References

1. Zaporotskova I. V. [Carbon and non-carbon nanomaterials and composite structures on their base: morphology and electron properties]. Volgograd, 2009. – 490 p.

2. Zaporotskova I. V., Boroznin S. V., Perevalova E. V., Polikarpov D. I. [Electronic structure and characteristics of some types of boron-containig nanotubes]. *Vestnik VolGU* [Bulletin of VolSU], 2012, (Ser. 10: Innovatsionnaya deyatelnost`).

3. Padma Kumar P., Yashonath S. Ionic conduction in the solid state. J. Chem. Sci., 2006, vol. 118, no. 1, pp. 135–154.

4. Rubio A., Fuentes G. G., Borowiak-Palen E., Knupfer M., Pichler T., Fink J., Wirtz L. Formation and electronic properties of BC3 single wall nanotubes upon boron substitution of carbon nanotubes. Phys. Rev. B, 2004, vol. 69, pp. 245403.

УДК: 539.2.21, ББК: 30.6

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТЯЖЕЛЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ СПИРТОВ С ОДНОСЛОЙНЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

Запороцкова Ирина Владимировна, доктор физико-математических наук
Поликарпова Наталья Павловна, аспирант
Ермакова Татьяна Александровна, кандидат химических наук
Яцышен Валерий Васильевич, доктор технических наук

Волгоградский государственный университет
400062, Россия, г. Волгоград, проспект Университетский, 100
E-mail: irinaz@rbcmail.ru, n.z.1103@mail.ru, taermakova@volsu.ru, sefm@volsu.ru

Известно, что углеродные нанотрубки обладают уникальными сорбционными свойствами в отношении многих атомов и молекул, в т.ч. молекул органической природы. Реализация адсорбционного взаимодействия нанотрубок с подобными молекулами позволит использовать эти наносистемы в качестве эффективного фильтра (сорбента) для очистки водно-этанольных смесей от примесей нежелательных и токсичных продуктов, что крайне интересно для многих областей производства, таких как пищевая, химическая, оптическая, фармацевтическая и электронная промышленность, где необходимо использовать этиловые спирты высочайшей степени чистоты. С этой целью выполнено компьютерное моделирование процессов адсорбционного взаимодействия молекул органических спиртов (этанола, нормального пропанола, изопропанола) с однослойными углеродными нанотрубками типа «arm-chair». Исследования проведены в рамках модели молекулярного кластера с использованием полуэмпирического квантово-химического расчетного метода MNDO. Выявлены особенности пространственной конфигурации молекул спиртов. Доказана возможность адсорбции молекул пропанола (нормального и изомерного) на внешней поверхности нанотрубки малого диаметра. Определены основные геометрические и электронно-энергетические характеристики полученных адсорбционных комплексов. Выполненные исследования позволили сделать вывод о возможности использования углеродных нанотрубок для сверхтонкой очистки водно-этанольных смесей от нежелательных примесей тяжелых спиртов при сохранении содержания основного компонента смеси – этанола.

ПРИКАСПИЙСКИЙ ЖУРНАЛ:
управление и высокие технологии № 3 (19) 2012

Ключевые слова: *компьютерное моделирование, углеродная нанотрубка, молекулы органических спиртов, этанол, пропанол, изопропанол, адсорбционное взаимодействие, полуэмпирические исследования, сверхтонкая очистка, водно-этанольные смеси.*

COMPUTER MODELING OF INTERACTION OF HEAVY ORGANIC ALCOHOLS WITH SINGLE-LAYER CARBON NANOTUBES

Zaporotskova Irina V., D.Sc. (Physics and Mathematics)
Polikarpova Natalia P., post-graduate student
Ermakova Tatyana A., Ph.D. (Chemistry)
Yatsyshen Valery V., D.Sc. (Engineering)

Volgograd State University
100 Universitetsky av., Volgograd, 400062, Russia
E-mail: irinaz@rbcmail.ru, n.z.1103@mail.ru, taermakova@volsu.ru, sefm@volsu.ru

