

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ АДСОРБЦИИ АТОМОВ ВОДОРОДА НА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

У.Б. Улжаев¹, И.Д. Ядгаров¹, Е. А. Юлдашева²,

¹) Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз. Ташкент, Узбекистан

²) Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан

Методами молекулярной динамики проведено численное моделирование взаимодействия атомов водорода с углеродной нанотрубкой. Объектом моделирования была выбрана однослойная углеродная нанотрубка хиральностью (5,5), диаметром 0,693 нм. Численное значение диаметра нанотрубки в целом совпадает с экспериментальными результатами, в которых внутренний диаметр нанотрубки лежит в диапазоне $0,63 \text{ нм} < d < 0,79 \text{ нм}$. При формировании нанотрубок одним из параметров, их характеризующих, является т. н. хиральность. Любую однослойную углеродную нанотрубку, развернутую в лист, можно представить как пример поверхности графена (правильной гексагональной сетки с атомами углерода), заданной парой чисел (n, m) , называемых индексами хиральности. Индексы хиральности (n, m) -координаты радиус-вектора \mathbf{r} в криволинейной системе координат (рис.1). Для проведения модельных экспериментов по рассеянию атомов водорода поверхностью углеродной нанотрубки был использован программный пакет LAMMPS.

Мы изучаем процесс взаимодействия атомов водорода (H) с углеродными нанотрубками в реактивной молекулярной динамике (МД). При численном моделировании МД, мы используем потенциал ReaxFF и параметры, разработанные Zou и др. [1]. Объект моделирования углеродная нанотрубка (5,5) диаметром 0,693 нм (рис. 1).

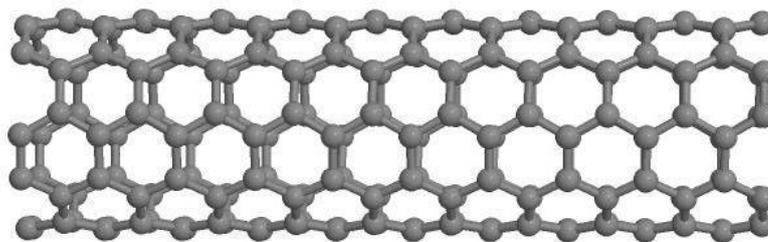


Рисунок 1. Однослойная углеродная нанотрубка хиральностью (5,5), диаметром 0,693 нм.

На рис. 2 приведены результаты по нормальному рассеянию атомов водорода различных энергий на поверхности нанотрубки. Наблюдаются процессы адсорбции атомов водорода с энергиями 2–16 эВ. При энергии выше 16 эВ наблюдается инкапсуляция и рассеяние атомов водорода.

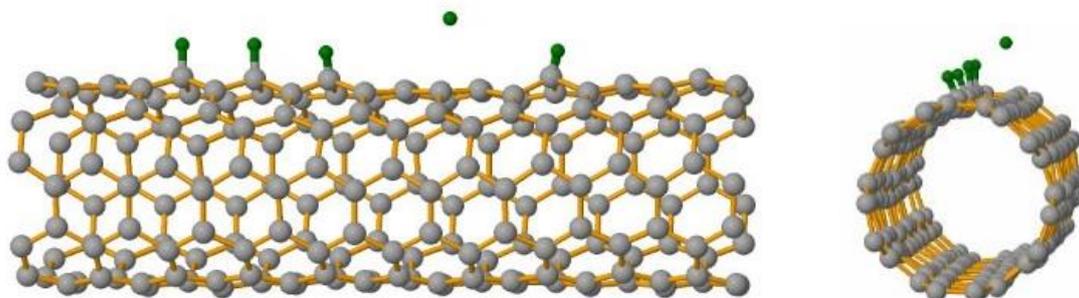


Рисунок 2. Адсорбция атомов водорода, рассеянных с различными энергиями на углеродной нанотрубке

Результаты моделирования показывают, что процесс адсорбции происходит в основном при взаимодействии атомов водорода с углеродной нанотрубкой с энергиями 2–16 эВ. При энергии выше 16 эВ наблюдается инкапсуляция и рассеяние атомов водорода.

ЛИТЕРАТУРА

1. С. 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. 83 (2015) 102e112.