљени као код великих тубула, већ су готово увек равни. Најмања унутрашња тубула има пречник од око 0,85 nm. За већину проучаваних структура постоји линеарна зависност између пречника и броја тубула.

Сматра се да тубула расте све док се на њеним крајевима формирају само шесточлани прстенови. Заобљени крајеви настају увођењем петочланих прстенова у тубуларну графенску структуру, када тубула престаје да расте, али прецизан механизам изградње није познат.

Многи аутори [12,13,14] сматрају да се електронске и механичке особине угљеничних нанотубула могу променити и побољшати увођењем страних материјала у централне унутрашње шупљине. Главни проблем је како „отворити” капсулу без њеног уништења. Предложене су методе оксидације помоћу угљен-диоксида, које су се показале успешним – том приликом је нападнут само врх капсуле, док је главни део, тело тубуле, остао недирнут. Овакве отворене нанотубе представљају „нано-епрувете” које се могу користити

за проучавање катализе и феномена нискодимензионалне физике и хемије. Могуће је и превести их у нано-жице ако се испуне металним атомима.

Угљеничне нанотубе представљају прелаз са микронске на нанотехнологију и имају потенцијално велику техничку примену. Допиране атомима метала, граде моноатомске мреже које се користе за производњу компјутерских чипова нове генерације. Нанотубе одговарајуће дужине могу се користити у војној, аутомобилској и авиоиндустрији. Веома су значајан нови анодни материјал у литијумским батеријама и као филамент за металне и керамичке композите у облику карбидних нановлакана (SiC , TiC , BC_x).

Теоријска истраживања и прорачуни показују да електричне особине нанотуба зависе од њихове величине и распореда C атома, што омогућава израду полупроводника нанометарских димензија са унапред дефинисаним карактеристикама.

2.4. СОФТВЕРСКИ ПАКЕТ *HYPERCHEM 6.0*

Теоријска истраживања описана у овом раду урађена су помоћу софтверског пакета *HyperChem*. То је програм за симулацију и моделовање молекула, који омогућава извођење комплексних физичко-хемијских прорачуна [15]. Дизајниран је да ради под оперативним системом *Windows*. У *HyperChem* су укључене следеће функције:

- цртање молекула и трансформисање у тродимензионалне моделе,
- ротација и транслација молекула,
- промена приказа, укључујући стерео-приказ и ознаке,
- задавање и извођење физичко-хемијских прорачуна, укључујући и молекулско-диманичке и *ab initio*, помоћу различитих молекулско-механичких и семиемпиријских рачунских метода,
- графичко представљање резултата прорачуна.

2.4.1. ТЕОРИЈЕ У ОСНОВИ *HYPERCHEM-A*

Основна теорија *HyperChem-a* је концепт површине потенцијалне енергије и разлике између класичне и квантне енергије, кинетичке и потенцијалне енергије, енергије електрона према енергији језгара итд.

Површина потенцијалне енергије је једноставни приказ класичне потенцијалне енергије V као функције молекулске структуре. За двоатомни молекул она представља криву која даје зависност енергије од међуатомског растојања (тачније, растојања између језгара). [16].

Сваки молекул поседује 6 степени слободе од којих зависи енергија (нпр. x , y и z - координате за сваки од два атома). Међутим, пет од ових шест степени слободе одговарају транслацији (3) и ротацији (2) чврстог молекула и не мењају енергију система. Последњи степен слободе је међуатомско растојање, које једино утиче на потенцијалну енергију.

Борн-Опенхајмерова апроксимација

Прва апроксимација квантне физике је Борн-Опенхајмерова апроксимација (*Born, Oppenheimer*) која се користи за дефинисање и

израчунавање површина потенцијалне енергије. Она се заснива на чињеници да је маса језгара много већа од масе електрона и проблем рачунања енергије система језгара и електрона своди на два раздвојена проблема; проблем енергије електрона и проблем енергије језгара у покрету. Енергија електрона се налази решавањем таласне функције електрона у пољу фиксних језгара. Проблем енергије језгара се решава за случај кретања језгара по површини потенцијалне енергије.

HyperChem користи апроксимативна решења Шредингерове једначине, која дозвољавају исцрпна физичко-хемијска истраживања. Грешка ових апроксимација је сведена на вредност експерименталних грешака у дефинисању параметара методе.

Код решавања Шредингерове једначине за неки вишеелектронски систем највећи проблем представља одбијање електрона. Не постоји аналитички метод за симултано описивање три или више тела. Најједноставнија апроксимација Шредингерове једначине је апроксимација независног електрона, као што је Хикелова (*Hueckel*) апроксимација за π -електронске системе. Метода израчунавања таласних функција на бази оваквог Хамилтонијана је **модел независног електрона** [17]. Ова метода је проширена од стране Хофмана на арбитарне системе са π и σ електронима. Назива се **проширена Хикелова теорија** (*Extended Hueckel Theory - EHT*).

У оквиру Борн-Опенхајмерове апроксимације електронска Шредингерова једначина решава се у форми:

$$H_{elec} \Psi_{elec} = E_{elec} \Psi_{elec} \quad [\text{Јед. 1}]$$

где Ψ_{elec} описује положај и кретање електрона у молекулу (у пољу фиксних језгара). Апроксимација независног електрона претпоставља да се H_{elec} , која описује колективно све електроне, може представити ефективним једноелектронским хамилтонијаном.

Да би енергија молекулских орбитала могла бити израчуната, орбиталама се мора дати математички облик. Најчешћа апроксимација је **линеарна комбинација атомских орбитала** (LCAO), где се молекулске орбитале представљају линеарном комбинацијом атомских орбитала атома који чине молекулски систем.

Шредингерова једначина за независни електрон има облик:

$$H \cdot C = SC\varepsilon \quad [\text{Јед. 2}]$$

где је: $S_{\mu\nu} = \int \phi_{\mu} \phi_{\nu} d\tau$ - интеграл преклапања орбитала; ϕ_{μ} , ϕ_{ν} - атомске орбитале

Методe самоусаглашеног поља

У правим методама независног електрона матрични елементи за неспецифични хамилтонијан најчешће су емпиријски. Хартри-Фоков метод (*Hartree, Fock*) самоусаглашеног поља уводи дефинисане математичке апроксимације којима се елиминишу ови проблеми, али се морају решавати итеративним методама до самосагласности.

У оквиру *HyperChem*-а у Хартри-Фоковом методу постоји могућност избора ограниченог (Restricted - RHF) и неограниченог (Unrestricted - UHF) прорачуна. RHF означава стање у којем електрони истог спина заузимају исте просторне орбитале ψ_i . UHF претпоставља да постоје две групе просторних

молекулских орбитала – једне садрже електроне једног спина - ψ_i^α , а друге електроне супротног спина - ψ_i^β . Ове орбитале нису спарене; ψ_i^α немају исту енергију као ψ_i^β . Ова метода се може користити код система који садрже неспарене електроне (дублетна или триплетна стања).