It is known that carbon nanotubes have unique sorption properties as respects to many atoms and molecules, including molecules of the organic nature. Realization of adsorption interactions between nanotubes and the similar molecules will allow to use these nanosystems as an effective filter (sorbent) for clearing water-ethanol mixtures from impurities of undesirable and toxic products that is extremely interesting for many areas of production such as food, chemical, optical, pharmaceutical and electronic industry where it is necessary to use ethyl alcohol of the highest degree of purity. With that end in view computer modeling of processes of adsorbtion interaction of molecules of organic alcohols (ethanol, normal propanol, isopropanol) with single-layer carbon nanotubes of the "arm-chair" type is executed. The researches are carried out within the model of molecular cluster with the use of semiempirical quantum-chemical calculation MNDO method. The features of spatial configuration of alcohol molecules are revealed. The possibility of adsorption of propanol molecules (normal and isomerous) on the external surface of nanotube of small diameter is proved. The main geometrical and electronic and power characteristics of the received adsorbption complexes are defined. The researches allowed to draw a conclusion on possibility of use of carbon nanotubes for hyperfine purification of water-ethanol mixtures from undesirable impurities of heavy alcohols when saving the content of the main component of mixture – ethanol.

Keywords: *Computer modeling, Carbon nanotube, Molecules of organic alcohols, Ethanol, Propanol, Isopropanol, Adsorption interaction, Semiempirical researches, Hyperfine purification, Water-ethanol mixtures.*

ВВЕДЕНИЕ

Были исследованы процессы присоединения молекул тяжелых органических спиртов (нормального и изомерного пропанола, этанола) к поверхности однослойных углеродных нанотрубок малого диаметра. Реализация адсорбционного взаимодействия углеродных нанотрубок с подобными молекулами позволит предложить использование наносистем в качестве эффективного фильтра для очистки водно-этанольных смесей от примесей нежелательных и токсичных продуктов, что крайне интересно для многих областей производства, таких как пищевая, химическая, оптическая, фармацевтическая и электронная промышленность, где необходимо использовать этиловые спирты высочайшей степени чистоты. Эти исследования доказали, что большой радиус кривизны данных наноструктур обеспечивает возможность активного адсорбционного взаимодействия с большими органическими молекулами за счет одноцентрового перпендикулярного взаимодействия, позволяющего реализовывать

множественную адсорбцию. Это, в свою очередь, позволяет предположить возможность эффективного использования углеродного наноматериала в качестве сорбента для очистки разного рода веществ от нежелательных примесей.

Как известно, углеродные нанотрубки (УНТ) обладают уникальными сорбционными свойствами в отношении многих атомов и молекул [2, 3, 7, 9]. Кроме того, была доказана высокая эффективность УНТ в отношении молекулы органической природы – ингибитора циклогексимида [4, 10]. Все это и позволило приступить к исследованию возможности адсорбции молекул тяжелых спиртов на их внешней поверхности. Выбор нанотруб малого диаметра (до 10 Å) определен доказанным ранее влиянием кривизны поверхности на активность сорбционного процесса [4, 10].

Было выполнено компьютерное моделирование процессов адсорбционного взаимодействия молекул органических спиртов (этанола, нормального пропанола, изопропанола) с однослойными углеродными нанотрубками типа «arm-chair» (6, 6). Исследования проведены в рамках модели молекулярного кластера с использованием полуэмпирического квантовохимического расчетного метода MNDO [1, 8] и программного пакета MNDO92 [1], отлично зарекомендовавшего себя при расчетах молекул и твердых тел. Выявлены особенности пространственной конфигурации молекул спиртов. Доказана возможность адсорбции молекул пропанола (нормального и изомерного) на внешней поверхности нанотрубки малого диаметра. Определены основные геометрические и электронно-энергетические характеристики полученных адсорбционных комплексов. Выполненные исследования позволили сделать вывод о возможности использования углеродных нанотрубок для сверхтонкой очистки водно-этанольных смесей от нежелательных примесей тяжелых спиртов при сохранении неизменным содержания основного компонента смеси – этанола, адсорбции которого на поверхности УНТ не наблюдается.

