

Авторы выражают глубокую признательность академикам РАН О.М. Белоцерковскому (ИАП РАН) и В.Б. Бетелину (НИИСИ РАН) за всестороннюю поддержку проводимых исследований, С.М. Фролову, В.С. Посвянскому, Б.С. Ермолаеву (Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН) за помощь в работе, а также В.В. Чернову (ОАО «ЦНИИ «Буревестник») за экспериментальную поддержку проводимых теоретических исследований. Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 09-01-12073-офи\_м).

# Теоретическое исследование наноразмерных функциональных устройств и механизмов наносборки

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Серебряков М.Е.* Внутренняя баллистика ствольных систем и пороховых ракет. М.: Госуд. науч.-техн. изд-во Оборонгиз, 1962.
2. *Хоменко Ю.П., Ищенко А.Н., Касимов В.З.* Математическое моделирование внутрибаллистических процессов в ствольных системах. Новосибир.: Изд-во СО РАН, 1999.



## 17 Теоретическое исследование наноразмерных функциональных устройств и механизмов наносборки

Создание функциональных наноразмерных устройств является одной из главных задач нанотехнологии, решение которой имеет потенциально революционное значение для развития компьютерной техники, медицины и многих других областей. Компоненты таких устройств должны проектироваться и конструироваться с точностью, допускающей спецификацию местоположения отдельных атомов. Решение научно-технических проблем, связанных с разработкой и конструированием функциональных наномашин, возможно только с помощью суперкомпьютерных вычислений.

### АВТОРЫ:

**Д.С. Тарасов** – канд. биол. наук, ст. науч. сотрудник, Казанский филиал межведомственного суперкомпьютерного центра РАН;  
e-mail: dtarasov3@gmail.com  
**Е.Д. Изотова** – аспирант, Казанский федеральный университет;  
e-mail: ied@mnitech.ru  
**Д.А. Алишева** – аспирант, Казанский федеральный университет;  
e-mail: dalisheva@mnitech.ru

### Введение

Впервые идея о возможности построения структур с точностью до местоположения отдельных атомов была высказана лауреатом Нобелевской премии Ричардом Фейнманом в 1959 году. Опираясь на эту идею, американский ученый Э. Дрекслер предложил концепции и средства конструирования механических молекулярных машин и молекулярно-производственных систем.

Спроектированные с помощью компьютера Э. Дрекслером и Р. Меркле части молекулярных машин, такие, как молекулярный насос для перекачки неона, подшипник, планетарная передача, были смоделированы в рамках проекта NASA Ames с помощью методов молекулярной механики. Таким образом, возможность функционирования подобных устройств получила серьезное обоснование.

Последующая дискуссия о возможности создания аналогичных наномашин продолжается до настоящего момента. Некоторое время назад такая возможность, а следовательно и польза от их изучения, отвергалась большинством исследователей. Однако растущее число научных работ привело к увеличению понимания физических и химических основ подобных систем. В 2006 году в отчете Национального исследовательского совета США молекулярные наномшины были рассмотрены в разделе «Сайт-специфичная химия для крупномасштабного молекулярного производства». В отчете констатируется, что анализ таких систем на сегодняшний день является затруднительным и рекомендуется проведение дополнительных исследований. На основании этой рекомендации в «Технологическом плане развития производственных наносистем», разработанном Battelle Memorial Institute, предложены направления для дальнейших исследований, в число которых включено моделирование молекулярных наномашин и позиционно управляемых сайт-специфических химических реакций.

### Содержание работы

Международное объединение Nanofactory Collaboration, в которое входит более 50 организаций из 4 стран (Россия, США, Великобритания, Бельгия), занимается изучением и разработкой масштабных производственных систем нового поколения, основанных на использовании молекулярных машин.

В рамках данного объединения Казанским филиалом межведомственного суперкомпьютерного центра РАН, Казанским федеральным университетом и Институтом молекулярного производства (США) выполняется работа



по квантово-химическому моделированию структурной стабильности и функциональных свойств молекулярных наномашин, построенных с использованием нанокристаллического алмаза.

Известно, что пленки ультрананокристаллического алмаза проявляют уникальные свойства, в частности обеспечивая низкое трение при практически отсутствующем износе поверхности. Пленки УНКА были использованы для производства наноструктур различной формы с разрешающей способностью ~ 100 нм, что позволяет использовать их при конструировании микроэлектромеханических устройств.

Однако при переходе к разработке частей молекулярных машин размерами 2–10 нм возникают вопросы, связанные с тем, что структуры из УНКА таких размеров могут быть нестабильными и подверженными спонтанной реконструкции — графитизации или онионизации. Считается что тетраэдрический УНКА подвергается в нормальных условиях реконструкции с образованием фуллереноподобных структур (так называемых «папоопiоns»). Предполагается, что такому преобразованию подвержен только УНКА с неактивированной поверхностью (т. е. поверхностью без концевых атомов водорода), хотя данный вопрос все еще остается открытым, и высказываются противоположные точки зрения.

