

## Modeling of system that based on nematic liquid crystals, double-sided carbon nanotube and fullerene molecules C<sub>60</sub>

Agelmenev M.E., Muldakhmetov Z.M., Bratukhin S.M., Polikarpov V.V., Irgasheva O.B.

amaxut@mail.ru

Institute of organic synthesis and coal chemistry

**Key words:** Nematic Liquid crystals, Fullerenes, double-walled nanotubes.

**Abstract.** In this work the results of the computer modeling of the behavior of nematic liquid crystals (LCs) in the presence of fullerene molecules and carbon double-walled nanotubes (CNT) were presented. It was found that location of fullerene molecules on the ends of CNT reduces ordering of LC.

УДК:532.783:541.1:539.21:535.37

## Моделирование системы, состоящей из нематических жидких кристаллов, углеродной двустенной нанотрубки и молекул фуллерена C<sub>60</sub>

Агельменев М.Е., Мулдахметов З.М., Братухин С.М., Поликарпов В.В., Иргашева О.Б.

amaxut@mail.ru

Институт органического синтеза и углехимии, г.Караганда

**Ключевые слова:** нематические жидкие кристаллы, фуллерены, двустенные нанотрубки.

**Аннотация.** В работе представлены результаты компьютерного моделирования поведения нематических жидких кристаллов (ЖК) в присутствии молекул фуллеренов и углеродной двустенной нанотрубки. Установлено, что расположение молекул фуллеренов на концах УНТ приводит к уменьшению упорядоченности ЖК

Открытие многочисленных видов наноструктур, например, углеродные нанотрубки (УНТ), молекулы фуллеренов [1-6], привело к развитию различных методов их получения [7-8] и производства их в промышленных масштабах. Улучшение физико-химических свойств нанокompозитных материалов определяет эффективность работы оптоэлектронных устройств на их основе. Диспергируя в среде жидких кристаллов малые количества наноструктур, таких как УНТ, фуллерены [9-25], удается существенно улучшить важные характеристики – времена откликов, пороговые напряжения электрического поля и другие. Известно [26-27], что УНТ часто образуют между собой агрегаты различной конфигурации. Исследование поведения жидких кристаллов [28-29] в присутствии параллельных УНТ позволило обнаружить перемещение ЖК молекул с одной УНТ на другую. Не менее интересен факт образования кристаллической структуры молекулами фуллеренов [5-6]. Интересен в этом смысле вопрос влияния агрегаций УНТ и молекул фуллеренов различной морфологии на поведение нематических жидких кристаллов. Поэтому целью данной работы явилось исследование влияния комплексов различной структуры, содержащих УНТ и молекул фуллерена C<sub>60</sub>, на поведение молекул жидких кристаллов методами молекулярной динамики.

Были созданы трехкомпонентные кластеры, содержащие полярную молекулу фенилпропаргилового эфира фторфенола (PEF)[30], неполярную – фенилпропаргилового эфира крезол (PEK) [31], двустенную УНТ и молекулы фуллеренов C<sub>60</sub>.

Тип структуры двустенной УНТ соответствовал: зигзаг структуре длиной 29,919нм, внутренняя (8,0) радиус 0.31 нм, внешняя (17,0) радиус 0.66 нм. Кластеры представляли собой 3

слоя молекул ЖК вокруг УНТ. Расстояния между плоскостями (OZ) составило 0,4 нм (PEF) и 0,5 нм (PEK), по OY – 1,6 нм для всех молекул (это направление совпадает с направлением директора и осью УНТ) смещение по этой оси между соседними молекулами 0,7 нм. Соседние молекулы ЖК располагались антипараллельно по отношению друг другу. Расстояние по дуге (OX) – 0,7 нм. Молекулы фуллерена C60 располагались в виде двух слоев вокруг УНТ: ближайшие молекулы в слое были смещены по OY на 0,7 нм, расстояние по дуге (OX) – 1 нм, от поверхности УНТ до центра ближайшей молекулы – 1 нм и между центрами соседних молекул разных рядов – 1 нм. Во внутреннем слое содержится 10, во внешнем слое – 16 молекул фуллеренов. Расстояние между молекулой фуллерена и ближайшей молекулой ЖК составляло 2 нм. Расстояние С-С в УНТ составляло 1,421 Å. УНТ была «заморожена», а молекулы фуллеренов не были «заморожены», то есть подвергались симуляции, как и молекулы ЖК.

Для проведения моделирования поведения этих соединений был использован метод молекулярной динамики на основе программы GROMACS [32] версии 3.3.1 в приближении жидкого агрегатного состояния [33-35]. При моделировании использован NPT ансамбль. Радиусы отсечки дисперсионного и кулоновского взаимодействия составляли 2 нм. Были проведены последовательные отжиги в режиме нагрева. Компьютерное моделирование было осуществлено для случая планарной ориентации ЖК молекул относительно УНТ в присутствии электрического поля. Время отжига при одной температуре составляло 10 пс, но при этом кластер располагался в одной ячейке, чем было реализовано жидкое агрегатное состояние системы, а значение напряженности электрического поля было  $1 \times 10^7$  В/м и направлено как вдоль оси УНТ (Ey), так и перпендикулярно ей (Ex). Был создан входной файл для формирования кластера, в котором учитывалось расстояние между молекулами, рядами и слоями кластера в направлениях XYZ.