1. Моделирование процесса взаимодействия углеродной нанотрубки (6, 6) с молекулой этанола

Было выполнено компьютерное моделирование процесса адсорбционного взаимодействия молекулы этанола с однослойной углеродной нанотрубкой типа (6, 6). Молекулярный кластер УНТ содержал 96 атомов углерода, а оборванные связи на границе замыкались псевдоатомами, в качестве которых были выбраны атомы водорода. В структуре молекулы этанола можно указать два активных центра, которые, на наш взгляд, в состоянии обеспечить устойчивую адсорбционную связь молекулы с поверхностью нанотрубки: во-первых, это атом кислорода, который из-за наличия двойной связи с атомами углерода, может активно присоединять к себе различные молекулы; во-вторых, места присоединения отдельных атомов водорода, которые в водном растворе могут отрываться от остова молекулы этанола и освобождать тем самым активные адсорбционные центры. Перечисленные вариативные центры указаны на рис. 1. Рассмотрен способ присоединения молекулы этанола к углеродной нанотрубке перпендикулярно поверхности с использованием одного из активных центров молекулы – так называемое одноцентровое взаимодействие, эффективность которого при адсорбции органических молекул на поверхности углеродных наносистем была доказана [4, 10]. Нами выполнены MNDO-расчеты механизмов адсорбции молекулы этанола на поверхности углеродной нанотрубки для следующих вариантов:

1) молекула этанола присоединяется перпендикулярно поверхности углеродной нанотрубки, используя активный центр 1 – атом кислорода;

2) молекула этанола присоединяется перпендикулярно поверхности нанотрубки, используя центр 2 – место отрыва атома водорода от остова молекулы.

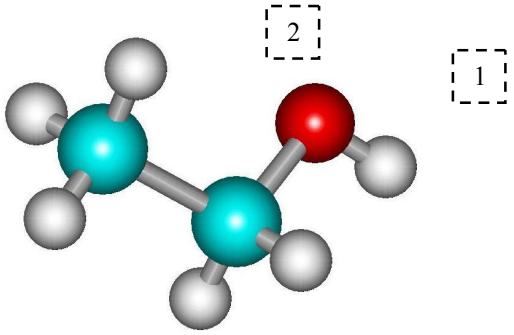


Рис. 1. Молекула этанола с указанием активных адсорбционных центров

Процесс моделировался следующим образом: молекула этанола пошагово (с шагом 0,1 Á) приближалась к внешней поверхности УНТ вдоль перпендикуляра, проведенного к выбранному атому углерода поверхности молекулярного кластера выбранной трубки. Модель взаимодействующих этанола и углеродной нанотрубки (6, 6) представлена на рис. 2. Расчеты позволили построить профиль потенциальной энергии взаимодействия, нормированный на бесконечность (рис. 3). Анализ кривой установил факт отсутствия адсорбционного взаимодействия молекулы этанола и углеродной нанотрубки (кривая находится в области положительных значений энергии). Это весьма важный вывод, доказывающий селективность адсорбционной активности тубулена и позволяющий использовать УНТ для избирательной сорбции примесей водно-этанольных смесей при сохранении основного компонента – собственно этанола.

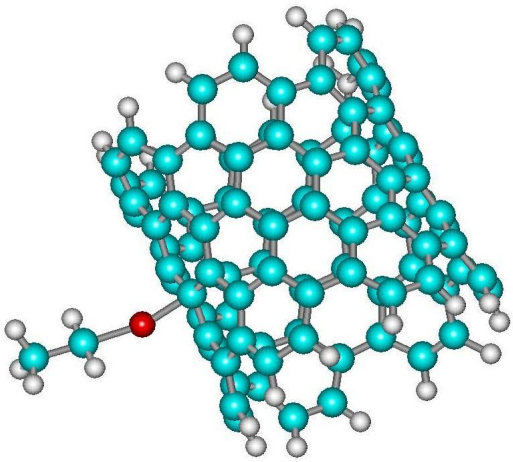


Рис. 2. Модель взаимодействующих нанотрубки (молекулярный кластер трубки (6, 6), содержащий 96 атомов углерода) и молекулы этанола

