

СТРУКТУРА МЕТАНА, АДсорБИРОВАННОГО В ТРИАНГУЛЯРНО УПАКОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ¹

А.В. Школин, А.А. Фомкин, Е.М. Стриженов, А.Л. Пулин

*Лаборатория равновесной адсорбции ИФХЭ РАН,
119071, Москва, Ленинский проспект, д.31, корп. 4; e-mail: shkolin@bk.ru*

Среди наиболее перспективных супрамолекулярных структур для систем аккумуляции метана можно выделить систему из упорядоченно упакованных одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) при помощи молекул координаторов [1]. При синтезе подобных структур встает вопрос о выборе молекул, структурно-энергетические характеристики которых позволяют создать наиболее эффективную пористую структуру для решения задачи аккумуляции. Прогноз оптимальной пористой структуры пор для повышения адсорбционной емкости аккумуляторов метана, позволит существенно упростить выбор молекул координаторов при их синтезе. В связи с этим в работе при использовании метода молекулярной динамики проанализирована структура метана, адсорбированного в микропорах различного эффективного радиуса, образованных триангулярно упакованными нанотрубками.

В качестве модели элементарной микропоры использовали супрамолекулярную структуру из 3 ОУНТ уложенных пучком в триангулярной упаковке. Диаметр нанотрубок $D = 10 \text{ \AA}$, расстояние между ОУНТ, отсчитанное от центров атомов углерода $G = 8, 12, 16 \text{ и } 20 \text{ \AA}$, длина нанотрубок $L = 50 \text{ \AA}$. Предполагали, что ОУНТ не хиральные, а поверхность трубки представлена совершенным графитовым слоем с поверхностной плотностью атомов углерода $\rho_{\text{с}} = 0.3818 \text{ атом} \cdot \text{\AA}^{-2}$.

В ячейку моделирования $50 \times 50 \times 50 \text{ \AA}$, помещали различное количество молекул метана, от 50 до 500. Температура термостата - 298 К. Расчеты проводились при помощи пакета TINKER с силовым полем OPLS-AA. Элементарный шаг интегрирования уравнения движения составил 1 фс, мгновенные снимки получали каждые 1000 фс. В работе анализировалось расположение молекул метана в ячейке моделирования с модельной микропорой и свободным объемом.

В работе анализировались плотность вероятности расположения молекул метана в супрамолекулярной структуре из ОУНТ в плоскости yz , перпендикулярной к нанотрубкам, и радиальная плотность вероятности. Расчет показал, что для всех исследованных структур, в области малых заполнений микропор, наблюдается преимущественное расположение молекул вблизи нанотрубок, т.е. частично локализованная адсорбция на поверхности твердого тела и низкая вероятность расположения молекул в объеме поры. С ростом заполнения микропор, вероятность расположения молекул метана вблизи нанотрубок уменьшается, а в объеме поры увеличивается, что свидетельствует о переходе механизма адсорбции от частично локализованной к объемному заполнению. Для относительно узких пор, с расстоянием между ОУНТ 8 и 12 $\text{\AA}$, наблюдается адсорбция молекул метана вблизи стенок нанотрубок и в центральной части микропоры. Для более широких пор, расстояние между ОУНТ 16 и 20 $\text{\AA}$, наравне с центральной частью поры заполняется также пространство между нанотрубками.

Литература

1. Фомкин А.А. // Физикохимия поверхности и защита материалов. 2009. Т.45. С.133-149.

¹ Работа выполнена при поддержке «Минобрнауки России»: грант №16.120.11.3616-МК