Были исследованы 10 случаев расположения компонент системы относительно друг друга (таблица 1).

Таблица 1 – Структура и количество компонент системы «УНТ-C60-ЖК»

№	Расположение С:60 относит. УНТ	ЖК молекула	Кол-во ЖК	Кол-во С:60	Количество рядов в слоях			Кол-во ЖК в ряду
					1	2	3	
П1	центр	PEK	612	26	12	17	22	12
П2	центр	PEF	429	26	8	11	24	13
П3	конец	PEK	612	26	12	17	22	12
П4	конец	PEF	429	26	8	11	24	13
П5	центр -конец	PEK	561	52	12	17	22	11
П6	центр -конец	PEF	396	52	8	11	24	12
П7	конец - центр - конец	PEK	510	78	12	17	22	10
П8	конец - центр - конец	PEF	363	78	8	11	24	11
П9	конец -конец	PEK	561	52	12	17	22	11
П10	конец -конец	PEF	396	52	8	11	24	12

Методика подготовки и проведения экспериментов по компьютерному моделированию описана [32-35].

Результаты исследований представлены на рисунках 1-6.

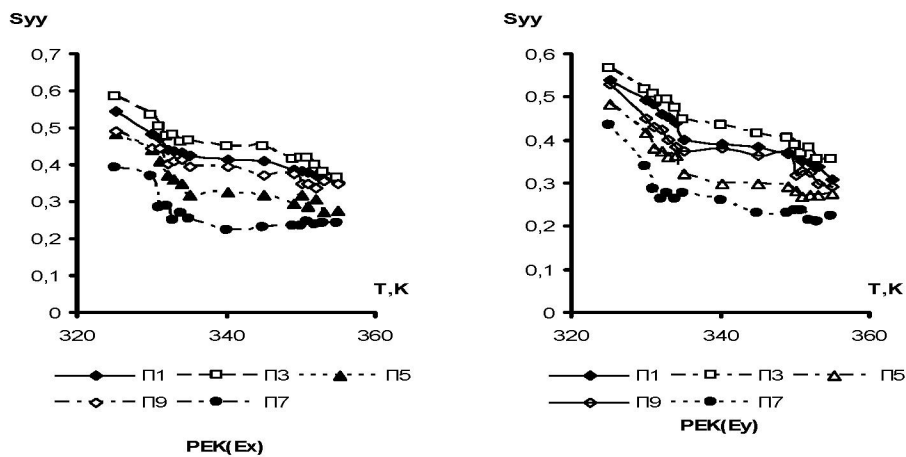


Рисунок 1 – Температурная зависимость степени упорядоченности РЕК при различных направлениях электрического поля

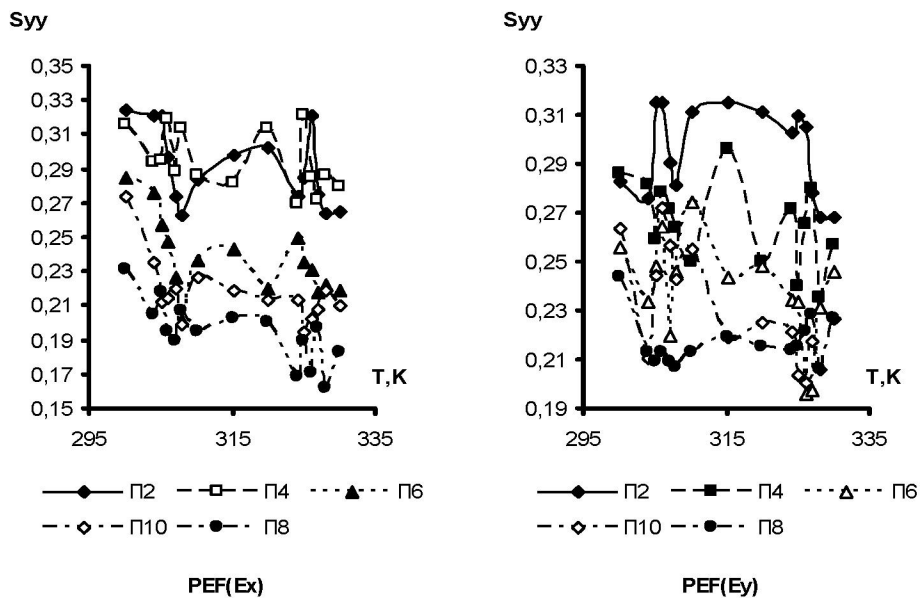


Рисунок 2 – Температурная зависимость степени упорядоченности РЕК при различных направлениях электрического поля

Как видно на рисунке 1, степень упорядоченности РЕК уменьшается с ростом температуры, и особенно в случаях пространственного ограничения ЖК молекулами фуллеренами (П5, П7, П10). Направление электрического поля не меняет эту закономерность. В случае полярной молекулы РЕК (рисунок 2) ситуация усложняется распадом димеров в области мезофазы [36]. Это приводит к потере монотонного спада кривых с ростом температуры. Но и здесь пространственное ограничение ЖК молекулами фуллерена приводит к уменьшению упорядоченности.

