



UDK: 534-16

Navruz B. ZOIROV,

Tayanch doktorant, O'zR FA U.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti, Toshkent, O'zbekiston

E-mail: ozbekistonnnavruz@gmail.com, ORCID: 0009-0006-4922-770X

Danila V. ALYABEV,

PhD, katta ilmiy xodim, O'zR FA U.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti, Toshkent, O'zbekiston

E-mail: wside2008@mail.ru, ORCID: 0000-0001-6018-1470

Ishmumin Dj. YADGAROV,

Fizika-matematika fanlari doktori, professor, O'zR FA U.Arifov nomidagi Ion-Plazma va lazer texnologiyalari instituti, Toshkent, O'zbekiston

E-mail: ishmuminyadgarov@gmail.com, ORCID: 0000-0002-4808-2258

Ikrom Z. UROLOV,

PhD, kichik ilmiy xodim, O'zR FA U.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti, Toshkent, O'zbekiston

E-mail: fizik25@mail.ru, ORCID: 0009-0001-9553-080X

O'zbekiston Milliy universiteti professori, f-m.f.d K. Tursunmetov taqrizi asosida

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF THE RESONANCE PROPERTIES OF CARBON NANOTUBE BUNDLES AT VARIOUS TEMPERATURES

Annotation

One of the main challenges of nanoscale resonators is the variation of their resonance frequencies and dynamic stability under the influence of thermal environments. This study investigates the vibrational behavior of carbon nanotube (CNT) bundles within the temperature range of 200K–500K using the molecular dynamics method. Due to their high mechanical strength, low mass, and excellent resonant properties, carbon nanotubes are widely considered promising materials for nanoresonators and nanosensor applications. In this work, the amplitude–frequency characteristics (AFC) of CNT bundles under different thermal conditions were analyzed, and their resonance frequencies were determined.

Keywords: carbon nanotubes, molecular dynamics, resonance frequency, thermal vibration, nanoresonator, LAMMPS, nanosensors.

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЗОНАНСНЫХ СВОЙСТВ ПУЧКА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Аннотация

Углеродные нанотрубки (УНТ) благодаря высокой механической прочности, малой массе и высоким резонансным свойствам обеспечивают большой потенциал их применения в наноразмерных резонаторах и сенсорных системах. Одной из основных проблем наноразмерных резонаторов является изменение их резонансных характеристик и динамической устойчивости под воздействием температуры. В данной работе методами молекулярной динамики исследованы колебательные свойства пучка УНТ в диапазоне температур от 200 К до 500 К. В различных термических условиях были проанализированы амплитудно-частотные характеристики (АЧХ) пучка УНТ и определены резонансные частоты.

Ключевые слова: пучок углеродных нанотрубок, молекулярная динамика, резонансная частота, свободные колебания, термическое воздействие, нанорезонатор, LAMMPS, наносенсоры.

TURLI HARORATLARDA UGLEROD NANOTRUBKALARI DASTASINING REZONANS XUSUSIYATLARINI MOLEKULAR DINAMIKA USULIDA TADQIQ QILISH

Annotatsiya

Uglerod nanotrubkalari (UNT) yuqori mexanik mustahkamlik, kichik massa va yuqori rezonans xususiyatlari sababli nanoo'lchamli rezonatorlar hamda sensor tizimlarida keng qo'llanilmoqda. Nanoo'lchamli rezonatorlarning asosiy muammolaridan biri termik muhit ta'sirida ularning rezonans chastotalari va dinamik barqarorligining o'zgarishidir. Ushbu ishda 200 K dan 500 K gacha bo'lgan harorat intervalida UNT dastasining tebranish xususiyatlari molekulyar dinamika usuli asosida tadqiq qilindi. Turli termik sharoitlarda UNT dastasining amplituda–chastota xarakteristikalarini (ACHX) tahlil qilinib, rezonans chastotalari aniqlandi.

Kalit so'zlar: uglerod nanotrubkalari dastasi, molekulyar dinamika, rezonans chastota, erkin tebranish, termik ta'sir, nanorezonator, LAMMPS, nanosensorlar.

