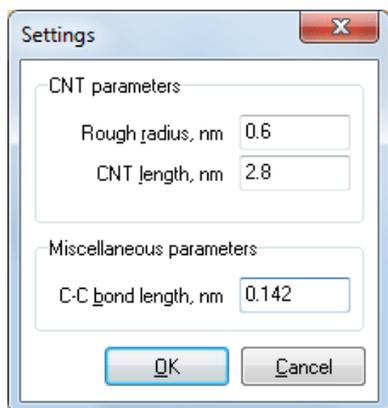


6. ИССЛЕДОВАНИЕ САМООРГАНИЗАЦИИ НАНОТУБУЛЯРНЫХ АККУМУЛЯТОРОВ ВОДОРОДА С ПОМОЩЬЮ МОДУЛЯ «МОЛЕКУЛЯРНАЯ НАНОМЕХАНИКА»

Целью работы является выявление возможности существования углеродных нанотрубчатых аккумуляторов бирадикалов водорода со значениями энергий связи в системе соответствующих экспериментальным значениям «супер» физического или слабого химического взаимодействия.

Порядок выполнения работы



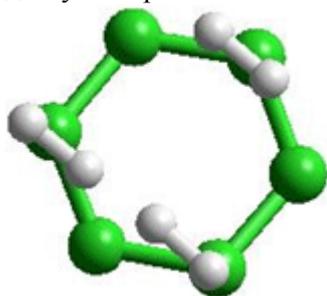
1.

Рис. 35. Вид окна *Settings*

Запустите программу **CNTH**. Первым шагом является задание параметров структуры нанотрубки — радиуса, длины, а также межатомного расстояния C—C, если оно должно отличаться от значения по умолчанию (0.142 нм).

Для указания этих параметров вызовите команду *Settings...* из меню *Edit*. В появившемся окне нужно ввести значение радиуса, длину нанотрубки и при необходимости — межатомное расстояние C—C (величины значений указаны на рис. 36).

2. Задав параметры, можно сконструировать готовую модель нанотрубки, вызвав команду *Create CNT*. **CNTH** позволяет при необходимости отключать отображение межатомных C—C-связей, оставляя лишь отображение ядер атомов углерода в виде точек. Данная возможность доступна при использовании команды *Display bonds* из меню *View*.



3.

Рис. 36. Фрагмент структуры

Суть процедуры конструирования модели адсорбата сводится к ручному заданию положений H-атомов бирадикала для одного лишь произвольного гексагона нанотрубки (C₆) и последующему автоматическому распространению созданного таким образом правила на все остальные гексагоны.

Задача - необходимо построить модель нанотрубчатого аккумулятора, в котором бирадикалы располагаются непосредственно над C-атомами с внутренней стороны трубки, таким образом, что один на шестиугольник приходится три бирадикала. Каждый бирадикал в такой структуре «принадлежит» одновременно трем гексагонам, стыкующимся в точке расположения

углеродного атома под водородом. Следовательно, на один гексагон приходится $6/3 = 2$ атома Н. Это в свою очередь означает, что нужно задать координаты только двух Н-атомов для произвольно выбранного гексагона.

4. Вызовите команду *Configure adsorbate...* из меню *Edit*.

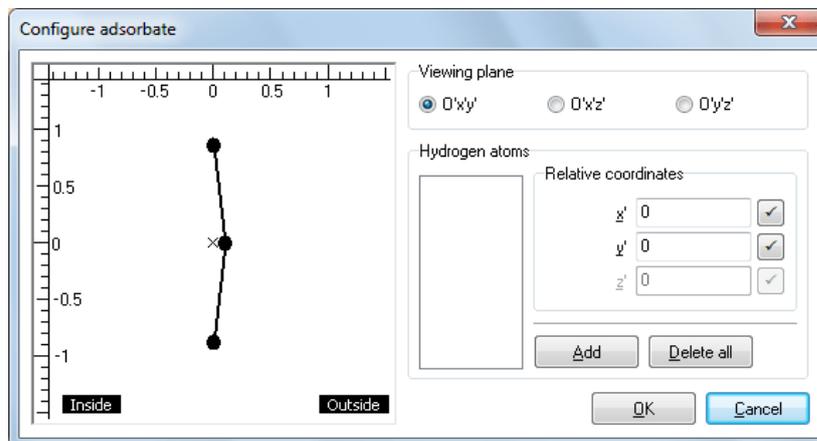


Рис. 37. Диалоговое окно *Configure adsorbate*

5. В левой части появившегося окна *Configure adsorbate* находится изображение проекции гексагона C_6 ранее построенной нанотрубки. Плоскость проецирования можно переключать, выбирая нужную из группы *Viewing plane*. Вспомогательные надписи *Inside* и *Outside* на изображении поясняют, какая сторона гексагона обращена внутрь нанотрубки, а какая наружу. Крестиком \times обозначено расположение начала относительных координат O' . Сами относительные координаты для наглядности отмеряются линейками, расположенными слева и сверху.