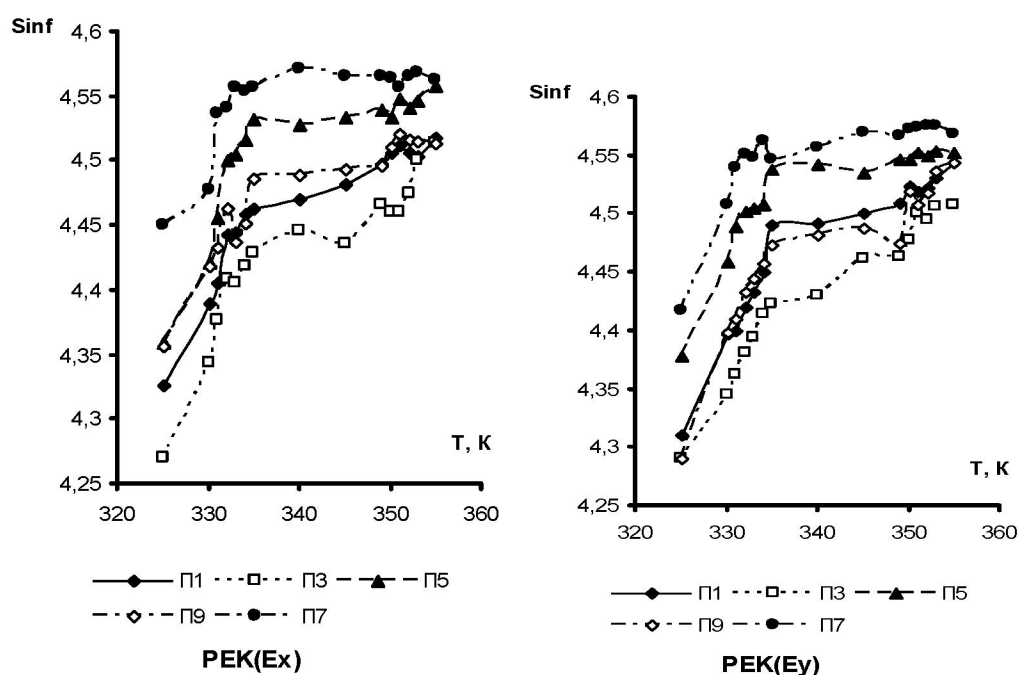


Рисунок 3 – Температурная зависимость информационной энтропии РЕК при различных направлениях электрического поля

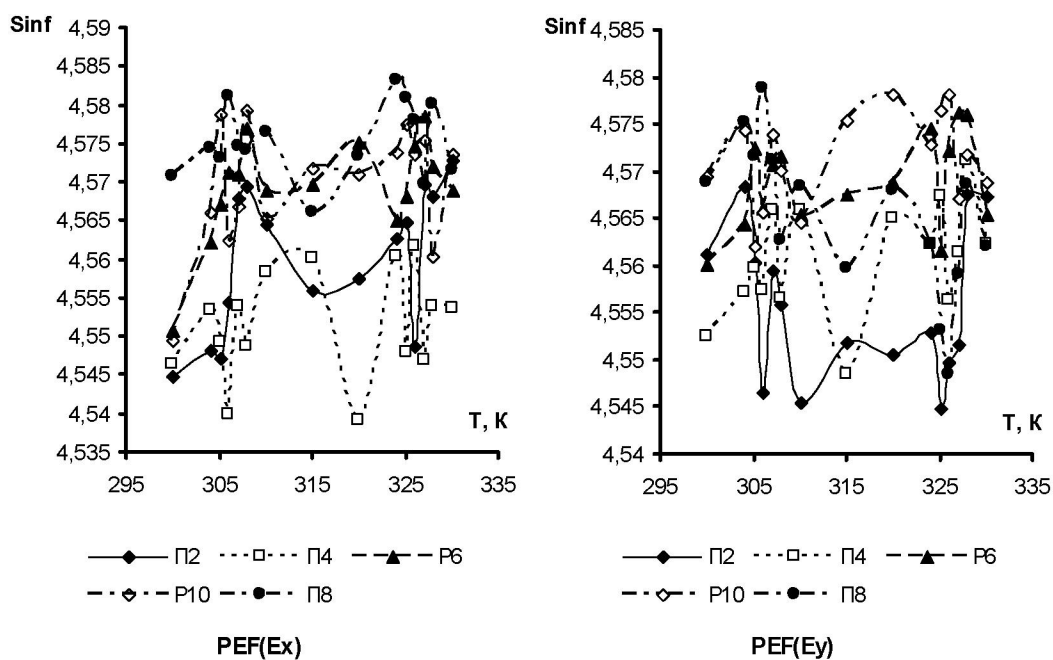


Рисунок 4 – Температурная зависимость информационной энтропии РЕФ при различных направлениях электрического поля