Kirish. Uglerod asosli nanostrukturalar XXI asrning istiqbolli nanomateriallaridan biri bo'lib, ularning mexanik, elektr va issiqlik xossalari ko'plab sohalarida inqilobiy o'zgarishlar qilish imkonini bermokda. Ayniqsa, UNT asosidagi nanorezonatorlar yuqori sezgirlik va yuqori rezonans chastotasiga ega bo'lgani sababli nanoelektromexanik tizimlar, biosensorlar va signalni qayta ishlash quurilmalarida istiqbolli material sifatida qaraladi [1, 2]. Ammo shunday istiqbolli material bo'lishiga qaramay, harorat o'zgarishi UNT larning elastik xususiyatlari hamda atomlararo bog'lanishlariga ta'sir ko'rsatishi natijasida rezonans javobi (tizimning tashqi garmonik qo'zg'atuvchi ta'siriga nisbatan chastotaga bog'liq dinamik reaksiyasi) da sezilarli o'zgarishlar yuzaga

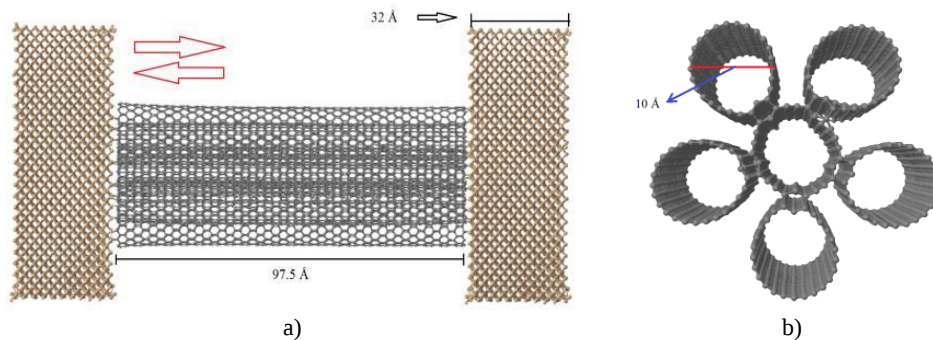
kelishi mumkin [3, 4]. Shu sababli turli termik sharoitlarda UNT dastasining rezonans chastotalari va rezonans tabiatini tadqiq qilish nanorezonator va nanosensor qurilmalarining termik barqarorligini ta'minlash uchun muhim ilmiy muammo hisoblanadi.

Bu kabi muammolarni tadqiq etishda molekulyar dinamika (MD) modellashlash usullari hal qiluvchi ahamiyatga ega bo'lib, ular UNT larning issiqlik va mexanik xususiyatlar o'rtasidagi o'zaro bog'liqlikni tadqiq etish uchun samarali platformani taqdim etadi [5]. Molekulyar dinamika (MD) usuli yordamida UNTlarining termomexanik xususiyatlarini atom darajasida tadqiq qilish mumkinligi, harorat o'zgarishlarining nanotrubka rezonans xususiyatlariga ta'siri, ichki rezonans hodisalari va modalararo energiya almashinuvi jarayonlarini o'rganish imkonini beradi [4, 6]. Rezonans o'zaro ta'sirlarni oldindan bashorat qilish va boshqarish, ayniqsa, ultra-past shovqin talab qilinadigan qurilmalar [7] hamda ko'p modali sensor tizimlari uchun muhim ahamiyatga ega, chunki bunday modalararo o'zaro ta'sirlar nanomexanik tizimlarning samaradorligini oshiradi [8].

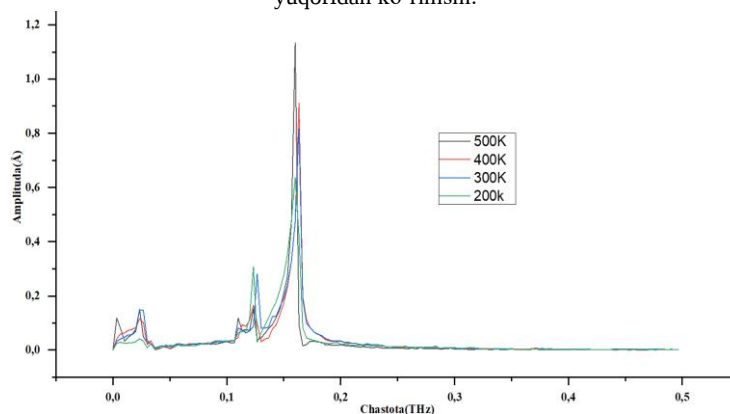
Mazkur tadqiqot ishida UNT dastasining turli xil haroratlarda garmonik tebranishlari o'rganildi va UNT dastasining amplituda-chastota xarakteristikasi (AChX) haroratga bog'liqligi tahlil qilindi.