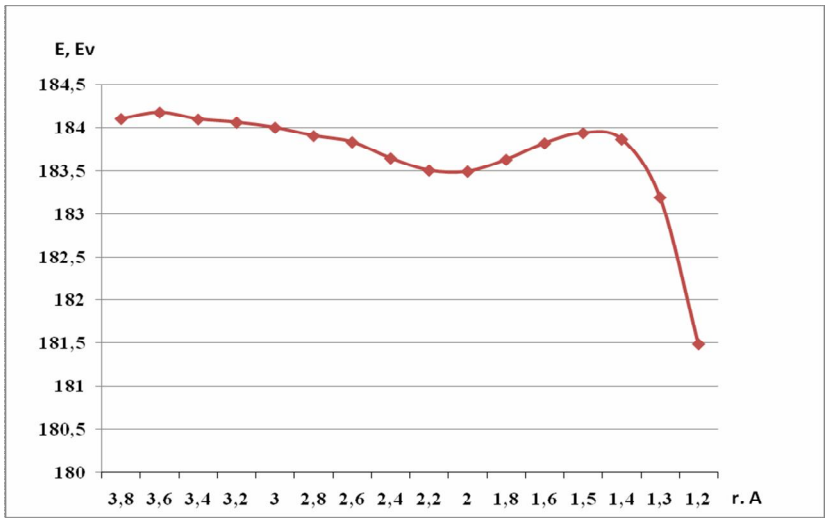


Рис. 3. Энергетическая кривая зависимости полной энергии системы «углеродная нанотрубка – молекула этанола» от расстояния между молекулой и противоположной гранью трубки

2. Моделирование процесса взаимодействия углеродной нанотрубки (6, 6) с молекулами пропанола

Были построены модели взаимодействия наиболее распространенных примесных органических спиртов – молекул нормального пропанола и изопропанола – и однослойной углеродной нанотрубки (6, 6). Процесс адсорбции моделировался пошаговым приближением молекул нормального пропанола и изопропанола к поверхности тубулена вдоль перпендикуляра, проведенного к выбранному атому углерода поверхности (с шагом 1 Å). Геометрически параметры системы оптимизировались на каждом шаге. Также как и в случае с молекулой этанола, рассмотрено одноцентровое перпендикулярное взаимодействие для следующих вариантов присоединения молекул пропанола к атому углерода поверхности нанотрубки:

1) молекула присоединяется перпендикулярно поверхности углеродной нанотрубки, используя активный центр 1 – атом кислорода;

2) молекула присоединяется перпендикулярно поверхности нанотрубки, используя центры 2 и 3 – места отрыва атома водорода от остова молекулы.

На рис. 4 указаны выбранные активные центры молекулы изопропанола. Для молекулы нормального пропанола центры аналогичны. В качестве примера на рис. 6 представлена модель взаимодействующих нанотрубки (6, 6) и молекулы пропанола через адсорбционные центры 1 и 2. В результате выполненных расчетов были построены профили поверхности потенциальной энергии взаимодействия (рис. 6, 7), определены геометрические и энергетические особенности адсорбционного процесса (табл.). Анализ результатов показал, что адсорбция реализуется для всех вариантов взаимодействия нанотрубки с молекулами, что иллюстрируется наличием минимумов на кривых, находящихся в области отрицательных значений. Реализуется так называемая физическая адсорбция, т.к. расстояния адсорбции довольно велики.

Сравнение энергий адсорбции для различных вариантов взаимодействия молекул изопропанола и нормального пропанола позволило определить наиболее активные адсорбционные центры этих молекул. Так наиболее активным для нормального пропанола оказался центр адсорбции 2, а для изопропанола – центр адсорбции 3. Таким образом, наилучшую сорбционную активность проявляют места отрыва атома водорода от остова молекулы, образующиеся при получении водно-этанольных смесей.