Группа *Hydrogen atoms* позволяет добавлять атомы водорода и управлять их относительными координатами x' , y' , z' . Добавьте два Н-атома, последовательным двукратным нажатием на кнопку *Add*. Оба атома появятся в списке в левой части группы *Hydrogen atoms*, а также будут отрисованы в виде кружков на схеме проекции гексагона. Далее двукратным нажатием по любому из атомов в разделе *Hydrogen atoms* переводим Н в Н1 (Это необходимо для моделирования бирадикала H_1-H_1). Атомы на схеме можно перетаскивать указателем мыши. Координаты первого атома водорода указаны на рис.39, для второго они должны быть:

X' Y' Z'
 0.8000 0.3000 -0.9813

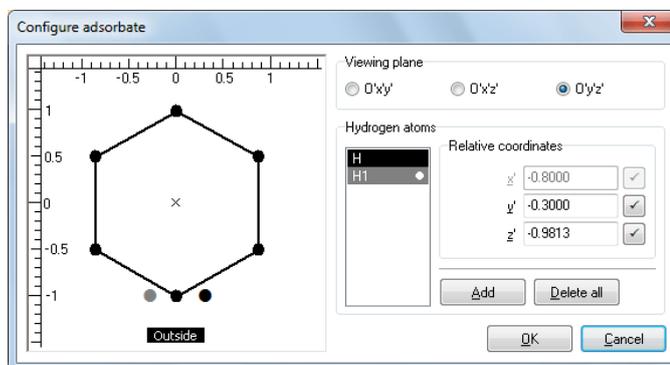


Рис. 38. Диалоговое окно *Configure adsorbate*

6. Когда положения атомов водорода будут правильно отображаться на всех трех проекциях, нажмите кнопку ОК.

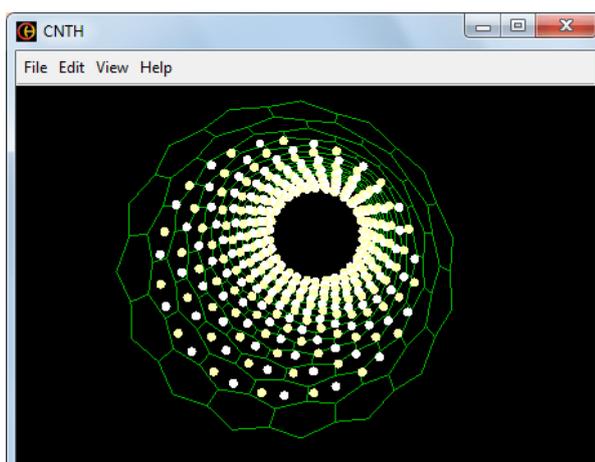


Рис. 39. Вид модели

7. Для вызова диалога сохранения воспользуйтесь командой *Save as...* из меню *File*. Созданный файл сохраните в папке `Laboratory\lab\accumulators\structur`.
8. Запустите программу «*NanoEvolver*» — *Dissipative kT* (версия 4.10).
9. Загрузите из внешнего файла модель структуры углеродного нанотубулярного аккумулятора водорода. Загрузка осуществляется посредством команды *Load structure...* из меню *File*.
10. Расположите модель на экране так, чтобы обеспечить удобство ее обзора. Используйте клавиши $\leftarrow \uparrow \downarrow \rightarrow$ для вращения модели в пространстве; **Insert/Delete** — для приближения/отдаления; **Page Up/Page Down** — для перемещения по вертикали; **Home/End** — для перемещения по горизонтали.