Квантово-химические расчеты с использованием теории функционала плотности (DFT) — поиск структур с минимальной энергией и молекулярной динамикой — могли бы помочь решению вопросов о стабильности УНКА и молекулярных наномашин. К сожалению, DFT-вычисления масштабируются как  $N^3$  по отношению к размеру исследуемой системы. Интересующие нас размеры — 1–2 нм предполагают расчет систем с тысячами атомов углерода. Использование обычных персональных компьютеров или даже вычислительных кластеров среднего размера потребовало бы сотен лет времени для завершения необходимых расчетов. Предыдущие исследования решали эту задачу ограничением размера изучаемой системы или введением довольно грубых приближений, что приводило к получению очень неопределенных результатов.

С помощью высокопроизводительных суперкомпьютерных систем и программного пакета CPMD (Car-Parinello Molecular Dynamics) нами были проведены расчеты структур УНКА размером до 2 нм, тетраэдрической и кубической формы, частично и полностью депассивированных, а также УНКА неправильной формы, и собственно основанных на нанокристаллическом алмазе молекулярных машин. Расчеты были проведены с использованием суперкомпьютеров МВС-100К (МСЦ РАН) и IBM Blue Gene/P, установленного на факультете ВМК МГУ.

## Результаты

Расчет показал, что депассивированный (не содержащий атомов водорода) наноалмаз тетраэдрической формы подвергается онионизации (рис. 2), кубической формы (поверхности 110 и 100) — подвергается графитизации на местах стыков поверхностей. Полностью пассивированные структуры и частично депассивированные (с удалением до 6 атомов водорода с различных участков) не подвергаются реконструкции вне зависимости от типа поверхности, что говорит о том, что наноструктуры различной формы, в том числе наномеханические машины из УНКА, могут быть спроектированы таким образом, чтобы не быть подверженными спонтанной реконструкции.

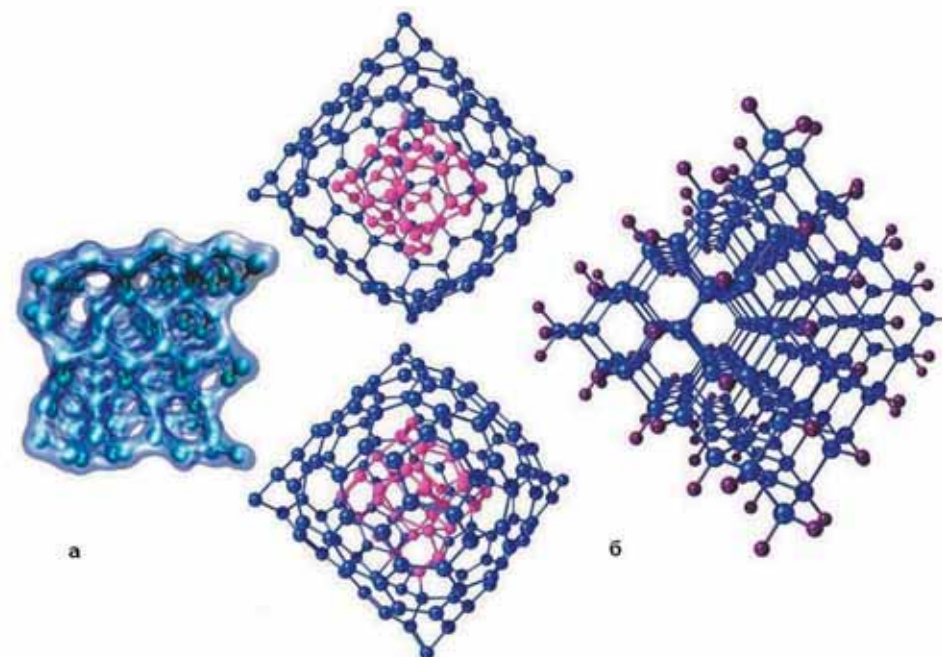


Рис. 1.

а) Кубический УНКА, образование внутренних полостей на ребрах куба. УНКА неправильной формы, содержащий 914 атомов углерода. б) Структура тетраэдрического УНКА содержащего 165 атомов углерода. Сверху. Образование фуллереноподобной структуры при моделировании неактивированной поверхности 111. Синим цветом обозначены атомы углерода внешней оболочки, розовым — внутренней. Снизу та же структура, но часть атомов углерода удалена для лучшего обзора внутренней оболочки. Справа та же структура с поверхностью пассивированной атомами водорода сохраняет тетраэдрическую форму



Рис. 2.  
Части механических молекулярных машин. Подшипники

## Высокопроизводительные вычисления в задаче оптимизации процесса окислительной регенерации