Анализ геометрии получившихся адсорбционных комплексов обнаружил, что в процессе взаимодействия происходит искажение цилиндрической симметрии углеродной нанотрубки: межатомные связи С – С в месте присоединения молекулы пропанола удлиняются, в среднем, на 5 %, что вызывает появление неоднородности (выпуклости) на изначально симметричной поверхности тубулена.

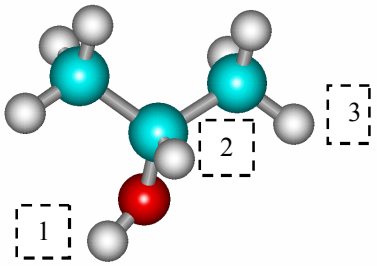
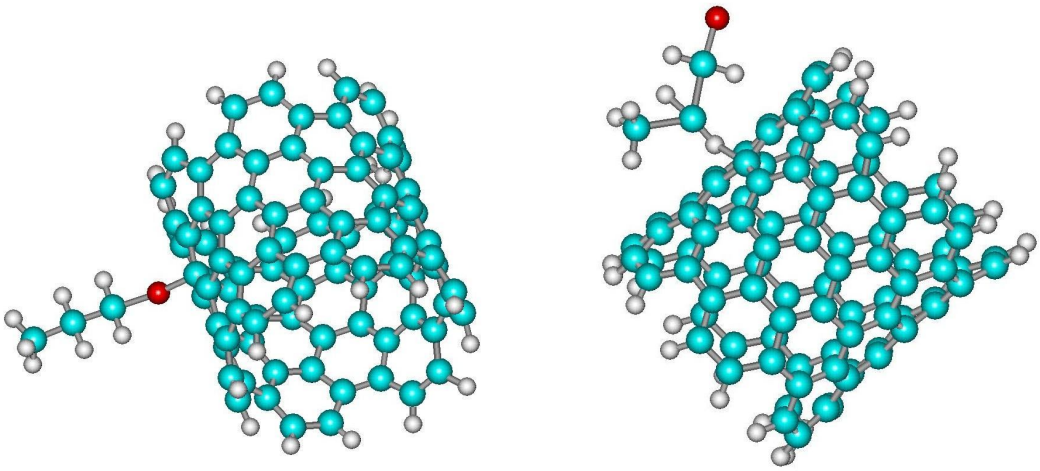


Рис. 4. Молекула изопропанола с указанными активными центрами 1,2 и 3 адсорбции



а) б)

Рис. 5. Модели адсорбционного взаимодействия нанотрубки (6, 6) и молекулы спирта нормального пропанола с присоединеним: а) через адсорбционный центр 1, б) через адсорбционный центр 2

Таблица

Основные параметры адсорбционного взаимодействия углеродной нанотрубки (6,6) с молекулами нормального пропанола и изопропанола для различных вариантов взаимодействия

Параметры / Варианты адсорбционного взаимодействия	r, Á	$E_{ад}$, eV
Пропанол (нормальный): центр адсорбции 1	3,4	-1,71
Пропанол (нормальный): центр адсорбции 2	3,5	-2,62
Изопропанол: центр адсорбции 1	3,2	-1,58
Изопропанол: центр адсорбции 2	3,1	-1,56
Изопропанол: центр адсорбции 3	3,9	-3,51