Апроксимација занемаривања диференцијалног преклапања

За разлику од употребе ефективног једноелектронског хамилтонијана какав се користи код ЕНТ, други приступ заснива се на експлицитној математичкој апроксимацији: занемаривању извесних термова диференцијалног преклапања.

Главна тешкоћа у решавању Шредингерове једначине за молекуле је велики број ($\sim N^4$) двоелектронских интеграла које је потребно израчунати. Ови интеграл дефинисани су као:

$$(\mu\nu|\lambda\sigma) = \int \varphi_\mu^A(\mathbf{r}_1) \cdot \varphi_\mu^B(\mathbf{r}_1) \cdot r_{12}^{-1} \cdot \varphi_\lambda^C(\mathbf{r}_2) \cdot \varphi_\sigma^D(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad [\text{Јед. 3}]$$

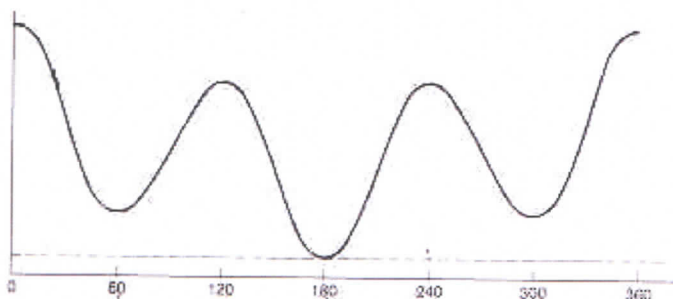
где је φ_μ^A атомска орбитала на атому А. Интеграл укључују базис функција φ_μ на четири различита центра - А, В, С и D. Главне функције могу се посматрати као двоцентрична расподела наелектрисања који интеграцијом дају интеграл преклапања:

$$s_{\mu\nu} = \int \varphi_\mu^A(\mathbf{r}_1) \cdot \varphi_\mu^B(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 \quad [\text{Јед. 4}]$$

Апроксимација диференцијалног преклапања предвиђа да је у већини ситуација $S_{\mu\nu} \ll 1$ и да се може занемарити. Најједноставнија апроксимација је потпуно занемаривање диференцијалног преклапања (*Complete Neglect of Differential Overlap - CNDO*), као и занемаривање диатомског диференцијалног преклапања.

Геометријска оптимизација молекула

Најважније структуре су стабилне, равнотежне геометрије молекула и прелазних стања. Равнотежна геометрија молекула описана је координатама дубоког (глобалног) минимума на површини потенцијалне енергије (слика 6). Остали минимуми одговарају прелазним стањима.



Слика 6. Потенцијална енергија молекула са глобалним и локалним минимумом

HyperChem може да изврши геометријску оптимизацију (минимизацију енергије) и молекулско-механичким и квантно-механичким методама. Резултати геометријске оптимизације су координате молекулске структуре која представља минимум потенцијалне енергије и задовољава једначину:

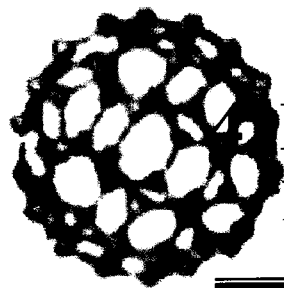
$$\delta V / \delta r_1 = 0$$

[Јед. 5]



Циљ овог истраживања је конструкција и процена стабилности угљеничних нанотуба изведених из молекула фулерена C_{60} . У ту сврху потребно је:

- Конструисати стабилне моделе нанотуба пресецањем молекула C_{60} по екватору и уметањем појасева шесточланих прстенова применом програма *HyperChem*.
- Изабрати оптималну рачунарску методу за геометријску оптимизацију и израчунавање физичко-хемијских и квантно-механичких параметара за молекуле изведене из структуре фулерена C_{60} (У оквиру овог софтверског пакета постоје стандардне методе за израчунавање на неким класама молекула; како су фулерени релативно нова група материјала општи метод за израчунавање још увек није дефинисан).
- Извршити геометријску оптимизацију (израчунати координате структуре са минимумом енергије) конструисаних угљеничних нанотуба и израчунати њихове енергетске карактеристике применом одабране оптималне рачунске методе.
- Проценити стабилност датих нанотуба на основу израчунате вредности за њихову топлоту формирања као једног од параметара стабилности.
- Утврдити математичку зависност стабилности нанотуба и њихових димензија.



РАЧУНСКИ ДЕО I – Избор оптималне методе

При одређивању оптималне методе за математичку стимулацију молекула, као критеријуми за ефикасност и тачност узети су:

- Време потребно за конвергенцију при геометријској оптимизацији молекула,
- Израчунате координате атома после оптимизације,
- Израчунате вредности за топлоту формирања и диполни моменат.

Оптимална метода треба да за што краће време да најмање одступање од експериментално утврђених вредности.

Рачунање у *HyperChem*-у могуће је помоћу молекулско-механичких и семиемпиријских метода.

Молекулско-механичке методе

Молекулско-механичке методе користе аналитичку, диференцијабилну и релативно једноставну функцију потенцијалне енергије $V(R)$ – поље сила, за описивање интеракција у систему атома, задатом њиховим картезијанским координатама R . Молекулско-механичке методе у *HyperChem*-у нуде рад са четири поља сила:

- **MM+** је најопштија метода за молекулско-механичке прорачуне, развијена за органске молекуле.
- **AMBER**, **BIO+** и **OPLS** су модификације **MM+** методе, развијене за класе макромолекула (протеине и нуклеинске киселине).

Избор поља сила зависи од параметара тог поља, дефинисаних на основу експерименталних резултата за молекуле сличног типа. Сва поља садрже исте појмове: везе, углове, Ван дер Валсове и електростатичке интеракције.

При геометријској оптимизацији молекулско-механичким методама могуће је користити четири различита оптимизера (алгоритма за одређивање минимума енергије у молекулу):

- **Алгоритам најстрмијег нагиба** изазива ограничене промене структуре и геометрије молекула; најбоље га је користити када је молекулски систем јако удаљен од енергетског минимума. Ова метода није погодна за макромолекулске системе.
- **Флечер-Ривсов алгоритам** (*Fletcher-Reeves*) је метода конјугованог градијента која боље конвергира од претходне методе.
- **Полак-Рибиијеров алгоритам** (*Polak-Ribiere*) конвергира брже од Флечер-Ривсовог, али захтева више рачунарске меморије.

- **Блок-дијагонални Њутн-Рафсонов алгоритам** (*Newton-Raphson*) израчунава енергетске минимуме преко другог извода енергије. Ова метода је бржа од свих претходних.

Семиемпиријске методе

Семиемпиријске методе имају неколико атрактивних особина:

- Нису им потребне информације о положају и геометрији веза у молекулском систему.
- Параметри елемената (обично добијени емпиријски или преко *ab initio* прорачуна) не зависе од хемијског окружења тог елемента.
- Ове методе могу да описују настанак и раскидање веза.

HyperChem може да изводи семиемпиријске молекулске прорачуне на молекулима који садрже 100 и више атома. Нема ограничења броја атома, али велике структуре захтевају предугачко време. Све резултате, укључујући и диполне моменте и атомске набоје, могуће је интерпретирати користећи једноставне концепте LCAO и теорије молекулских орбитала.

