

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

(PhD). *А.Н. Улукмурадов*

*Ташкентский институт текстильной
и легкой промышленности*

Аннотация: В данной работе было рассмотрено молекулярно-динамическое моделирование одностенной углеродной нанотрубки диаметром 6,93 Å и длиной 22,75 Å с креслом киральности (5,5) и атомами водорода. Показано, что характер протекающих процессов зависит как от энергии рассеиваемых атомов, так и от температуры нанотрубки. Изучены процессы адсорбции и инкапсуляции от количества водорода, поступающего в нанотрубку.

Ключевые слова: Углерод, водород, атом, нанотрубка, моделирование.

В настоящее время потребность в промышленном производстве многослойных углеродных нанотрубок ограничивается спросом и практическим отсутствием развитого рынка их потребления. Между тем возможности их потенциального применения расширяются - от электроники и космической промышленности до медицины и строительной промышленности. Об этом свидетельствует и тот факт, что в последние годы наблюдается подлинный бум исследований фундаментальных особенностей поведения в различных условиях столь экзотических и многообещающих объектов [1-2].

В данной работе было рассмотрено молекулярно-динамическое моделирование одностенной углеродной нанотрубки диаметром 6,93 Å и длиной 22,75 Å с креслом киральности (5,5) и атомами водорода (рис. 1).

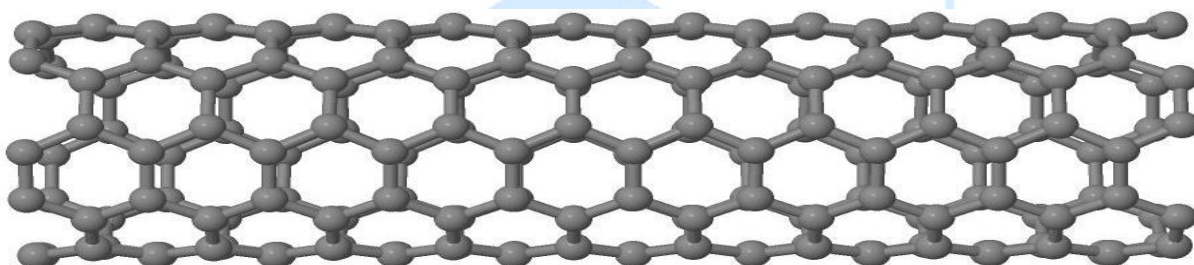


Рис.1: Смоделированная одностенная углеродная нанотрубка

Взаимодействие атомов водорода (hN) с одностенной углеродной нанотрубкой рассмотрена задача моделирования связей методом молекулярной динамики. Для объяснения явлений мы используем разработанные Цзоу

параметры потенциала ReaxFF в реактивном молекулярно-динамическом (МД) моделировании взаимодействия атома водорода с углеродной нанотрубкой. В ходе моделирования атомы водорода сбрасывались на поверхность нанотрубки с шагом по времени 0,5 нс в диапазоне 0-100 пс при температуре 300 К с различными энергиями (1 эВ, 2 эВ, 4 эВ, 6 эВ, 10 эВ, 14 эВ и 16 эВ), а также изучены процессы адсорбции и десорбции атомов водорода на нанотрубке. Взаимодействие атомов водорода с атомами в углеродной нанотрубке зависит от скорости столкновения атомов. Энергия десорбции атома водорода между атомами углеродной нанотрубки составила 2-2,41 эВ. С энергии 2,44-2,45 эВ начиналось состояние адсорбции, которое наблюдалось до энергии 9,6 эВ. Средняя длина связи Н-С составляла 1,12-1,15 Å (рис. 2).

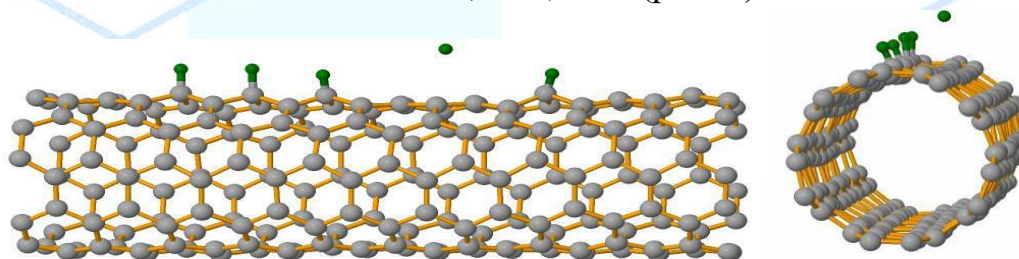


Рис:2 Процесс адсорбции атомов водорода на поверхности углеродных нанотрубок.

Начиная с энергии 9,7 эВ, происходит процесс входа (инкапсуляции) водорода в нанотрубку, достигший максимума при 15,3 эВ. При этом длина связи между Н-С в среднем составляла 1,12-1,16 Å. При энергиях выше 15,4 эВ происходит выход водорода из нанотрубки. На графике ниже показана энергетическая зависимость количества атомов водорода, оставшихся на поверхности нанотрубки (рис. 3).

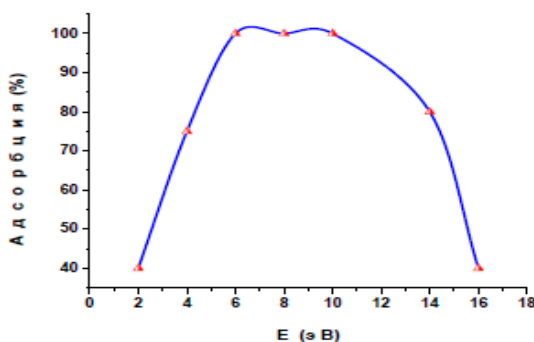


Рис:3. Количество атомов водорода (N), присоединенных к нанотрубке, в терминах энергии является индикатором адсорбции.

Исследования показали, что при моделировании атомов водорода H с помощью углеродных нанотрубок водород больше остается на поверхности нанолита. Этот расчет может помочь понять, как нанотрубки разной хиральности и размера взаимодействуют с атомами водорода (H), и увеличить емкость хранения в зависимости от количества атомов водорода в нанотрубке.

Литература

1. Thostenson Erik T., C.L., Tsu-Wei Chou Composites Science and Technology, 2005, № 65, p. 491—516.
2. Wong S.S., Joselevich E., Woolley A.T., Cheung C.L., Lieber C.M. Nature, 1998, v. 394, p. 52
3. M. Mohan, V. K. Sharma, E. A. Kumar, V. Gayathri “Hydrogen storage in carbon materials -A review”, Energy Storage. 2019.
4. Q.K.Wang, C. C. Zhu, W. H. Liu and T. Wu, Int. J. Hydrogen Energy, 2002.
5. C. Zou, Y.K. Shin, A.C.T. van Duin, H. Fang, Z.-K. Liu, Molecular dynamics simulations of the effects of vacancies on nickel self-diffusion, oxygen diffusion and oxidation initiation in nickel, using the ReaxFF reactive force field, Acta Mater. (2015)
6. Kh.I.Jabborov, A.N.Ulukmuradov, I.D.Yadgarov, N.I.Ibrokhimov. Letters on Materials 12 (1), 2022 pp.27-31.