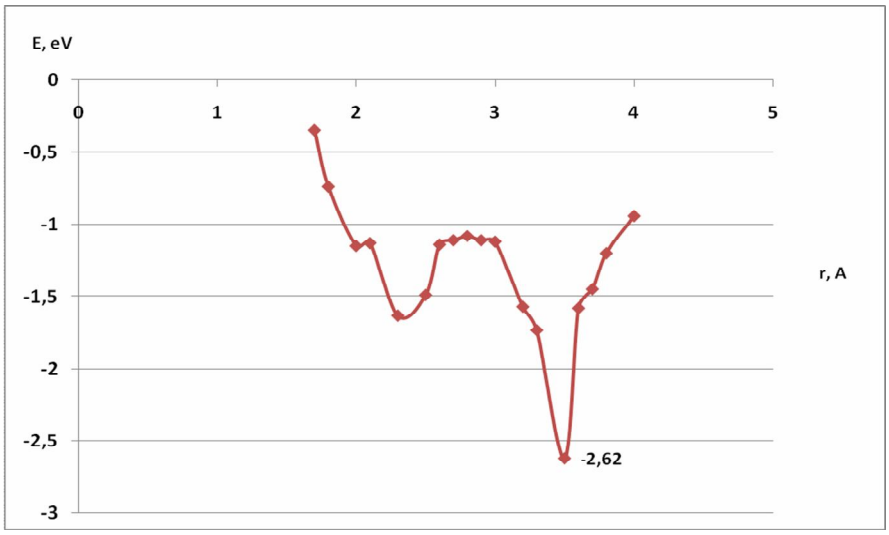


Рис. 6. Профиль поверхности потенциальной энергии взаимодействия молекулы нормального пропанола с поверхностью углеродной нанотрубки (6, 6) с присоединением молекулы через адсорбционный центр 2

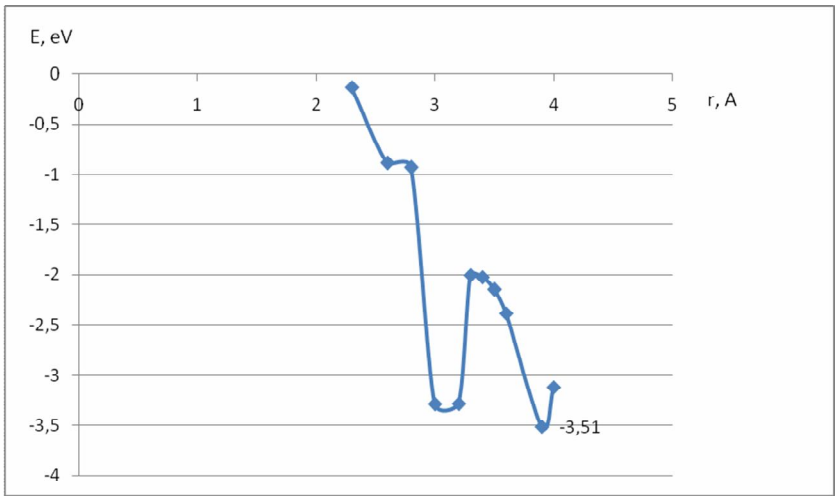


Рис. 7. Профиль поверхности потенциальной энергии взаимодействия молекулы изопропанола с поверхностью углеродной нанотрубки (6, 6) с присоединением через адсорбционный центр 3

Заключение

В результате выполненного компьютерного моделирования процессов взаимодействия молекул органических спиртов (этанола, нормального и изомерного пропанола), входящих в состав широко применяемых водно-этанольных смесей, установлено:

1. Взаимодействие между молекулой этанола и углеродной нанотрубкой отсутствует, что доказывает селективность адсорбционной активности тубулена и позволяет использовать УНТ для избирательной сорбции примесей водно-этанольных смесей при сохранении основного компонента – собственно этанола.

2. Адсорбционное взаимодействие между молекулами нормального/изомерного пропанола и поверхностью углеродной нанотрубки реализуется по механизму одноцентрового перпендикулярного взаимодействия, причем наиболее активным адсорбционным центром молекул выбранных тяжелых спиртов являются места отрыва атома водорода от остова молекулы, образующиеся при получении водно-этанольных смесей.

3. Доказанный факт реализации физической адсорбции молекул органических тяжелых спиртов на поверхности углеродных нанотрубок позволяет предположить возможность легкой очистки углеродного наноматериала, выступающего в качестве сорбента примесей, что обеспечит многократность использования нанотрубок в последующих процессах очистки водно-этанольных смесей [5, 6].

Список литературы

1. Войтюк А. А. Применение метода MNDO для исследования свойств и реакционной способности молекул / А. А. Войтюк // Журнал структурной химии. – 1988. – Т. 29, № 1. – С. 138–162.