Поред геометрије молекула, енергије молекула и топлоте формирања, *HyperChem* рачуна и представља и функције густине набоја и спина, атомска наелектрисања, диполне моменте и електростатички потенцијал над молекулом. Ови резултати се израчунавају и графички приказују.

Проширена Хикелова метода

У проширеној Хикеловој методи, енергије атомских орбитала су дефинисане, а укупна енергија молекула је сума енергије попуњених орбитала, што није случај код осталих метода. Ова метода је најједноставнија и најбржа, али и најмање прецизна јер у потпуности занемарује електрон-електрон интеракције.

NDO (Neglect of Differential Overlap) metode

NDO методе дају тачније резултате од претходне јер занемарују неке, али не све интеракције електрона. У једном делу прорачуна занемарују се ефекти свих густина преклапања атомских орбитала, што смањује број интеграла електрон-електрон интеракција и скраћује време рачунања.

a) CNDO, INDO, MINDO/3, ZINDO/1 u ZINDO/S metode

Најпростија NDO метода је **CNDO** (*Complete Neglect of Differential Overlap*), која узима да одбијање између електрона зависи само од природе атома, а не од одређених орбитала. С обзиром да занемарује готово све интеграле измене, даје веома поједностављену слику. **INDO** метода (*Intermediate Neglect of Differential Overlap*) коригује неке од најважнијих проблема CNDO. Код ње интегралне измене између електрона истог атома нису исти, него зависе од орбитала у којима се налазе електрони. Иако то захтева увођење нових параметара, додатно време потребно за израчунавање је занемарљиво. **MINDO/3** (Modified INDO, верзија 3) користи исту апроксимацију, уз мале измене. **ZINDO/1** је модификована INDO/1 метода која садржи параметре за израчунавање енергетских стања у системима који садрже прелазне метале. **ZINDO/S** садржи параметре који омогућавају симулацију UV/Vis спектра код једнострукто побуђених конфигурацијских интеракција.

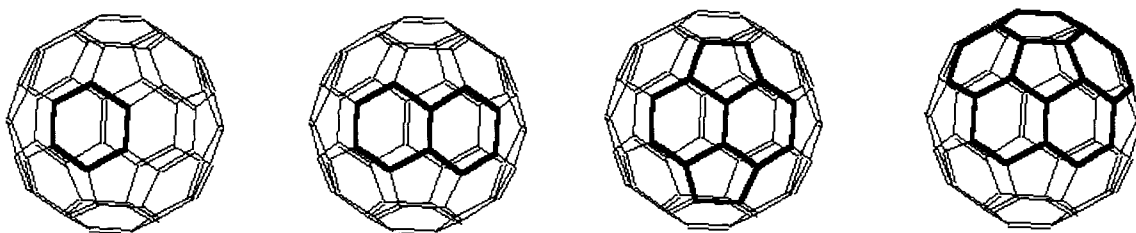
b) MNDO, AM1 i PM3 metode

Све три методе заснивају се на **NDDO** (*Neglect of Diatomic Differential Overlap*) апроксимацији. Поред интеграла измене из INDO, укључују и додатну класу интеграла електронског одбијања што омогућава израчунавање интеракција електрон-електрон са различитих атома. Израчунавање додатних интеграла је временски захтевно, тако да је време потребно за ове методе 1,5 пута дуже него код INDO или MINDO/3 метода.

AM1 је најтачнија метода укључена у *HyperChem* и најчешће даје најбоље квантитативне информације. AM1 успешно представља водоничне везе, тачно предвиђа активационе енергије за хемијске реакције и топлоте формирања са грешком 40% мањом него MNDO. У већини случајева, **PM3** је побољшање AM1. Ова метода је функционално слична AM1, али користи алтернативни параметарски сет.

4.1. ИЗБОР АЛГОРИТМА ЗА ГЕОМЕТРИЈСКУ ОПТИМИЗАЦИЈУ

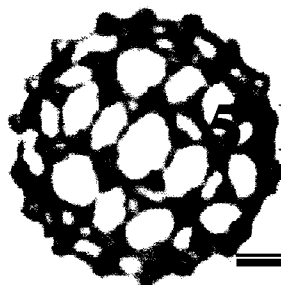
У избору најбољег оптимизера коришћена је MM+ метода за израчунавање оптималне геометрије неких органских молекула аналогних коришћеним молекулима (ароматични угљоводоници, угљоводоници пирацилен и коранулен који представљају делове фулеренске сфере; бакминстерфулерен, слика 7).



Слика 7. Угљоводоници бензен, нафтален, пирацилен и коранулен инкорпорирани у фулеренску сферу

4.2. ИЗБОР РАЧУНСКЕ МЕТОДЕ ЗА SINGLE POINT ПРОРАЧУНЕ

Тачност и прецизност семиемпиријских метода је на примерима бензена и нафталена проверена израчунавањем топлоте формирања свим семиемпиријским методама, и њиховим поређењем са табличним вредностима.



РЕЗУЛТАТИ I – Избор оптималне методе

5.1. ИЗБОР АЛГОРИТМА ЗА ГЕОМЕТРИЈСКУ ОПТИМИЗАЦИЈУ

У табели 1. дато је време потребно за геометријску оптимизацију органских молекула – делова фулеренске сфере, применом свих метода укључених у *HyperChem*.

Табела 1. Време утрошено за геометријску оптимизацију органских молекула помоћу различитих оптимизационих алгоритама

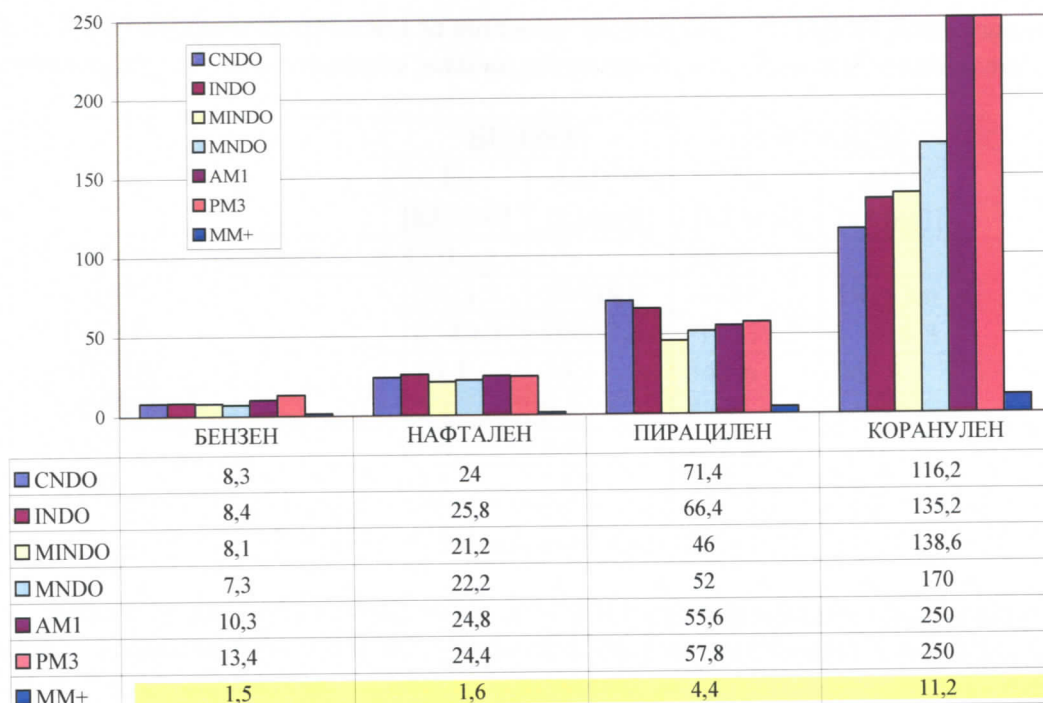
Алгоритам	t (s)				
	бензен	нафтаген	пирацилен	коранулен	C ₆₀
Најстрмији нагиб	3,2	4,0	10,0	>70 НК*	>100 НК*
Флечер-Ривсов	1,6	1,8	4,8	11,2	24,6
Полак-Рибидјеров	1,5	1,6	4,4	8,6	15,8
Њутн-Рафсонов	1,2	1,8	2,0	4,8	8,8

