

**МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОТРУБОК В ВОДОРОДНОЙ АТМОСФЕРЕ МЕТОДОМ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**А.В. Николаева

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, Н. В. Чистякова
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: philip371g@gmail.com

**MODELING OF NANOTUBES IN THE HYDROGEN ATMOSPHERE BY THE METHOD OF
MOLECULAR DYNAMICS**A.V. Nikolaeva

Scientific Supervisor – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, N. V. Chistyakova
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: philip371g@gmail.com

***Abstract.** In the present study, there is an investigation of the processes of hydrogen absorption by one-layered carbon nanotubes with a usage of the molecular dynamics method. In order to describe this system, there were selected Airebo potential. Besides, there was analyzed the behavior of the atoms of hydrogen and carbon in the isotropic process. Moreover, there was determined, that hydrogen is absorbed on the opened edges of nanotubes.*

Введение. Водород – экологически чистый и высокоэффективный дешевый энергоноситель. В настоящее время транспортировка и хранение водорода в газовом или жидком состоянии в баллонах не является как эффективным, так и безопасным методом. Для производства действенных хранилищ водорода под высокими давлениями требуются высокопрочные стали и специальные материалы для предотвращения утечек. При хранении водорода в жидком состоянии потери связаны с расхолаживанием системы при заправке, а также испарением водорода во время хранения.

Хранение водорода в адсорбированном состоянии углеродными нанотрубками (УНТ) поможет решить проблему его безопасного хранения и транспортировки. Нанотрубки могут быть использованы в качестве контейнера для хранения водорода, сохраняя его плотность.

УНТ химически стабильны, имеют незначительную массу и сравнительно недороги, что делает их идеальным материалом для хранения водорода в адсорбированном состоянии. При нагревании водород может медленно высвободиться из углеродных материалов. Диаметр трубок от десяти до нескольких десятков нанометров и длина может достигать нескольких сантиметров. Нанотрубки состоят из одной или нескольких гексагональных графитовых плоскостей свёрнутых в трубку [1].

Материалы и методы исследования. В настоящей работе в программе VMD [2] построена однослойная углеродная нанотрубка с индексами хиральности (50, 5) и длиной 50 Å ($d = 37.3488$ Å), концы трубки открыты (рис. 1).

В МД программе LAMMPS [3] была создана расчетная область размером (-60, 60, -60, 60, 0, 120). В начальный момент времени в расчетную область импортировалась нанотрубка, созданная в VMD.

Вокруг трубки в случайном порядке с помощью команды `create_atoms` создавались 50 атомов водорода. Всем атомам расчетной области задавалась температура 500 К и давление 2 атм при изотропном процессе. Уравнения динамики решались с постоянным шагом по времени $dt = 10^{-16}$ с.

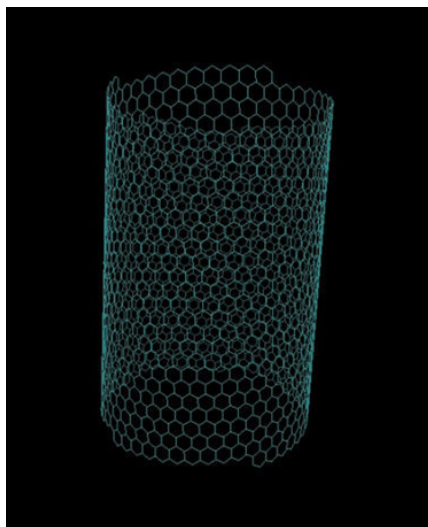


Рис.1. Углеродная нанотрубка

При этом учитывались три типа взаимодействия: взаимодействие атомов Н между собой; взаимодействие атомов С между собой; взаимодействие между атомами Н и С. Эти взаимодействия описывались с помощью потенциала Airebo.

С помощью программы Ovito [4] получили кадры состояния системы на первом и последнем шаге моделирования (рис. 2).