Температурные зависимости информационной энтропии РЕК и РЕФ (рисунки 3 и 4) согласуются с изменением упорядоченности этих соединений.

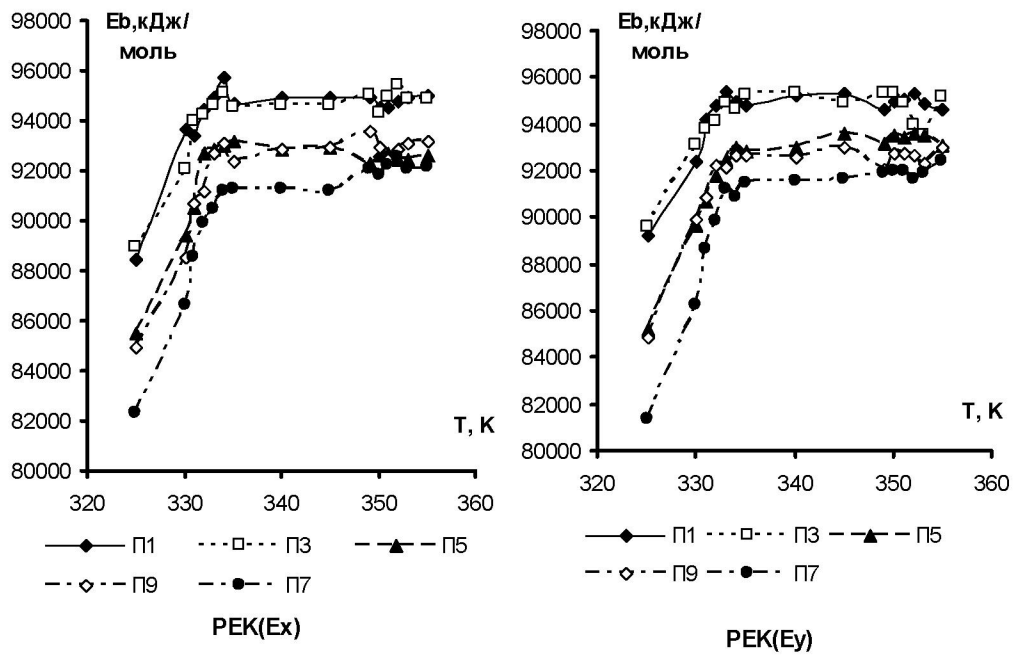


Рисунок 5 – Температурная зависимость информационной энтропии РЕК при различных направлениях электрического поля

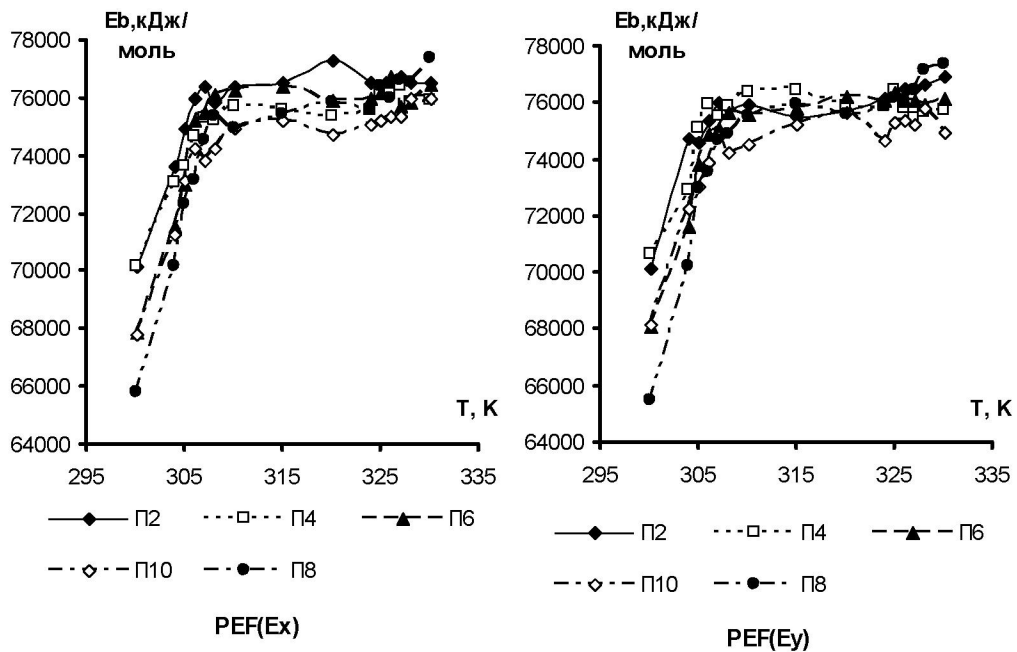


Рисунок 6 – Температурная зависимость информационной энтропии PEF при различных направлениях электрического поля