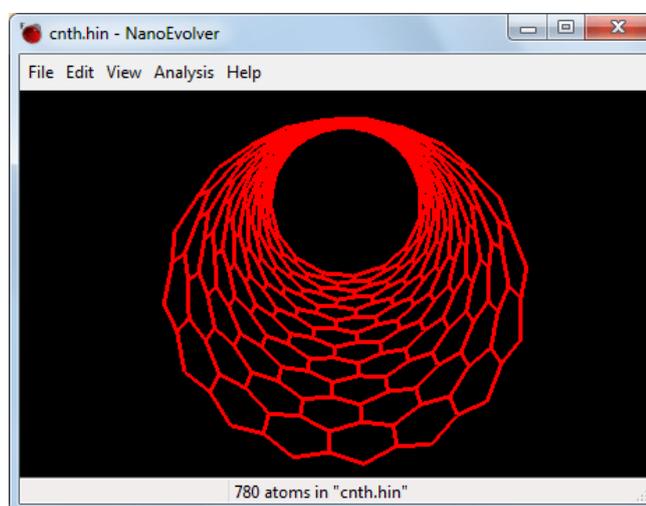


Рис. 40. Вид модели углеродного нанотубулярного аккумулятора водорода в окне «*NanoEvolver*»

11. Из меню *View* вызовите команду *Graph...*

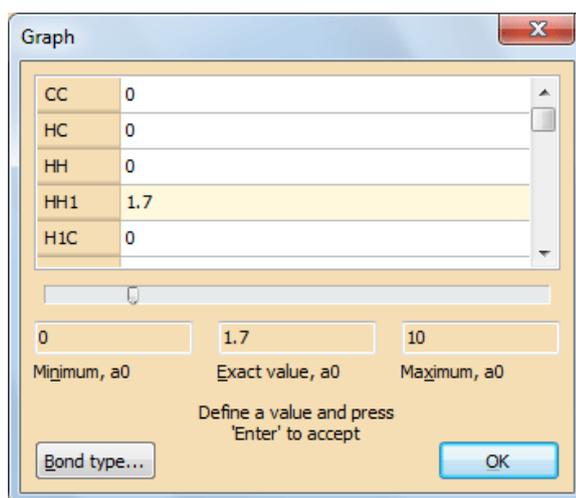


Рис. 41. Диалоговое окно Graph...

Введите параметры HH1 указанные на рис.42 (значение вводится в поле *Exact value*) и затем сохраните структуру с типом файла, как показано на рис. 43:

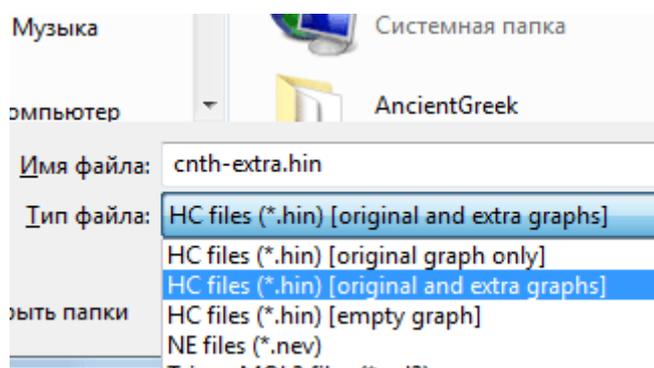


Рис. 42. Выбор формата сохранения структуры

12. Откройте сохраненную структуру в программе «*NanoEvolver*».
13. В «*NanoEvolver*» используются аппроксимирующие парные потенциалы в форме функции Морзе. Параметры потенциалов — D_0 (энергия диссоциации), R_0 (равновесное расстояние) и ω (частота колебаний). Задание параметров межатомных потенциалов для загруженной модели и определение установок расчетной процедуры.

Указание параметров потенциалов, а также некоторых важных опций и параметров, влияющих на ход расчетной процедуры, производится в диалоговом окне *Settings* (см. рис. 44), вызвать которое можно с помощью команды *Set parameters...* меню *Edit*.

