

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИИ И РАЗРУШЕНИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В УСЛОВИЯХ ИХ ЗАПОЛНЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫМ ВОДОРОДОМ

Александров В.А., Лысова И.В.¹, Сабиров А.С., Степанов А.В.¹, Филиппов Г.М.²

Чувашский государственный университет им. И.Н.Ульянова, РФ, 428000, г. Чебоксары,
Московский проспект, д. 15, тел.: (8352) 45-03-01, alex0v0a@yandex.ru,
kansas57@rambler.ru,

¹ Чувашский государственный педагогический университет им. И.Я.Яковлева, РФ,
428000, г. Чебоксары, ул. К.Маркса, д. 38, тел.: (8352) 62-03-24, arinia@mail.ru,
for.antonstep@gmail.com,

² Чебоксарский политехнический институт (филиал) Московский государственный
открытый университет, РФ, 428000, г. Чебоксары, ул. К. Маркса, д. 54, тел.: (8352) 63-
04-59, filippov38-gm@yandex.ru.

Безопасная транспортировка и хранение водорода являются важными звеньями технологической цепочки водородной энергетики. В настоящее время имеются некоторые основания полагать, что большие перспективы для хранения водорода может иметь использование наноструктур, в частности, нанотрубок. На пути решения данной задачи важное значение приобретает возможность компьютерного моделирования процессов заполнения нанотрубок молекулярными структурами. Такой подход сравнительно недорогим способом позволяет получить предварительные оценки плотности заполнения углеродных нанотрубок, при которых их структура еще не будет нарушена.

В работе с помощью метода классической молекулярной динамики проводится моделирование заполнения водородом одностенных углеродных нанотрубок методом каналирования. Корректный учет всех взаимодействий участвующих частиц имеет очень важное значение в таких расчетах. Описание взаимодействия углеродных атомов нанотрубки между собой, а также их взаимодействие с атомами водорода проводится с применением эмпирических многочастичных потенциалов типа Терсоффа-Бреннера и их модификаций. Исследуется степень деформации углеродной нанотрубки при ее заполнении атомными структурами и характер ее разрушений возникающих при этом. Деформации сопровождаются разрывами и образованием связей с последующей перестройкой структуры стенок УНТ, изменением линейных размеров.

Литература.

1. Brenner D.W. The art and science of an analytical potential. *Phys. Stat. Sol. (b)* 217 (23), 2000. P. 23-40
2. Brenner D. W., Shenderova O.A., Harrison J.A. Stuart, S. J., Ni B., Sinnott S.B. A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons. *J. Phys.: Condens. Matter.* 14, 2002. P. 783-802