Изменение конфигурации исследуемой системы показывает, что ограничение ЖК молекулами фуллерена приводит к уменьшению упорядоченности ЖК. Это приводит к уменьшению энергии связи между молекулами ЖК (рисунки 5 и 6). Анализ снимков исследуемой системы показывает, что компоненты устойчивы в своих исходных положениях при температурном воздействии.

Таким образом, на основании проведенных исследований установлено, что расположение молекул фуллереновна концах УНТ приводит к уменьшению упорядоченности ЖК.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon // *Nature*. – 1991. – Vol.354. – P.56–58
- [2] Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Eklund P.C. *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*// Academic Press, New York.2000.
- [3] Керл Р.А. “Истоки открытия фуллеренов: эксперимент и гипотеза” (нобелевские лекции по химии –1996)// УФН.- 1998.- Т.168, №3. -С.331-342,
- [4] Смолин Р.Е. Открывая фуллерены//УФН.- 1998. - Т.168, №3. - С.323 -330.
- [5] Елецкий А.В., Смирнов В.М. Фуллерены // УФН.-1993.- Т.163, № 2.-С. 33-58.
- [6] Елецкий А.В., Смирнов В.М. Фуллерены и структура углерода // УФН.-1995.- Т.165, № 9 - С. 976-1009.
- [7] Раков Э.Г. Методы получения углеродных нанотрубок // *Успехи химии*. – 2000. –Т.69, № 1. – С. 41-59.
- [8] Раков Э.Г. Химия и применение углеродных нанотрубок // *Успехи химии*. – 2001. – Т.70, №10. – С.934-973.
- [9] Dierking I., Scalia D.G.I., Morales P. Liquid crystal-carbon nanotube dispersions// *J. Appl. Phys.* – 2005.-Vol.97. – P.044309-11.
- [10] Basu R., Iannacchione G. Nematic anchoring on carbon nanotubes// *J. Appl. Phys.Lett.*– 2009.-Vol.95.-P.183105-08.
- [11] Baik I.S., Jeon S.Y., Lee S.H., Park K.A., Jeong S.H., An K.H. et al. Electrical field effect on carbon nanotubes in a twisted nematic liquid crystal cell//*J. Appl.Phys. Lett.*-2005.-Vol.87.-P.263110-14
- [12] Shriyan S.K., Fontecchio A.K. Improved Electro-Optic Response of Polymer Dispersed Liquid Crystals Doped with Oxidized Multiwalled Carbon Nanotubes // *Mol. Crys.Liq.Cryst.* – 2010. – Vol.525, №1. – P.158-166.
- [13] Lee H.K., Lee S. E., Kang B.G., Jeon E.J., Lim Y.J., Lee K., Lee Y.H., Lee S.H. Effects of Carbon Nanotube Length on Electro-Optical Characteristics in Liquid Crystal Cell Driven by Fringe Field Switching // *Mol. Crys.Liq.Cryst.* – 2010. – Vol.530, №1. – P.1-6.
- [14] Tomylo S., Dolgov L., Semikina T., Yaroshchuk O. Liquid Crystal-Carbon Nanotubes Composites with the Induced Chirality: The Way Towards Enhancement of Electro-Optic Memory // *Mol. Crys. Liq. Cryst.* – 2010. – Vol.527, №1. – P.130-136.
- [15] Bravo-Sanchez M., Trevor J. Simmons, Vidal M.A. Liquid crystal behavior of single wall carbon nanotubes // *Carbon*. – 2010. –Vol.48, №12. – P.3531-3542.
- [16] Hosoda K., Tada R., Ishikawa M., Yoshino K. Effect of C60 doping on electrical and optical properties of poly [(disilanyl)ene] oligophenylenes // *Jpn. J. Appl. Phys.* - 1997. - Pt 2. Vol. 36, № 3B. - P. L372-L375.
- [17] Itaya A., Sizzuki I., Tsuboi Y., Miyasaaka H. Photoinduced electron transfer processes of C60-doped poly (Nvinylcarbazole) films as revealed by picosecond laser photolysis//*J. Phys. Chem. B.* - 1997. -Vol. 101, № 26. - P. 5118-5123.
