

МОДЕЛИРОВАНИЕ СОСТОЯНИЯ ВОДОРОДА ВНУТРИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Самсонов А.М.

Чувашский государственный педагогический университет, Россия, Чебоксары,
cheb87@inbox.ru

Компьютерное моделирование хранения водорода в углеродных нанотрубках позволяет судить об изменении агрегатного состояния водорода по мере его накопления в УНТ. Фазовая диаграмма водорода, приведенная на рис. 1, при наличии значительного ограничения в размерах объема, содержащего водород, может получить заметные искажения.

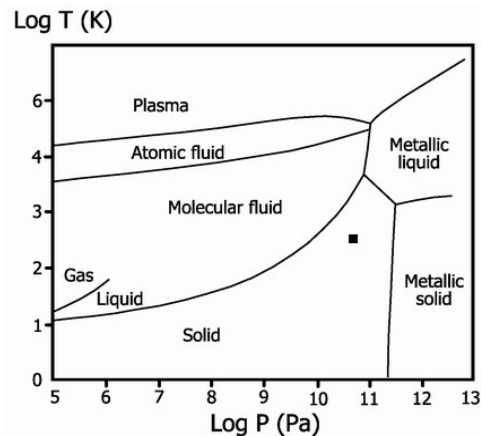


Рис.1. Фазовая диаграмма водорода

Хорошо известно, что эти искажения связаны с уменьшением размеров объема до величин, сравнимых с рядом характерных длин, которые определяют состояние системы многих частиц. При заполнении водородом внутренности нанотрубки ограничения в размерах имеют место в плоскости, перпендикулярной оси УНТ. Наши наблюдения за состоянием водорода, помещенным внутрь УНТ, подтверждают наличие упорядоченности, характерной для твердотельной фазы, при давлениях порядка 50 ГПа, при комнатной температуре (см. черный квадратик на рис.1). Мы надеемся найти размерные искажения путем дальнейших более подробных вычислений.

Литература

1. Александров В.А., Самсонов А.М. Поверхность. Рентгеновские и нейтронные исследования, № 12, 2012. – С. 60
2. Александров В.А., Филиппов Г.М. и др. Поверхность. Рентгеновские и нейтронные исследования, № 2, 2012. – С. 83