2. Елецкий А. В. Сорбционные свойства углеродных наноструктур / А. В. Елецкий // Успехи физических наук. – 2004. – Т. 174, № 11. – С. 1191–1231.

3. Запороцкова И. В. Углеродные и неуглеродные наноматериалы и композитные структуры на их основе: строение и электронные свойства : монография / И. В. Запороцкова // Волгоград : ВолГУ, 2009. – 490 с.

4. Запороцкова И. В. Исследование механизма положительного влияния фуллерена на процессы восстановления пространственной памяти / И. В. Запороцкова, Л. А. Чернозатонский // Вестник новых медицинских технологий. – 2005. – Т. 12, № 2. – С. 117–118.

5. Запороцкова И. В. Исследование влияния углеродных нанотруб на процесс очистки спиртосодержащих жидкостей / И. В. Запороцкова, Т. А. Ермакова, Е. В. Перевалова, А. Ю. Степанова // Вестник ВГУ. – 2009–2010. – № 4. – С. 42–51. – (Сер. 10 : Инновационная деятельность).

6. Запороцкова И. В. Сорбционная активность углеродных нанотрубок как основа инновационной технологии очистки водно-этанольных смесей / И. В. Запороцкова, Н. П. Запороцкова, Т. А. Ермакова // Вестник ВГУ. – 2011. – № 5. – С. 106–110. (Сер. 10 : Инновационная деятельность).

7. Харрис П. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI в. / П. Харрис. – Москва : Техносфера, 2003. – 336 с.

8. Dewar M. J. S. Ground states of molecules. 38. The MNDO method. Approximations and Parameters / M. J. S. Dewar, W. Thiel // J. Amer. Chem. Soc. – 1977. – Vol. 99. – P. 4899–4906.

9. Dresselhaus M. S. Carbon nanotubes: synthesis, structure, properties, and application / M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P. Avouris // Springer-Verlag. – 2000. – 464 p.

10. Zaporotskova I. V. A study on the mechanism of interaction between fullerene and cycloheximide for the explanation of beneficial effect of C_{60} on the processes of spatial memory restoration / I. V. Zaporotskova, L. A. Chernozatonskii // Mendeleev Communication. – 2005. – P. 227–229.

References

1. Voitjuk A. A. Primenenie metoda MNDO dlja issledovanija svojstv i reakcionnoj sposobnosti molekul [Use of MNDO method for studying properties and reactivity of molecules]. *Zhurnal strukturnoj himii* [Journal of Structural Chemistry], 1988, vol. 29, no. 1, pp. 138–162.

2. Eletskii A. V. Sorbcionnye svojstva uglerodnyh nanostruktur [Sorption properties of carbon nanostructures]. *Uspehi fizicheskih nauk* [Success of Physical Sciences], 2004, vol. 174, no. 11, pp. 1191–1231.

3. Zaporotskova I. V. Uglerodnye i neuglerodnye nanomaterialy i kompozitnye struktury na ih osnove: stroenie i jelektronnye svojstva [Carbon and noncarbon nanomaterials and composite structures on their base: morphology and electron properties]. Volgograd, VolSU, 2009. – 490 p.

4. Zaporotskova I. V., Chernozatonskii L. A. Issledovanie mehanizma polozhitel'nogo vlijanija fullerena na processy vosstanovlenija prostranstvennoj pamjati [The research of mechanism of the positive effect of fullerene on recovery of spatial memory]. *Vestnik novyh medicinskih tehnologij* [Journal of New Medical Technologies], 2005, vol. 12, no. 2, pp. 117–118.

5. Zaporotskova I. V., Ermakova T. A., Perevalova E. V., Stepanova A. Yu. Issledovanie vlijanija uglerodnyh nanotrub na process ochistki spirtosoderzhawih zhidkostej [A study of the influence of carbon nanotubes on the process of purification of alcohol-containing liquids]. *Vestnik VGU* [Bulletin of VSU], 2009–2010, no. 4, pp. 42–51, (Ser. 10 : Innovation).