- [18] Kamanina N.V. Reverse saturable absorption in fullerene-containing polyimides. Applicability of the Forster model // *Opt. Commun.* - 1999. -Vol. 162, № 4–6.- P. 228–232.
- [19] Kamanina N., Barrientos A., Leyderman A. et al. Effect of fullerene doping on the absorption edge shift in COANP// *Molecular Materials.* - 2000. -Vol. 13, № 1-4.- P. 275-280.
- [20] Lu Z., Goh S.H., Lee S.Y. et al. Synthesis, characterization and nonlinear optical properties of copolymers of benzylaminofullerene with methyl methacrylate or ethyl methacrylate // *Polymer.* - 1999.-Vol. 40.- P. 2863-2867.
- [21] Kamanina N.V., Bagrov I.V., Belousova I.M. et al. Fullerene-doped  $\pi$ -conjugated organic systems under infrared laser irradiation // *Opt. Commun.*-2001.-Vol. 194., № 4–6. - P. 367-372.
- [22] Каманина Н.В. Светоиндуцированное изменение показателя преломления в системе полиимид-фуллерен // *Оптика и спектроскопия.* -2001.- Т. 90, № 6. - С.960-964.
- [23] Каманина Н.В., Сизов В.Н., Стаселько Д.И. Запись тонких фазовых голограмм в полимер-диспергированных жидкокристаллических композитах на основе фуллеренсодержащих  $\pi$ -сопряженных органических систем // *Оптика и спектроскопия.* - 2001. -Т. 90, № 1.- С. 5-7.
- [24] Ruani G., Biscarini M., Cavallini M. et al. Optical limiting in the near infrared: a new approach // *Abstract booklet of 2nd Intern. Symp. on Optical Power Limiting, Venice (Italy).* –July 2-5,2000. – P. 69.
- [25] Каманина Н.В. Фуллеренсодержащие диспергированные нематические жидкокристаллические структуры: динамические характеристики и процессы самоорганизации//*Успехи физ.наук.*-2005.-Т.175, №4.-С.445-454.
- [26] Tu Y., Xiu P., Wan R., Hu J., Zhou R., Fang H. Water-mediated signal multiplication with Y-shaped carbon nanotubes//*Proc. Nation.Acad.Sci. USA.* -2009.-Vol.106.- P. 18120-18124.
- [27] Zsoldos I., Kakuk Gy., Janik J., Pék L. Set of carbon nanotube junctions// *Diamond & Related Materials.*-2005.- Vol.14- P.763–765.
- [28] Агельменев М.Е., Мулдахметов З.М., Братухин С.М., Поликарпов В.В., Иргашева О.Б., Айткенова Г.Т. Влияние на поведение нематических жидких кристаллов сочетания 2-х нано структур различного рельефа // *Известия НАН РК. Серия химии и технологии.* – 2011. – №6. – С.8-13.
- [29] Агельменев М.Е., Мулдахметов З.М., Братухин С.М., Поликарпов В.В., Буkenov М.М., Бектасова Г.С., Ерболатулы Д. Влияние вида сочетания углеродных одностенных нанотрубок на поведение смектических жидких кристаллов // *Вестник НАН РК.* - 2013.-№1.- С.16-32.
- [30] Агельменев М.Е., Бажиков К.Т., Мулдахметов З.М., Сизых М.Ю. Влияние атомов галогена на мезоморфизм ацетиленовых соединений//*Ж.физ.хим.* – 2002. - Т.76, №10. - С.1891-1893
- [31] Мулдахметов З.М., Агельменев М.Е., Советов Е.С. Влияние заместителей на мезоморфизм ацетиленовых соединений//*Ж.физ.хим.* - 1999. - Т.73, №11. - С.2085-2086.
- [32] Van der Spoel D., Lindahl E., Hess B., van Buuren A. R., Apol E., Meulenhoff P. J., Tieleman D. P., Sijbers A. L. T. M., Feenstra K. A., van Drunen R. and Berendsen H. J. C.. GROMACS User Manual version 3.3.1, [www.GROMACS.org](http://www.GROMACS.org)

