

Изучение процессов взаимодействия углеродных димеров с нанотрубками и расчет их эффективных сечений

Кушель Дмитрий Иванович

аспирант

Белорусский государственный технологический университет, Минск, Республика

Беларусь

E-mail: diomn@mail.ru

Несмотря на достигнутый в последние годы большой прогресс в деле выращивания нанотрубок под постоянным контролем за их размером и структурой, уровень такого контроля все еще не достаточен для того, чтобы позволить промышленное использование нанотрубок во многих потенциальных сферах их применения. Затруднения в значительной степени вызваны существующим пробелом в понимании механизмов и внутренних законов роста углеродных наноструктур, в связи с чем знания о процессах их синтеза носят во многом эмпирический, рецептурный характер. Трудности экспериментального исследования механизмов роста нанотрубок приводят к попытке прояснить эти процессы теоретическими методами.

В данной работе методом молекулярной динамики исследовалось взаимодействие димеров углерода с однослойными углеродными нанотрубками типа armchair различных длин и диаметров. В качестве потенциала межатомного взаимодействия на основе анализа литературы был выбран потенциал REBO (reactive empirical bond order potential), предложенный в работах [1-2]. Расчет сил производился на основе аналитического выражения, полученного путем соответствующего дифференцирования функции потенциальной энергии.

С целью наблюдения за процессами, протекающими в моделируемой реакционной системе, в расчетной программе был реализован графический блок, который позволял визуализировать образующиеся промежуточные структуры и процессы перестройки связей.

В ходе моделирования были идентифицированы каналы взаимодействия димеров с рассматриваемыми нанотрубками и рассчитаны их эффективные сечения для различных энергий столкновения углеродных частиц с нанотрубкой. Установлено, что значения эффективных сечений практически не зависят от величины колебательной энергии димеров.

Сверткой функции начального распределения димеров по векторам скоростей для заданной температуры с функциями зависимостей эффективных сечений от векторов скоростей получены кинетические константы ряда элементарных реакций в системе углеродный димер – нанотрубка.

Литература

1. Brenner D.W., Shenderova O.A., Harrison J.A. et al. A second generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons // J. Phys.: Condens. Matter, 2002, v.14, P.783–802.
2. Кушель, Д.И. Модификация REBO – потенциала межатомного взаимодействия в углеводородных системах // Труды БГТУ, Сер. III, Химия и технология неорганических веществ, 2006, Вып. XIV, С. 21–23.