*НК – низ није конвергирао после задатог броја циклуса

Иако је Њутн-Рафсонов алгоритам најбржи, ограничен је само на молекулско-механичку ММ+ методу и немогуће га је користити у семиемпиријским прорачунима. Зато је у даљим прорачунима као најбољи оптимизер коришћен Полак-Рибидјеров алгоритам.

Геометријска оптимизација наведених молекула извршена је и семиемпиријским методама CNDO, INDO, MINDO/3, MNDO, AM1 и PM3.

На слици 8. дато је поређење времена утрошеног за геометријску оптимизацију ММ+ молекулско-механичком методом и наведеним семиемпиријским методама.



Слика 8. Време утрошено за оптимизацију молекула бензена, нафталена, пирацилена молекулско-механичким и семиемпиријским методама

Из графика се види да је време за молекулско-механичке прорачуне и до 15 пута краће него код појединих семиемпиријских метода. Код малих молекула нису велике разлике у утрошеном времену за семиемпиријске прорачуне. Најкраће време је у већини случајева потребно код примене MINDO/3 и MNDO. Међутим, у случају већих молекула, као што су коранулен и фулерен (није приказан на графику), методе AM1 и PM3 не доводе до конвергенције.

Израчунате координате оптимизираних молекула, добијене молекулско-механичким и семиемпиријским методама, идентичне су код обе групе метода (прилог). Због тога је практичније користити молекулско-механичку MM+ методу јер за краће време даје подједнако тачне резултате за геометрију молекула.

5.2. ИЗБОР РАЧУНСКЕ МЕТОДЕ ЗА *SINGLE POINT* ПРОРАЧУНЕ

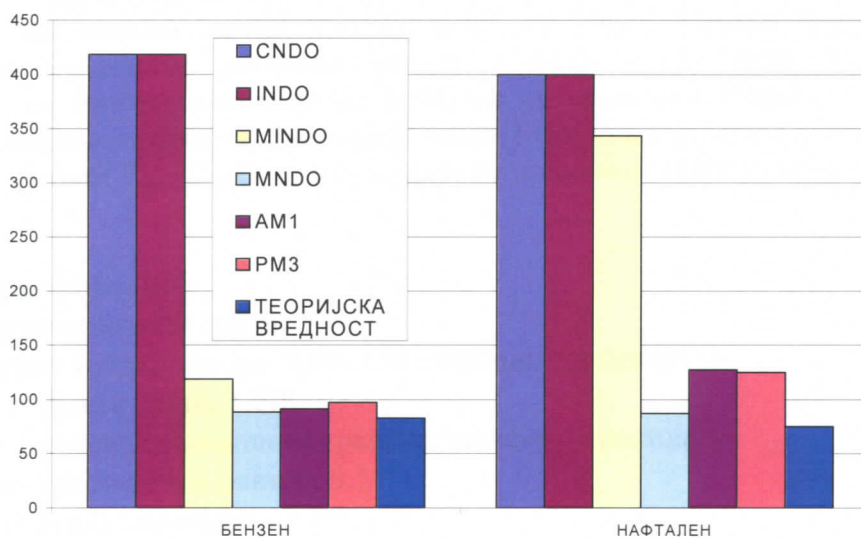
У табели 2. и на слици 9. приказане су табличне и израчунате вредности за топлоту формирања H_f за ароматичне угљоводонике инкорпориране у фулеренску сферу.

Табела 2. Израчунате вредности за топлоту формирања (добијене различитим семиемпиријским методама) и њихово одступање од табличних вредности

	БЕНЗЕН		НАФТАЛЕН	
	H _f [kJ/mol]	ΔH * [kJ/mol]	H _f [kJ/mol]	ΔH * [kJ/mol]
Таблична вредност	83.0		75.5	
CNDO	10921.3	10838.3	-18188.2	18263.6
INDO	10540.3	10457.3	-17539.3	17614.8
MINDO/3	119.1	36.1	343.6	268.1
MNDO	88.8	5.8	87.2	11.8
AM1	91.6	8.6	127.4	52.1
PM3	97.5	14.5	125.2	49.7

$$* |\Delta H| = |H_{f(\text{израчунато})} - H_{f(\text{таблично})}|$$

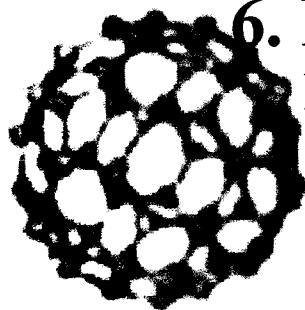
Запажа се да у оба случаја метода MNDO даје минимална одступања од табличне вредности (6% у случају бензена; 13% у случају нафталена). Методе CNDO и INDO дају изузетно високе вредности за топлоту формирања. Код осталих метода одступање од табличних вредности је толерантно.



Слика 9. Поређење израчунатих вредности за топлоту формирања за бензен и нафтален добијених применом различитих семиемпиријских метода

Поређењем утрошеног времена и прецизности може се закључити да је за органске угљеничне системе најоптималнији поступак израчунавања помоћу MNDO семиемпиријске методе.

Стога су у даљем раду сви молекули нанотуба над којима су вршени прорачуни оптимизирани молекулско-механичком MM+ методом, а затим је за израчунавање енергије и топлоте формирања у *Single Point* прорачунима коришћена MNDO метода, како би се добили најтачнији и репродуцибилни резултати.