- [33] Agelmenev M.E., Muldakhmetov Z.M., Bratukhin S.M., Pak V.G., Polikarpov V.V., Yakovleva O.A. The Dynamics of Some Nematic Liquid Crystals // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* – 2008. – Vol.494. – P.339–352.
- [34] Агельменев М.Е., Братухин С.М., Мулдахметов З.М., Поликарпов В.В. Моделирование мезогенной системы в жидком агрегатном состоянии // *Ж. физ. хим.*-2010. –Т. 84, № 7. - С. 1280–1284.
- [35] Agelmenev M.E. The modeling with free boundary // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* – 2011. - Vol. 545, № 1. - P. 190-203.
- [36] Агельменев М.Е., Мулдахметов З.М., Братухин С.М., Поликарпов В.В., Бектасова Г.С., Ерболатулы Д.И. Изучение влияния молекул фуллеренов C<sub>60</sub> на поведение некоторых смектических жидких кристаллов // *ДАН НАН РК.*-2013. - №1.- С.52-57.

## REFERENCES

- [1] Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon // *Nature.* – 1991. – Vol.354. – P.56–58
- [2] Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Eklund P.C. *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes* // Academic Press, New York, 2000.
- [3] Curl R.A. "The origins of the discovery of fullerenes: experiment and hypothesis" (Nobel lectures in chemistry -1996) // *UFN.* – 1998. - V.168, №3. - p.331-342. (in Russ.).
- [4] Smalley R.E. Opening fullerenes // *UFN.* – 1998. - V.168, №3. - p.323–330. (in Russ.).
- [5] Eletskii A.V., Smirnov V.M. Fullerenes // *UFN.* – 1993. - V.163, № 2. - p. 33-58. (in Russ.).
- [6] Eletskii A.V., Smirnov V.M. Fullerenes and carbon structures // *UFN.* – 1995. - V.165, № 9 - p. 976-1009. (in Russ.).
- [7] Rakov E.G. Methods for producing carbon nanotubes // *Usp.* - V.69 2000, № 1. - p. 41-59. (in Russ.).
- [8] Rakov E.G. Chemistry and application of carbon nanotubes // *Usp.* - 2001. - V.70, №10. - p.934-973. (in Russ.).
- [9] Dierking I., Scalia D.G.I., Morales P. Liquid crystal-carbon nanotube dispersions // *J. Appl. Phys.* – 2005. – Vol.97. – P.044309-11.
- [10] Basu R., Iannacchione G. Nematic anchoring on carbon nanotubes // *J. Appl. Phys. Lett.* – 2009. – Vol.95. – P.183105-08.
- [11] Baik I.S., Jeon S.Y., Lee S.H., Park K.A., Jeong S.H., An K.H. et al. Electrical field effect on carbon nanotubes in a twisted nematic liquid crystal cell // *J. Appl. Phys. Lett.* – 2005. – Vol.87. – P.263110-14
- [12] Shriyan S.K., Fontecchio A.K. Improved Electro-Optic Response of Polymer Dispersed Liquid Crystals Doped with Oxidized Multiwalled Carbon Nanotubes // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* – 2010. – Vol.525, №1. – P.158-166.
- [13] Lee H.K., Lee S. E., Kang B.G., Jeon E.J., Lim Y.J., Lee K., Lee Y.H., Lee S.H. Effects of Carbon Nanotube Length on Electro-Optical Characteristics in Liquid Crystal Cell Driven by Fringe Field Switching // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* – 2010. – Vol.530, №1. – P.1-6.
- [14] Tomylo S., Dolgov L., Semikina T., Yaroshchuk O. Liquid Crystal-Carbon Nanotubes Composites with the Induced Chirality: The Way Towards Enhancement of Electro-Optic Memory // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* – 2010. – Vol.527, №1. – P.130-136.
- [15] Bravo-Sanchez M., Trevor J. Simmons, Vidal M.A. Liquid crystal behavior of single wall carbon nanotubes // *Carbon.* – 2010. – Vol.48, №12. – P.3531-3542.
- [16] Hosoda K., Tada R., Ishikawa M., Yoshino K. Effect of C<sub>60</sub> doping on electrical and optical properties of poly [(disilanylene) oligophenylenes] // *Jpn. J. Appl. Phys.* - 1997. - Pt 2. Vol. 36, № 3B. - P. L372-L375.
- [17] Itaya A., Sizzuki I., Tsuboi Y., Miyasaaka H. Photoinduced electron transfer processes of C<sub>60</sub>-doped poly (N-vinylcarbazole) films as revealed by picosecond laser photolysis // *J. Phys. Chem. B.* - 1997. - Vol. 101, № 26. - P. 5118-5123.
- [18] Kamanina N.V. Reverse saturable absorption in fullerene-containing polyimides. Applicability of the Forster model // *Opt. Commun.* - 1999. - Vol. 162, № 4–6. - P. 228–232.
- [19] Kamanina N., Barrientos A., Leyderman A. et al. Effect of fullerene doping on the absorption edge shift in COANP // *Molecular Materials.* - 2000. - Vol. 13, № 1–4. - P. 275-280.
- [20] Lu Z., Goh S.H., Lee S.Y. et al. Synthesis, characterization and nonlinear optical properties of copolymers of benzylaminofullerene with methyl methacrylate or ethyl methacrylate // *Polymer.* - 1999. - Vol. 40. - P. 2863-2867.
- [21] Kamanina N.V., Bagrov I.V., Belousova I.M. et al. Fullerene-doped  $\pi$ -conjugated organic systems under infrared laser irradiation // *Opt. Commun.* – 2001. – Vol. 194, № 4–6. - P. 367-372.
- [22] Kamanina N.V. Light-induced refractive index change in the polyimide-fullerene // *Optics and Spectroscopy.* – 2001. - V. 90, № 6. - p.960-964. (in Russ.).
- [23] Kamanina N.V., Sizov V.N., Staselko D.I. Record fine phase holograms in the polymer-dispersed liquid crystal composites based on fullerene  $\pi$ -conjugated organic systems // *Optics and Spectroscopy.* - 2001 - V. 90, № 1. - pp 5-7. (in Russ.).
- [24] Ruani G., Biscarini M., Cavallini M. et al. Optical limiting in the near infrared: a new approach // *Abstract booklet of 2nd Intern. Symp. on Optical Power Limiting, Venice (Italy).* – July 2-5, 2000. – P. 69.
- [25] Kamanina N.V. Fullerene-dispersed nematic liquid crystal structures: dynamic characteristics and self-organization processes // *Advances physics.* – 2005. – V.175, №4. – p.445-454. (in Russ.).
- [26] Tu Y., Xiu P., Wan R., Hu J., Zhou R., Fang H. Water-mediated signal multiplication with Y-shaped carbon nanotubes // *Proc. Nation. Acad. Scien. USA.* – 2009. – Vol.106. – P. 18120-18124.
- [27] Zsoldos I., Kakuk Gy., Janik J., Pék L. Set of carbon nanotube junctions // *Diamond & Related Materials.* – 2005. – Vol.14. – P.763–765.
- [28] Agelmenev M.E., Muldakhmetov Z.M., Bratukhin S.M., Polikarpov V.V., Irgasheva O.B., Aytkenova G.T. Influence on the behavior of nematic liquid crystals combining 2 nano structures of various relief // *News of NAS Rk. Chemistry and Technology Series.* - 2011. - №6. - p.8-13. (in Russ.).