Metodologiya. UNT dastasi geometrik modellarining koordinatalari Nanotube Modeler [9] kompyuter dasturining ma'lumotlar bazasidan olindi (1b- rasm), UNT dastasini tebrantirishda ikki kremniy taglik yordamchi vosita sifatida tanlandi va ular LAMMPS ochiq paket dasturida [10] hosil qilindi. Kremniy (Si) va uglerod (C) atomlari orasidagi o'zaro ta'sirlashuvlar uchun mukammallashtirilgan Tersoff-Erhard-Albe (TEA) [11] potentsiali qo'llanildi. Kremniy tagliklar sirtiga UNT dastasi yetarlicha masofada joylashtirilib, hosil bo'lgan tizimni minimizatsiya qilish orqali UNT dastasining tagliklarga bog'lanishi ta'minlandi. Shu bosqichgacha olingan natijalarni vizualizatsiya qilish va ko'rib chiqalayotgan har bir harakat parametrlarini aniqlash uchun OVITO Basic [12] kompyuter dasturidan foydalanildi, shuningdek, ushbu dastur yordamida $161 \times 72 \times 71 \text{ \AA}$ o'lchamli va 18936 atomdan iborat struktura hosil qilindi (1a- rasm).

Keyingi bosqichda esa tagliklardan biri qo'zg'almas saqlagan holda ikkinchi taglikga ma'lum tezlik berish orqali UNT dastasi cho'zilgan holatga keltirildi. Bundan keyin tizimning erkin tebranish jarayoni 1- jadvalda berilgan haroratlarda kuzatildi. Simulyatsiya qilinayotgan tizim temperaturasi, uning hajmi va undagi atomlar soni NVT ansambli yordamida boshqarildi va simulatsiya jarayonlari 0.001 ps vaqt qadami bilan 300 ps vaqt oralig'ida amalga oshirildi. Yuqorida ta'kidlangan barcha jarayonlar molekulyar dinamika MD usuli asosida modellashirildi. Yakunda esa LAMMPS dasturida bajarilgan simulatsiyalar asosida olingan fayllardagi qiymatlar asosida amplituda-chastota xarakteristikalari tahlil qilinib, rezonans chastotalar aniqlandi.



rasm. a) kristall tagliklar orasiga mahkamlangan nanotrubkalar dastasi; b) nanotrubkalar dastasining yuqoridan ko'rinishi.



2- rasm. UNT dastasining turli haroratlarda uchun AChX grafigi.

Natijalari tavsifi va tahlili. UNT dastasining 200 K, 300 K, 400 K va 500 K haroratlardagi amplituda-chastota xarakteristikalari (AChX) 2-rasmda keltirilgan. Grafiklardan ko'rinadiki, barcha haroratlarda uchun asosiy rezonans cho'qqisi taxminan 0.16 THz atrofida joylashgan. Grafikda asosiy rezonans cho'qqisidan tashqari past chastotalar diapazonida kichik qo'shimcha cho'qqilar ham kuzatiladi. Bu holat UNT dastasida yuqori tartibli tebranish modalari yoki modalararo o'zaro ta'sirlar mavjudligini ko'rsatadi. Biroq qo'shimcha cho'qqilar amplitudasi asosiy rezonans cho'qqisining amplitudasiga nisbatan ancha kichik bo'lganligi sababli tizimning asosiy tebranish xatti-harakati fundamental rezonans modasi bilan belgilanadi. Shuningdek, harorat ortishi bilan rezonans amplitudasining o'zgarishi kuzatildi. Quyidagi jadvalda turli haroratlarda uchun amplituda va rezonans chastotasining qiymatlari keltirilgan: (1-jadval)

№	Harorat (K)	Amplituda (Å)	Chastota (THz)
---	-------------	---------------	----------------

1	200	0,64	0,16
2	300	0,82	0,163
3	400	0,91	0,163
4	500	1,13	0,16

1 - jadval. Turli haroratlar uchun nanotrubkalar dastasining amplituda va rezonans chastotasi qiymatlari jadvali.