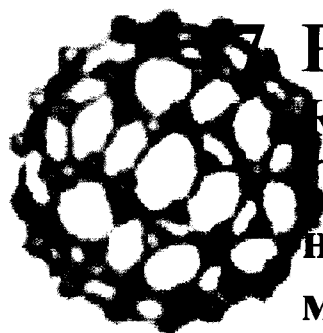


6. РАЧУНСКИ ДЕО II – Конструкција нанотуба C_{60} - C_{210} и израчунавање њихових квантно -механичких параметара

Нанотубе C_{60} - C_{210} су конструисане у програму *HyperChem* бисекцијом молекула фулерена у две симетричне хемисфере нормално на осу петог реда и додавањем појасева од 5 хексагона (10 C атома), водећи рачуна о оптималном распореду двоструких веза. Молекул C_{60} као основна структура, и деривати добијени на описан начин геометријски су оптимизирани коришћењем молекулско-механичке рачунске методе у MM+ пољу сила. Оптималне структуре са минимумом енергије добијене су применом Полак-Рибјеровог оптимизационог алгорита. Енергије и топлоте формирања серије хипотетичких нанотуба на бази C_{60} (C_{60} - C_{210}) израчунате су применом семиемпиријске методе MNDO.

Параметри прорачуна:

- Мултиплицитет спина: 1
- Лимит конвергенције: 0.001 (50 итерација по циклусу)
- Купловање спина: UHF
- Диелектрична константа средине: зависна од растојања
- Електростатички фактор: 0.5
- Ван дер Валсов фактор: 0.5

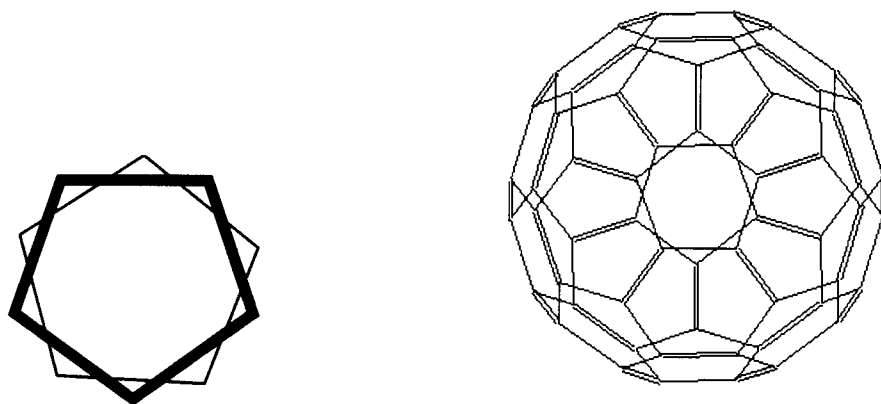


РЕЗУЛТАТИ II – Конструкција нанотуба C_{60} - C_{210} и израчунавање њихових квантно - механичких параметара

7.1. МОДЕЛОВАЊЕ МОЛЕКУЛА НАНОТУБА

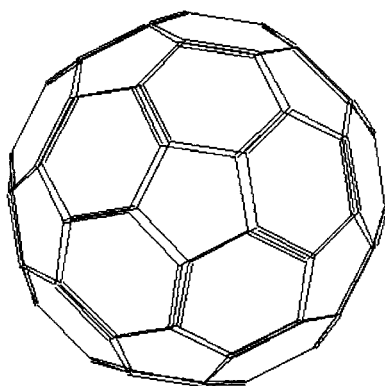
У енергетски оптималној структури фулерена не постоје заједничке везе између два пентагона, што је дефинисано правилом изолованог пентагона (IPR - *Isolated Pentagon Rule*). Друго основно правило стабилности у хемији фулерена предвиђа структуре у којима не постоје двоструке везе унутар петочланих прстенова у оптимизираној структури.

Оптимизиране структуре свих симулираних нанотуба C_{60} - C_{210} (сем C_{70}) понашају се у складу са овим правилима. У C_{60+10m} , где је m паран број (C_{80} , C_{100} , C_{120} , C_{140} , C_{160} , C_{180} и C_{200}), положај два наспрамна пентагона на заобљеним крајевима нанотуба идентичан је са њиховим положајем у полазном C_{60} (антипаралелан положај, слика 10).



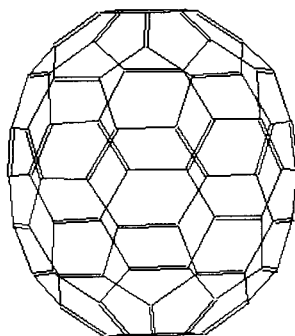
Слика 10. Антипаралелан положај наспрамних пентагона на крајевима нанотуба, дуж осе петог реда

Деривати код којих је m непаран број ($m = 1,3,5,7,9,11,13,15$) имају паралелан положај пентагона (слика 11) и њихова симетрија је стога нижа, јер им недостаје центар симетрије.



Слика 11. Паралелан, мање симетричан положај пентагона

За све симулиране нанотубе могуће је конструисати IPR структуре у којима не постоје двоструке везе унутар пентагона ([5,6] везе), са изузетком молекула C_{70} . Оптимална структура C_{70} садржи 5 двоструких веза у пет пентагона који су симетрично распоређени око појаса додатих хексагона (Слика 12)



Слика 12. Пет [5,6] двоструких веза у оптималној структури C_{70}

Све симулиране структуре садрже 12 пентагона и различит број хексагона (h). Ако се укупан број C атома у нанотуби обележи са n ($n = 60 + 10m$), тада се број хексагона може израчунати преко n или m :

$$h = n/2 - 10 \quad [\text{Јед. 6}]$$

$$h = 5m + 20 \quad [\text{Јед. 7}]$$

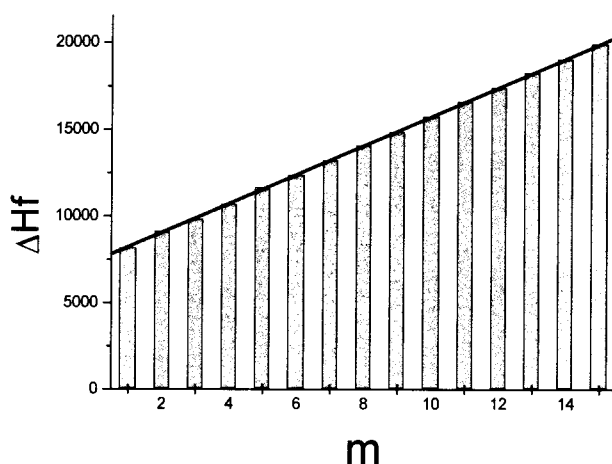
7.2. ТОПЛОТА ФОРМИРАЊА

Резултати израчунавања топлоте формирања нанотуба C_{60+10n} (C_{60} - C_{210}) дати су у табели 3.