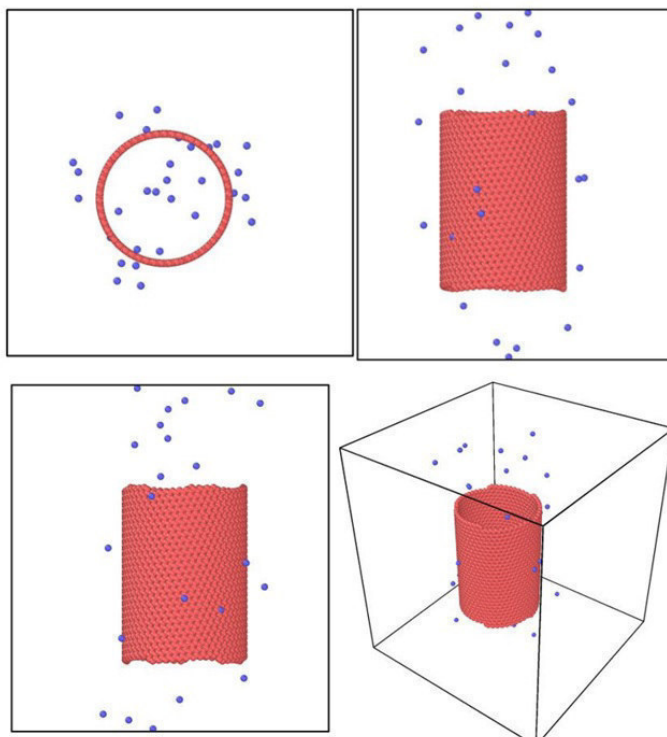


Рис.2. Состояния системы на первом шаге моделирования

Состояние системы на последнем шаге моделирования (рис. 3).

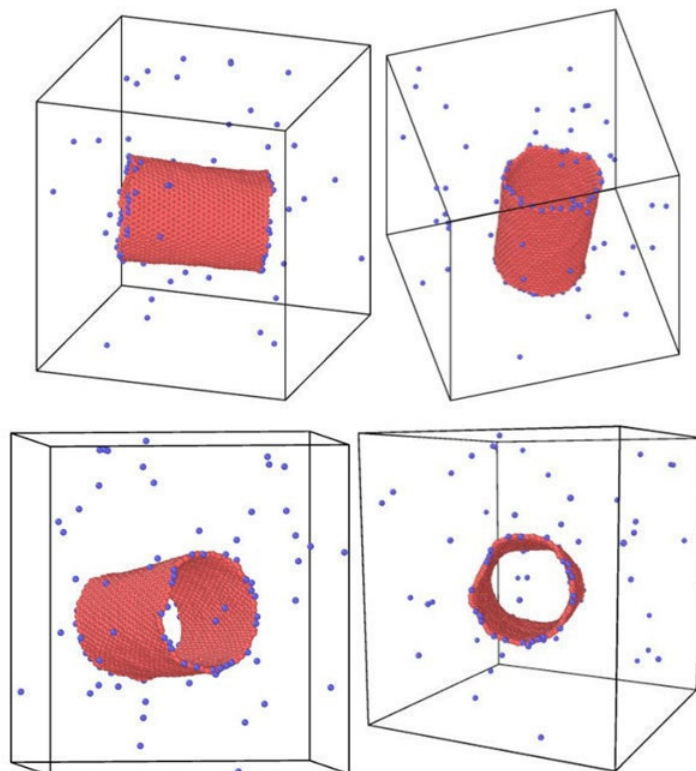


Рис.3. Состояния системы на последнем шаге моделирования

Предполагалось, что процессы физической адсорбции происходят на внешней поверхности нанотрубки. Анализируя фотографии из программы Ovito видно, что при температуре $T = 500$ К и давлении 2 атм на открытых краях нанотрубки образуются слои абсорбированных атомов водорода.

Заключение. Разработан код для программы LAMMPS, реализующий моделирование процессов адсорбции водорода углеродными нанотрубками на атомарном уровне. Написанный код планируется дополнить в дальнейшем и на его основе построить пучок нанотрубок.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вахрушев А.В., Липанов А.М., Суетин М.В. Моделирование процессов аккумуляции водорода у углеводородов наноструктурами. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований; НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2008
2. Visual Molecular Dynamics [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>
3. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://lammps.sandia.gov/>
4. The Open Visualization Tool [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://ovito.org/index.php/download>