

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПУЧКА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ
МЕХАНИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ И В ГАЗОВЫХ СРЕДАХ**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 A CARBON NANOTUBE BUNCH UNDER THE INFLUENCE OF MECHANICAL
PRESSURE AND IN GAS ENVIRONS**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 this work, a simulation of a carbon nanotube beam by the molecular dynamics method was performed. The change in the structure of the tubes under the influence of mechanical pressure and when placed in gaseous media - argon, molecular hydrogen was investigated.*

Введение. Развитие человечества требует создания новых технологий в области альтернативной энергетики, которая имеет проблему хранения энергии. Для того чтобы ее решить нужны новые виды энергетических материалов-накопителей. Существуют углеродные материалы, которые можно применять по-разному. К ним относятся графен, фуллерен, углеродные нанотрубки (УНТ). Нанотрубки являются многообещающим материалом в качестве накопителя энергии.

Для создания материалов с необходимыми свойствами необходимы исследования в области их сорбционных способностей. Ввиду сложности получения таких материалов, большое значение приобретают методы моделирования, которые позволяют выбрать, категорировать материалы для их дальнейшего использования и поставить задачи для ученых экспериментаторов.

Целью моей работы является моделирование изменения структуры УНТ под воздействием механического фактора и давления газов. Т. к. с точки зрения материалов накопителей для меня важно как изменяется структура при разных воздействиях на исследуемый материал.

Материалы и методы исследования. В программе LAMMPS с помощью команды replicate создали гексагонально упакованный пучок нанотрубок длиной 96 Å с межтрубным расстоянием 3 Å

В МД можно применить разные способы повышения давления в системе - команда wall/piston и команда fix deform. Симуляция методом wall/piston связана с движением поршня бесконечной массы, отражающим частицы в указанной группе. Поэтому в LAMMPS мы создали поршень, движущийся с постоянной скоростью 10 Å/пс в положительном направлении z. Скорость деформации задавалась 10 Å/пс, что означает уменьшение длины коробки на 20% каждую пикосекунду. С помощью программы Ovitó получили кадры состояния системы на последнем шаге моделирования (N = 20000 шагов расчета или 2 пс) см. рисунок 1.

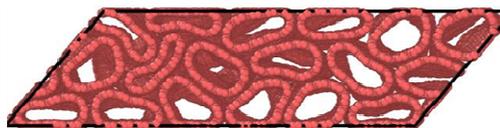


Рис.1. Состояния системы на последнем шаге моделирования

Построили график зависимости напряжения от деформации (рисунок 2).

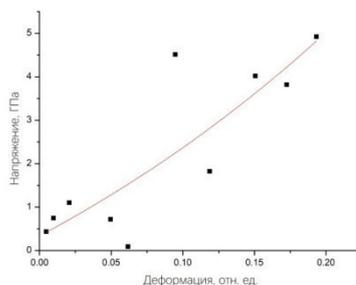


Рис. 2. Зависимость напряжения от деформации

При использовании алгоритма сжатия с wall/piston из рисунка 2 видим, что где-то трубки сжались сильнее, где-то слабее, поэтому наблюдается большой разброс напряжений.

Также объем расчетной ячейки был отрегулирован командой fix deform. В команде использовался стиль egate, изменяющий размер коробки при постоянной скорости деформации. Скорость деформации, равная 10 Å/пс, означает уменьшение длины коробки на 20% каждую пикосекунду. Сжатие происходит вдоль оси y (рисунок 3).

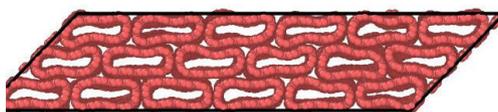


Рис.3. Состояния системы на последнем шаге моделирования

Построили график зависимости напряжения от деформации (рисунок 4).

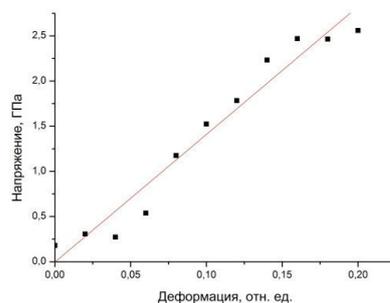


Рис.4. Зависимость напряжения от деформации

При использовании алгоритма сжатия с fix deform из рисунка 4 видим, что происходит равномерная деформация трубок и кривая напряжение – деформация идет плавно.

В начальный момент времени в расчетную область импортировался пучок из 16 нанотрубок шириной 135 Å и межтрубным расстоянием 3 Å. Вокруг этого пучка с помощью команды create_atoms

создавались 1600 молекул водорода, которые получили с помощью команды lattice custom. Всем атомам расчетной области задавалась температура 300 К (рисунок 5).

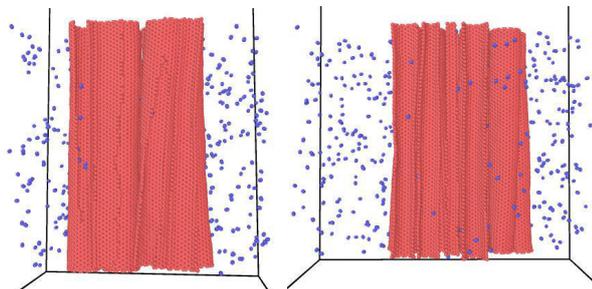


Рис. 5. Осевое сечение пучка нанотрубок вдоль оси z на последнем шаге моделирования

Из рисунка 5 видим, что молекулы водорода находятся как внутри трубок, так и в межтрубном пространстве, мы предполагаем, что молекулы H_2 заходят через открытые концы трубок. Также наблюдаются молекулы водорода внутри пучка УНТ. Давление газа равно 16 атм.

Был проведен эксперимент с аргоном. Вокруг пучка УНТ создавались 2400 атомов аргона. Всем атомам расчетной области задавалась температура 300 К (рисунок 6).

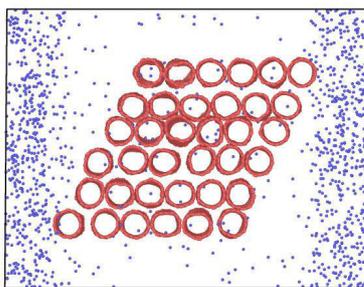


Рис. 6. Состояния системы на последнем шаге моделирования

Анализируя рисунок 6 видно, что при температуре $T=300$ К атомы аргона проникают во внутрь пучка УНТ. Давление газа равно 20 атм.

Заключение. В случае применения техники одноосного сжатия и алмазного поршня, получается равномерная деформация трубок и равномерный рост давления. При использовании техники поршня, трубки деформируются неравномерно. В результате сжатия уменьшается объем сводного пространства как внутри, так и снаружи трубок, что может являться причиной уменьшения времени жизни позитронов, наблюдаемой в экспериментах. По результатам моделирования выдержки нанотрубок в атмосфере аргона при давлении 20 атм и температуре 300 К можно сделать вывод, что аргон проникает внутрь нанотрубок. В результате моделирования пучка УНТ в водородной атмосфере при давлении 16 атм и температуре 300 К молекулы водорода хранятся как внутри трубок, так и в межтрубном пространстве и наблюдается деформация пучка.