Табела 3. Израчунате вредности за топлоту формирања у серији нанотуба C_{60+10n}
(m = број додатих појасева од 5 хексагона; h = укупан број хексагона)

Нанотуба	m	$\ln m$	ΔH_f (kJ/mol)	$\Delta H/nC$ [kJ/mol]	h
C_{60}	0	-	7407,5	123,46	20
C_{70}	1	0,00	8216,7	117,40	25
C_{80}	2	0,69	9174,5	114,68	30
C_{90}	3	1,10	9891,5	109,91	35
C_{100}	4	1,38	10749,6	107,50	40
C_{110}	5	1,61	11660,1	106,00	45
C_{120}	6	1,79	12409,2	103,41	50
C_{130}	7	1,94	13245,2	101,90	55
C_{140}	8	2,08	14130,7	100,93	60
C_{150}	9	2,20	14911,4	99,41	65
C_{160}	10	2,30	15746,9	98,42	70
C_{170}	11	2,40	16621,3	97,77	75
C_{180}	12	2,48	17421,3	96,79	80
C_{190}	13	2,56	18252,6	96,07	85
C_{200}	14	2,64	19117,3	95,59	90
C_{210}	15	2,71	19932,5	94,92	95

Графички приказ зависности топлоте формирања ΔH од m у серији нанотуба C_{60+10n} дата је на слици 13.



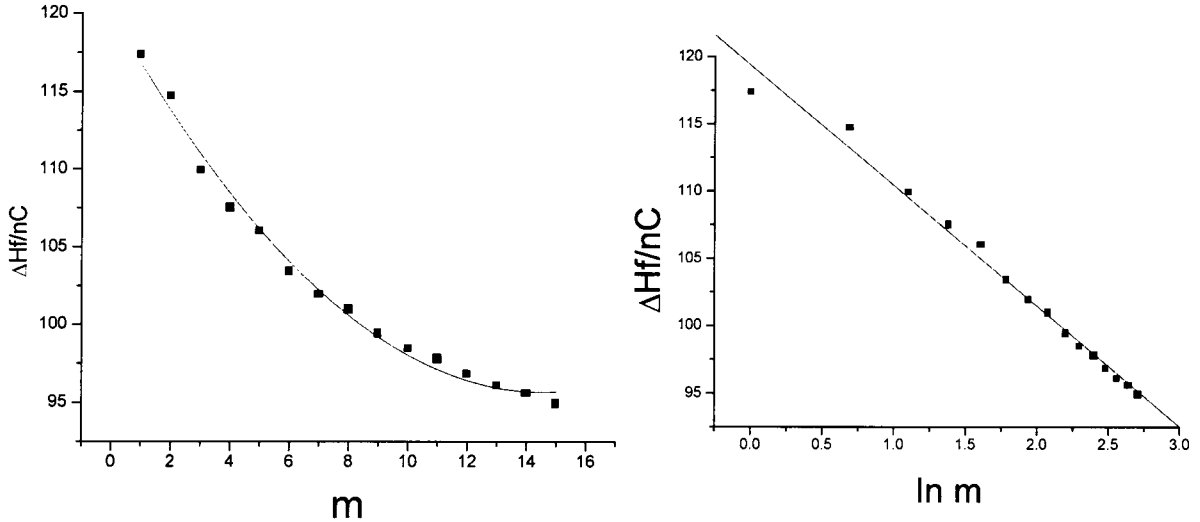
Слика 13. Топлоте формирања нанотуба на бази фулерена C_{60} - C_{210}

Зависност ΔH - m је права линија која расте са нагибом од 199 kJ по јединици m .

Топлоту формирања било које хипотетичне нанотубе изведене из фулерена C_{60} могуће је израчунати према изразу:

$$\Delta H_f = (\Delta H_f(C_{60}) + 199m) \pm 30,98 \text{ kJ/mol} \quad [\text{Јед. 8}]$$

Топлота формирања по С атому опада са дужином нанотубе (слика 14).

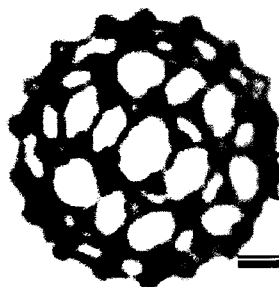


Слика 14. Топлоте формирања по С атому за фулеренске нанотубе $C_{60} - C_{210}$
 а) $\Delta H_f/nC$ vs. m , б) $\Delta H_f/nC$ vs. $\ln m$

Топлота формирања ΔH_f по С атому зависи од m и опада експоненцијално са порастом m (слика 14.а), а зависност $\Delta H_f/nC$ vs. $\ln m$ представља праву линију (слика 14.б) која одговара изразу:

$$\Delta H_f/nC = (121,4 - 2,35 \ln m) \pm 0,25 \text{ kJ/mol} \quad [\text{Јед. 9}]$$

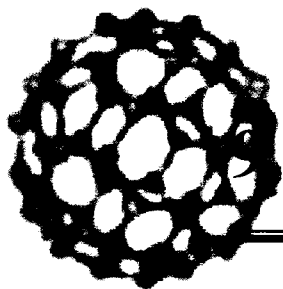
и приближава се граничној вредности од $30,8 \text{ kJ/mol}$ за нанотубе са просечном дужином од $1 \mu\text{m}$. Ово је у складу са експериментално одређеним вредностима за топлоту формирања бакминстерфулерена и фулерена C_{70} , чије топлоте формирања одређене калориметријски при стандардним условима износе $42,5 \text{ kJ/mol}$ по С атому (2553 kJ/mol по молекулу C_{60}) и $40,4 \text{ kJ/mol}$ по С атому у C_{70} .



8. ЗАКЉУЧАК

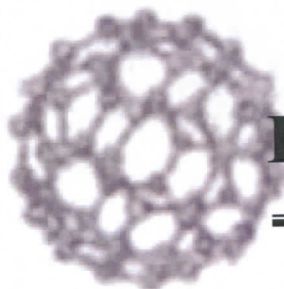
На основу добијених резултата може се закључити следеће:

- Линеарне нанотубе изведене из фулерена C_{60} могуће је конструисати помоћу софтвера за симулацију и израчунавање молекулских квантномеханичких параметара *HyperChem*, пресецањем молекула фулерена по екватору и уметањем појасева који се састоје искључиво од хексагона, поштујући правило изолованог петоугла и I_h симетрију молекула.
- За израчунавање квантномеханичких параметара фулеренских нанотуба најоптималнија метода је молекулско-механичка метода *MM+* јер за најкраће време даје прецизне резултате за геометрију молекула.
- При геометријској оптимизацији нанотуба најпрецизније резултате даје семиемпиријска *MNDO* метода.
- Топлота формирања фулеренских нанотуба линеарно расте са бројем уметнутих појасева хексагона и може се израчунати на основу једначине предложене у раду, која је добијена екстраполацијом експерименталних података.
- Топлота формирања ΔH_f по C атому такође зависи од броја уметнутих појасева хексагона (m) и опада експоненцијално са порастом њиховог броја. Топлота формирања по C атому у нанотуби линеарно зависи од вредности $ln m$ и приближава се граничној вредности од $30,8 \text{ kJ/mol}$ за нанотубе са просечном дужином од $1 \mu\text{m}$. Ово је у складу са експериментално одређеним вредностима за топлоту формирања бакминстерфулерена и фулерена C_{70} , чије топлоте формирања одређене калориметријски износе $42,5 \text{ kJ/mol}$ по C атому (2553 kJ/mol по молекулу C_{60}) и $40,4 \text{ kJ/mol}$ по C атому у C_{70} .
- С обзиром на велику потенцијалну примену фулеренских нанотуба у техници, теоретска истраживања на пољу стабилности и димензија нанотуба представљају значајан допринос производњи полупроводника нанометарских димензија са задатим карактеристикама.