- [29] Agelmenev M.E., Muldakhmetov Z.M., Bratukhin S.M., Polikarpov V.V., Bukenov M.M., Bektasova G.S., Erbolatuly D. Influence of a kind combination of carbon single-walled nanotubes on the behavior of smectic liquid crystals // Bulletin of NAS RK. - 2013. - №1. - p.16-32. (in Russ.).
- [30] Agelmenev M.E., Bazhikov K.T., Muldakhmetov Z.M., Sizykh M.Yu. Effect of halogen atoms on mesomorphism acetylenic compounds // J. phys. chem. - 2002. - V.76, №10. - p.1891-1893. (in Russ.).
- [31] Muldakhmetov Z.M., Agelmenev M.E., Sovetov E.S. The effect of substituents on the mesomorphism acetylenic compounds // J. phys. chem. - 1999. - V.73, №11. - p.2085-2086. (in Russ.).
- [32] Van der Spoel D., Lindahl E., Hess B., van Buuren A. R., Apol E., Meulenhoff P. J., Tieleman D. P., Sijbers A. L. T. M., Feenstra K. A., van Drunen R. and Berendsen H. J. C.. GROMACS User Manual version 3.3.1, [www.GROMACS.org](http://www.GROMACS.org)
- [33] Agelmenev M.E., Muldakhmetov Z.M., Bratukhin S.M., Pak V.G., Polikarpov V.V., Yakovleva O.A. The Dynamics of Some Nematic Liquid Crystals // Mol. Cryst. Liq. Cryst. – 2008. – Vol.494. – P.339–352.
- [34] Agelmenev M.E., Bratukhin S.M., Muldakhmetov Z.M., Polikarpov V.V. Modeling mesogenic system in the liquid state // J. phys. chem 2010. -V. 84, № 7. - p. 1280-1284. (in Russ.).
- [35] Agelmenev M.E. The modeling with free boundary // Mol. Cryst. Liq. Cryst. – 2011. - Vol. 545, № 1. - P. 190-203.
- [36] Agelmenev M.E., Muldakhmetov Z.M., Bratukhin S.M., Polikarpov V.V., Bektasova G.S., Erbolatuly D. Studying of C60 molecules influence the behavior of some of smectic liquid crystals // DAN NAS RK. -2013. - №1.- p.52-57. (in Russ.).

**Фуллерен молекулардан, екіқабырғалы көміртегі нанотүтікшеден және нематикалық сұйық кристалдардан тұратын жүйені моделдеу**

**Агелменев М.Е., Молдахметов З.М., Братухин С.М., Поликарпов В.В., Иргашева О.Б.**  
Органикалық синтез және көмір химиясы институты, Қарағанды

**Кілт сөздер:** нематикалық сұйық кристалдар, фуллерендер, екіқабырғалы нанотүтікшелер.

**Аңдатпа.** Бұл жұмыста екі қабырғалы көміртегі нанотүтікшесінің молекулалары мен фуллерен молекулалары қатысуымен нематикалық сұйық кристалдарын компьютерлік моделдеу нәтижесі келтірілген. Фуллерен молекулалары нанотүтікшенің соңында орналасуы сұйық кристалдардың реттілігінің азаюына әкеліп соқтырады.

*Поступила 12.02.2015 г.*