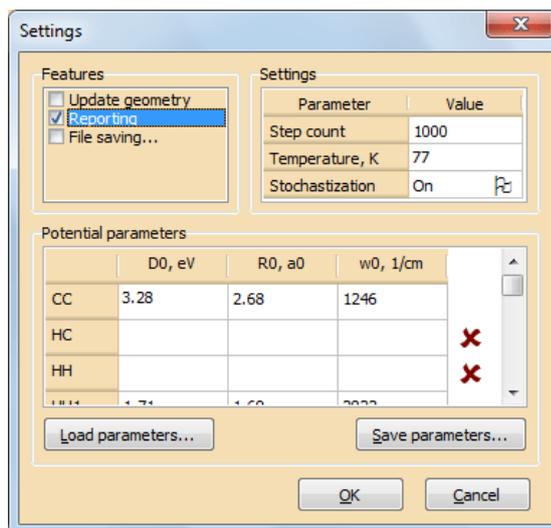
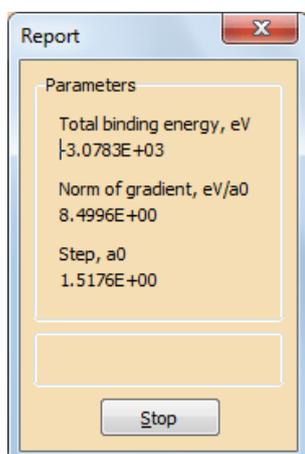


Рис. 43. Диалоговое окно выставления опций и параметров

Установите параметры, как показано на рис. 44. Параметры межатомных потенциалов введите нажав на кнопку *Load parameters...*, загрузите эти данные из внешнего файла параметров **Potential_parameters.txt**, который расположен в той же папке, что и загруженная структура.

- Сохраните отчет во внешнем файле. Для этого вызовите команду *Save report as...* из меню *File*. Укажите путь и имя файла, нажмите **Сохранить**. «*NanoEvolver*» сохраняет отчеты в удобном формате гипертекста, можете сейчас просмотреть сохраненный на диске отчет, используя любой установленный на компьютере браузер. Анализируя отчет, обратите внимание на единицы измерения и порядок величин.



- Окно с кратким отчетом при завершении расчетной процедуры

Далее раскройте меню *Edit* главного окна программы «*NanoEvolver*» и выберите пункт *Evolve*. В зависимости от количества итераций, выставленного в окне *Settings*, а также от размеров выбранного для расчетов образца, процедура моделирования процесса самоорганизации может занять несколько минут. По завершении первого «прогона» процедуры отметьте (запомните или запишите) текущие значения полной энергии.

- Оцените визуально изменения, которые произошли в геометрии структуры. Для получения наиболее отчетливой картины деформаций поверхности вы можете вращать и перемещать модель в пространстве, а также подобрать другие цвета для атомов структуры и для фона.

Подбор цвета атомов и фона осуществляется посредством команд *Define atoms color...* и *Define window color...* соответственно.

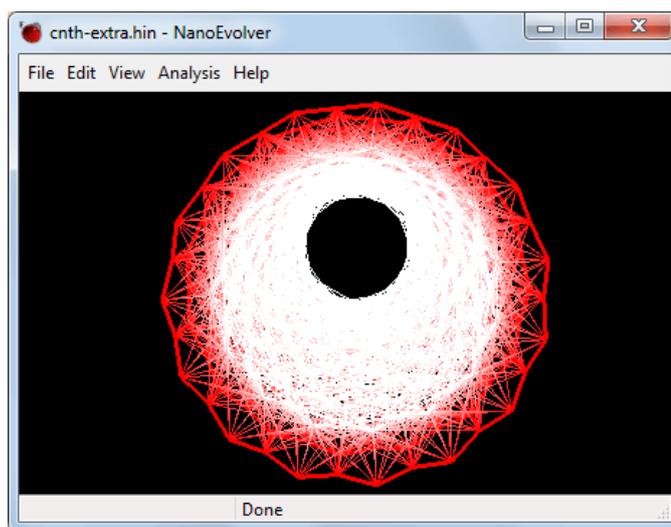


Рис. 45. Геометрия исследуемой системы как результат расчетов в программе «NanoEvolver»

17. Сохраните отчет (*File*→*Save report as...*) для полученной в результате структуры. Проведите расчеты для температур 300К и 700К. Обратите внимание на изменение полной энергии связи.
18. Создайте модель с другим содержанием водорода и проведите исследование при температуре 77К.

Рекомендации по оформлению отчета.

Название работы

Цель работы:

Заполните таблицу

Температура моделирования	Изображение структуры	Величина полной энергии связей
77К		
300К		
700К		

Сделайте вывод о выполненной работе. Что происходит с водородом при повышении температуры? Сравните общую энергию связей, сделайте вывод о возможности существования аккумулятора с более высоким содержанием водорода.