ЛИТЕРАТУРА

1. Saffaro, L. In: Taliani, C., Ruani, G., Zamboni, R. (Eds), *Proc. of the First Italian Workshop on Fullerenes: Status and Perspectives*, **2**, 55, World Scientific, Singapore (1992)
2. Jones, D.E.H. *New Scientist*, **35(519)**, 245 (1966)
3. Osawa, E. *Kagaku*, **25**, 854 (1970)
4. Iijima, S. *Nature*, **354**, 56 (1991)
5. Iijima, S., Ichihashi, T., Ando, Y. *Nature*, **356**, 7776 (1992)
6. Kraetschmer, W., Lamb, L.D., Fostiropoulos, K., Huffman, D.R. *Nature*, **347**, **354** (1990)
7. Bochvar, D.A., Gal'pern, E.G. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 209, 610 (1973) English translation: *Proc. Acad. Sci. USSR*, 209, 239 (1973)
8. Vojinovic-Miloradov, M. *Fullerenes & Nanotubes Review*, **1(2-3)**, Uvodnik (1997)
9. Rohlfing, E.A., Cox, D.M., Kaldor, A. *J. Chem. Phys.*, **81**, 3322 (1984)
10. Klein, D.J., Schmalz, T.G., Hite, T.G., Seitz, W.A. *J. Am. Chem. Soc.*, **108**, 1301 (1986)
11. Yosida, Y. *Fullerene Science and Technology* 1993, **1(2)**, 145-157 (1993)
12. Dresselhaus, M., Dresselhaus, G., Eklund, P., *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, Academic Press, 1996
13. Vojinovic-Miloradov, M., Adamov, J., Koruga, D., *Osnovne karakteristike tubularnih fulerena*, Hemijski pregled, 12, 21 (1996)
14. Nikolic, A., Radmilovic, V., Simicic, M., Koruga, D., *Nanotube: osnovna strukturna i energetska svojstva*, *Fullerenes and Nanotubes Review*, 2-3, 44 (1997)
15. *HyperChem™ Release 5.0 for Windows*, Reference Manual, Autodesk, Inc. (1997)
16. Margenau, H., Kestner, N.R., *Theory of Intramolecular Forces*, Pergamon Press, Oxford (1971)
17. Gutsche, C.D., Pasto, D. *Fundamentals of Organic Chemistry*, Prentice-Hall, Inc., New Jersey (1985)



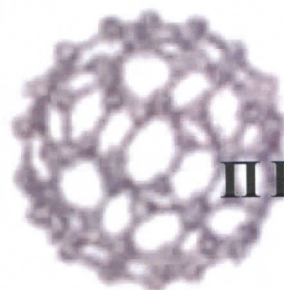
БИОГРАФИЈА



Смиља Крајиновић је рођена 23. јуна 1964. године у Новом Саду, где је завршила основну и средњу школу и апсолвирала на Природно-математичком факултету у Новом Саду 1988. године, на смеру професор физике.

Школске 2006/07. године наставила је студије на Природно-математичком факултету.

Тренутно је запослена у Фонду за подршку инвестиција у Војводини.



ПРИЛОГ 1

КООРДИНАТЕ СВИХ АТОМА У МОЛЕКУЛИМА ПИРАЦИЛЕНА И КОРАНУЛЕНА, ИЗРАЧУНАТЕ ГЕОМЕТРИЈСКОМ ОПТИМИЗАЦИЈОМ ПОМОЋУ МОЛЕКУЛСКО-МЕХАНИЧКЕ ММ+ И СЕМИЕМПИРИЈСКЕ MNDO МЕТОДЕ

Piracilen

MM+

MNDO

NET CHARGES AND COORDINATES

Atom	Z	Coordinates (Angstrom)		
		x	y	z
1	6	-1.80908	-1.77366	-0.00858
2	6	-1.86300	-0.42821	-0.00521
3	6	-0.71710	0.23875	-0.00211
4	6	0.44376	-0.37624	-0.00130
5	6	0.53565	-1.69892	-0.00366
6	6	-0.60776	-2.41008	-0.00786
7	6	-0.80900	1.56143	0.00368
8	6	0.33441	2.27257	0.00954
9	6	1.53573	1.63614	0.01044
10	6	1.58967	0.29071	0.00531
11	6	1.86543	-1.89688	0.00100
12	6	2.50039	-0.69829	0.00645
13	6	-2.77374	0.56076	-0.00190
14	6	-2.13879	1.75936	0.00348
15	1	-2.74596	-2.35533	-0.00969
16	1	-0.56273	-3.51192	-0.00851
17	1	0.28939	3.37439	0.01583
18	1	2.47260	2.21779	0.01733
19	1	2.36098	-2.88191	0.00249
20	1	3.59367	-0.55502	0.01328
21	1	-3.86704	0.41745	-0.00145
22	1	-2.63439	2.74434	0.00911

NET CHARGES AND COORDINATES

Atom	Z	Coordinates (Angstrom)		
		x	y	z
1	6	-1.80908	-1.77366	-0.00858
2	6	-1.86300	-0.42821	-0.00521
3	6	-0.71710	0.23875	-0.00211
4	6	0.44376	-0.37624	-0.00130
5	6	0.53565	-1.69892	-0.00366
6	6	-0.60776	-2.41008	-0.00786
7	6	-0.80900	1.56143	0.00368
8	6	0.33441	2.27257	0.00954
9	6	1.53573	1.63614	0.01044
10	6	1.58967	0.29071	0.00531
11	6	1.86543	-1.89688	0.00100
12	6	2.50039	-0.69829	0.00645
13	6	-2.77374	0.56076	-0.00190
14	6	-2.13879	1.75936	0.00348
15	1	-2.74596	-2.35533	-0.00969
16	1	-0.56273	-3.51192	-0.00851
17	1	0.28939	3.37439	0.01583
18	1	2.47260	2.21779	0.01733
19	1	2.36098	-2.88191	0.00249
20	1	3.59367	-0.55502	0.01328
21	1	-3.86704	0.41745	-0.00145
22	1	-2.63439	2.74434	0.00911