6. Zaporotskova I. V., Zaporotskova N. P., Ermakova T. A. Sorbcionnaja aktivnost' uglerodnyh nanotrubok kak osnova innovacionnoj tehnologii ochistki vodno-jetanol'nyh smesej [Sorption activity of carbon nanotubes as a basis of innovation technology of purification of water-ethanol mixtures]. *Vestnik VGU* [Bulletin of VSU], 2011, no. 5, pp. 106–110, (Ser. 10 : Innovation).

7. Harrys P. Uglerodnye nanotruby i rodstvennye struktury. Novye materialy XXI v. [Carbon nanotubes and related structures. New materials of the XXI c.]. Moscow: Technoscope, 2003. 336 p.

8. Dewar M. J. S., Thiel W. Ground states of molecules. 38. The MNDO method. Approximations and Parameters. J. Amer. Chem. Soc., 1977, vol. 99, pp. 4899–4906.

9. Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Avouris P. Carbon nanotubes: synthesis, structure, properties and application. Springer-Verlag, 2000. 464 p.

10. Zaporotskova I. V., Chernozatonskii L. A. A study on the mechanism of interaction between fullerene and cycloheximide for the explanation of beneficial effect of C_{60} on the processes of spatial memory restoration. Mendeleev Communication, 2005, pp. 227–229.

УПРАВЛЕНИЕ В ОБЛАСТИ ОБРАЗОВАНИЯ

УДК 53:621.382

ВОЗМОЖНОСТИ УПРАВЛЕНИЯ УЧЕБНЫМ ПРОЦЕССОМ С ПРИМЕНЕНИЕМ МУЛЬТИМЕДИЙНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ПРИ ИЗЛОЖЕНИИ КУРСА ФИЗИКИ (НА ПРИМЕРЕ МУП «ФИЗИЧЕСКИЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ»)

Алыкова Ольга Михайловна, кандидат педагогических наук
Радкевич Леонид Алексеевич, кандидат педагогических наук

Астраханский государственный университет
414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а
E-mail: kof@aspu.ru

В работе приведены примеры, иллюстрирующие эффективность использования мультимедийных технологий при изучении курса физики. Данные технологии позволяют расширить возможности преподавания, значительно сократить время на объяснение сложного материала, компенсировать отсутствие у студентов первого курса необходимого математического аппарата за счет большей наглядности и качественной стороны рассмотрения физических явлений, увеличить эффективность учебного процесса. Мультимедийные технологии используются при необходимости показать визуальную детализацию проводимого эксперимента или используемого прибора, при отсутствии требуемого оборудования, а также при необходимости соблюдения большого числа мер предосторожности при проведении эксперимента. Обоснован выбор мультимедийного учебного пособия «Физические эксперименты» для изложения курса физики студентам нефизических специальностей. В работе приведены примерные сценарии встраивания в лекционные занятия демонстраций, компьютерных анимаций и видеозадач, а также их комбинаций с использованием собранных видеоматериалов и материалов представляемого пособия. Кроме того, приведенное в работе мультимедийное учебное пособие «Физические эксперименты» предоставляет возможность выполнения в домашних условиях телеметрических лабораторных работ при необходимости использования в обязательном порядке дистанционного обучения в связи с «форс-мажорными» обстоятельствами (карантин, сильные морозы, болезни и т.д.).

Ключевые слова*: мультимедийные технологии, эксперимент, физические явления, демонстрации, компьютерные модели, видеозадачи, экспериментальные задачи.*

POSSIBILITIES OF EDUCATIONAL PROCESS CONTROL WITH THE USE OF MULTIMEDIA TECHNOLOGIES AT EXPOSITION OF COURSE OF PHYSICS (BY THE EXAMPLE OF MULTIMEDIA TEXTBOOK "PHYSICAL EXPERIMENTS")

Alykova Olga M., Ph.D. (Pedagogics)
Radkevich Leonid A., Ph.D. (Pedagogics)

Astrakhan State University
20a Tatishchev st., Astrakhan, 414056, Russia
E-mail: kof@aspu.ru