Olingan natijalar harorat ortishi bilan UNT dastasining tebranish amplitudasi oshib borishini ko'rsatdi. Xususan, 200 K da amplituda 0.64 Å bo'lgan bo'lsa, 500 K da 1.13 Å gacha yetgan. Bu holat termik energiyaning ortishi bilan atomlarning tebranish intensivligi kuchayishi hamda termo-mexanik fluktuatsiyalarning ortishi bilan izohlanadi. Harorat oshishi atomlar kinetik energiyasini oshiradi va natijada tizimning erkin tebranish amplitudasi kattalashadi. Qaralayotgan temperaturalar sohasida rezonans chastotasi 0.160–0.163 THz oralig'ida saqlanib qoldi. Bu esa uglerod nanotrubkalari dastasining keng termik diapazonda yuqori dinamik va termik barqarorlikka ega ekanligini ko'rsatadi. Rezonans chastotasining deyarli o'zgarmasligi UNT dastasining qattqlik koeffitsienti termik ta'sir ostida sezilarli darajada kamaymaganligini anglatadi. Nanoo'lchamli rezonatorlar uchun rezonans chastotasining termik barqarorligi muhim ahamiyatga ega, chunki sensor va nanoelektromexanik tizimlarning ishlash aniqligi bevosita rezonans xususiyatlariga bog'liq bo'ladi.

Xulosa. Mazkur tadqiqotda, rezonans chastotasining 200–500 K oralig'ida deyarli o'zgarmasligi UNT asosidagi nanosensor qurilmalariga turli termik muhitlarda barqaror ishlash imkoniyatini beradi. Tadqiqot natijalarida, termik muhit asosan tebranish amplitudasiga sezilarli ta'sir ko'rsatgani, rezonans chastotasiga ta'siri nisbatan kichik bo'lganini ko'rishimiz mumkun. Bu esa uglerod nanotrubkalari dastasining yuqori elastik va mexanik barqarorlik xususiyatlari bilan bog'liqdir. Olingan natijalar UNT dastalarining termik barqarorligini baholash hamda nanorezonator va nanosensor qurilmalarida qo'llash imkoniyatlarini aniqlashga xizmat qiladi.

ADABIYOTLAR

1. Iijima, S. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature* 354, 56–58 (1991). <https://doi.org/10.1038/354056a0>
2. D Garcia-Sanchez, A San Paulo, MJ Esplandiu, F Perez-Murano, L Forró, A Aguasca, A. Bachtold. *Physical review letters*, 2007 <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.085501>
3. Yu-Ming Tu, Matthias Kuehne, Rahul Prasanna Misra, Cody L Ritt, Hananeh Oliaei, Samuel Faucher, Haokun Li, Xintong Xu, Aubrey Penn, Sungyun Yang, Jing Fan Yang, Kyle Sendgikoski, Joshika Chakraverty, John Cumings, Arun Majumdar, Narayana R Aluru, Jordan A Hachtel, Daniel Blankschtein & Michael S Strano. *Environmental damping and vibrational coupling of confined fluids within isolated carbon nanotubes*. *Nature Communications* volume 15, Article number: 5605 (2024). <https://doi.org/10.1038/s41467-024-49661-8>
4. Jun Natsuki, Xiao-Wen Lei, Shihong Wu, Toshiaki Natsuki, *Modeling and Vibration Analysis of Carbon Nanotubes as Nanomechanical Resonators for Force Sensing*. *Micromachines* 2024, 15(9), 1134; <https://doi.org/10.3390/mi15091134>
5. F. Scarpa, L. Boldrin, H.X. Peng, C.D.L. Remillat, S. Adhikari, *Coupled thermomechanics of single-wall carbon nanotubes*, *Appl. Phys. Lett.* 97 (15) (2010) 151903, <http://dx.doi.org/10.1063/1.3499748>.
6. P. Belardinelli a, S. Lenci a, F. Alijani, *Imperfection-induced internal resonance in nanotube resonators*, *Journal of Sound and Vibration* Volume 570, 3 February 2024, 118130. <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2023.118130>
7. M.H. Matheny, L.G. Villanueva, R.B. Karabalin, J.E. Sader, M.L. Roukes, *Nonlinear mode-coupling in nanomechanical systems*, *Nano Lett.* 13 (4) (2013) 1622–1626, <http://dx.doi.org/10.1021/nl400070e>.
8. A. Chandrashekar, P. Belardinelli, S. Lenci, U. Staufer, F. Alijani, *Mode coupling in dynamic atomic force microscopy*, *Phys. Rev. Appl.* 15 (2021) 024013, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevApplied.15.024013>.
9. M.Yoshida, *Nanotube Modeler (Nanocoones, Bucky-Ball, Fullerenes, Simulation Software)* (www.jcrystal.com)
10. Sandia National Laboratories, *Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)*, 2023, <https://www.lammps.org>
11. P. Erhart and K. Albe, *Analytical potential for atomistic simulations of silicon, carbon, and silicon carbide*, *Physical Review B*, Vol. 71, pp. 035211-1-14, 2005.
12. OVITO GmbH, *OVITO Basic Open Visualization Tool*, 2024, <https://www.ovito.org>