Koramulen

MM+

NET CHARGES AND COORDINATES

<u>Atom</u>	<u>Z</u>	Coordinates (Angstrom)		
		x	y	z
1	6	-2.92067	-2.41233	-0.88630
2	6	-3.04567	-1.08949	-0.61628
3	6	-1.89455	-0.59045	-0.21230
4	6	-0.76463	-1.25749	-0.07868
5	6	-0.58832	-2.54015	-0.32529
6	6	-1.74615	-3.10568	-0.74686
7	6	-1.67082	0.66302	0.13182
8	6	-0.40275	0.77067	0.47822
9	6	0.15725	-0.41631	0.34805
10	6	0.69618	-2.89842	-0.07989
11	6	1.65451	-2.02385	0.36360
12	6	1.41648	-0.71069	0.60289
13	6	0.19832	1.87066	0.88557
14	6	1.50261	1.62406	1.16179
15	6	2.08478	0.39019	1.02686
16	6	-1.99200	2.79696	0.54408
17	6	-0.67368	2.90883	0.90453
18	6	-2.55943	1.63652	0.13209
19	6	-3.99967	-0.12630	-0.63545
20	6	-3.76736	1.17687	-0.27791
21	1	-3.81623	-2.95447	-1.23421
22	1	-1.73687	-4.18217	-0.98800
23	1	0.97881	-3.95168	-0.24630
24	1	2.67528	-2.40353	0.53898
25	1	2.12273	2.46502	1.51569
26	1	3.15388	0.28073	1.27616
27	1	-2.63048	3.69556	0.59147
28	1	-0.29667	3.89351	1.22919
29	1	-5.01588	-0.41273	-0.95563
30	1	-4.60457	1.89421	-0.32220

MNDO

NET CHARGES AND COORDINATES

<u>Atom</u>	<u>Z</u>	Coordinates (Angstrom)		
		x	y	z
1	6	-2.92067	-2.41233	-0.88630
2	6	-3.04567	-1.08949	-0.61628
3	6	-1.89455	-0.59045	-0.21230
4	6	-0.76463	-1.25749	-0.07868
5	6	-0.58832	-2.54015	-0.32529
6	6	-1.74615	-3.10568	-0.74686
7	6	-1.67082	0.66302	0.13182
8	6	-0.40275	0.77067	0.47822
9	6	0.15725	-0.41631	0.34805
10	6	0.69618	-2.89842	-0.07989
11	6	1.65451	-2.02385	0.36360
12	6	1.41648	-0.71069	0.60289
13	6	0.19832	1.87066	0.88557
14	6	1.50261	1.62406	1.16179
15	6	2.08478	0.39019	1.02686
16	6	-1.99200	2.79696	0.54408
17	6	-0.67368	2.90883	0.90453
18	6	-2.55943	1.63652	0.13209
19	6	-3.99967	-0.12630	-0.63545
20	6	-3.76736	1.17687	-0.27791
21	1	-3.81623	-2.95447	-1.23421
22	1	-1.73687	-4.18217	-0.98800
23	1	0.97881	-3.95168	-0.24630
24	1	2.67528	-2.40353	0.53898
25	1	2.12273	2.46502	1.51569
26	1	3.15388	0.28073	1.27616
27	1	-2.63048	3.69556	0.59147
28	1	-0.29667	3.89351	1.22919
29	1	-5.01588	-0.41273	-0.95563
30	1	-4.60457	1.89421	-0.32220

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
КЉУЧНА ДОКУМЕНТАЦИЈСКА ИНФОРМАЦИЈА

Редни број: РБР:	
Идентификациони број: ИБР:	
Тип документације: ТД	Монографска документација
Врста рада: ВР	Дипломски рад
Аутор: АУ	Смиља Крајиновић
Ментор: МН	Проф. др Јован Шетрајчић
Наслов рада: НР	Конструкција нанотуба C_{60} - C_{210} и израчунавање њихових квантно-механичких параметара
Језик публикације: ЈП	Српски (ћирилица)
Језик извода: ЈИ	српски / енглески
Земља публиковања: ЗП	Србија
Уже географско подручје: УГП	Војводина
Година: ГО	2008.
Издавач: ИЗ	Ауторски репринт
Место и адреса: МА	Нови Сад, Департман за физику, Природно-математички факултет, Трг Доситеја Обрадовића 4
Физички опис рада: ФО	поглавља: 9; стране: 24; литература: 17; слике: 14 табеле: 3
Научна област: НО	Физика
Научна дисциплина: НД	
Кључне речи: ПО	Нанотубе, топлота формирања, стабилност, фулерен
УДК:	
Чува се: ЧУ	У библиотеци Департмана за физику ПМФ-а у Новом Саду
Важна напомена: ВН	-
Извод:	Нанотубе C_{60} - C_{210} су конструисане уметањем појасева хексагона у молекула фулерена C_{60} . Њихове топлоте формирања израчунате су применом итеративне MNDO семиемпиријске методе. Нанотубе изведене из фулерена C_{60} су праволинијске симетричне структуре које поштују правило изолованог пентагона, са изузетком C_{70} . Стабилност нанотуба, процењена на основу израчунате вредности за топлоту формирања, линеарно зависи од броја додатих појасева хексагона. Топлота формирања по С атому опада са величином

	нанотубе и приближава с еграничној вредности од 30,8 kJ/mol за нанотубе просечне дужине 1 μm . Стабилност неке нанотубе са n C атома може се предвидети на основу једначина предложених у овом раду.
Датум прихватања теме од стране НН већа: ДП	
Датум одбране: ДО	07. 10. 2008.
Чланови комисије: КО	Председник: Ментор: Проф. др Јован Шетрајчић Члан: Доц. др Јасна Адамов Члан: MIUCA PAVKOV - HRVOJEVIĆ, PREDSEDNIK

UNIVERSITY OF NOVI SAD
FACULTY OF SCIENCE
KEY WORDS DOCUMENTATION

Accession number: INO	
Indenticacion number: INO	
Document type: DT	Monograph
Type of record: TR	Printed text
Contents Code: CC	Graduate thesis
Author: AU	Smilja Krajinović
Mentor: MN	Prof. dr Jovan Šetrajčić
Title: TI	Construction of nanotubes C_{60} - C_{210} and calculation of their quantum mechanical properties
Language of text: LT	Serbian (cyrillic)
Language of abstract: LA	Serbian/English
Contry of publicacion: CP	Serbia
Locality of publication: LP	Vojvodina
Publication year: PY	2008.
Publisher: PU	Autor' s reprint
Publication place: PP	Novi Sad, Department of Physics, Faculty of Science, Trg Dositeja Obradovića 4
Physical description: PD	chapters: 9; pages: 24; literature: 17; pictures: 14; tables: 3
Scientific field: SF	Physics
Scientific discipline: SD	
Key words: SKW	Nanotubes, heat of formation, stability, fullerenes
UC:	
Holding data: HD	Library of Department of Physics
Note: N	-
Abstract: AB	Nanotubes C_{60} - C_{210} were modeled by inserting belts of hexagons into the molecule of fullerene C_{60} . Their heats of formation were calculated using iterative MNDO semiempirical method. Fullerene C_{60} -based nanotubes are straight-line symmetrical structures which obey isolated pentagon rule, with the exception of C_{70} which is too small to permit ideal positioning of double bonds in the added belt. Stability of the nanotubes, based on the calculated values for the heat of formation, depends in the linear fashion on the number of added belts of hexagons. Heat of formation per C atom decreases with the size of the nanotube, and approaches the limit value of 30.8 kJ/mol for

	nanotubes of the average length of 1 μm . Stability of a nanotube with n C atoms can be predicted from the equations proposed in this paper.
Accepted by the Scientific Board on: ASB	
Defended: DE	07.10.2008.
Thesis defend board: DB	President: Member: Member: