Uzbek Journal of Physics
DOI: https//doi.org/10.52304/.v25i2.425

Адсорбция атомов азота на поверхности двуслойных углеродных нанотрубок

Ш.А. Муминова[1], Ф.Ф. Умаров[2], Д.В. Алябьев[1], И.Д. Ядгаров[*,1]

[1]Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Дурмон йули 33, 100125, Ташкент, Узбекистан
[2]Казахстанско-Британский технический университет, Алматы, Толе би 59, Казахстан

Получена 18.04.2023, revised 14.06.2023

* Corresponding author: e-mail uub1988@mail.ru, Phone: +998 93 586 85 17

Методами молекулярной динамики (ReaxFF, LAMMPS) проведены модельные эксперименты по взаимодействию атомов азота с поверхностью углеродной нанотрубки. В работе построены двухслойные углеродные нанотрубки хиральностью (5.5) и (10.10), диаметром 0.678–1.357 нм и (8.0) и (17.0) диаметром 0.627–1.332 нм, длиной 2.229 нм. Показано, что процесс адсорбции преобладает в диапазоне энергий атомов азота 0.94–15 эВ, а процесс инкапсуляции – в диапазоне 16–18 эВ. Установлено, что характер происходящих процессов зависит как от энергии взаимодействующих атомов азота.

Ключевые слова: адсорбция, моделирование, углеродная нанотрубка, диаметр нанотрубки, хиральность, длина нанотрубки.

Model experiments on the scattering of nitrogen atoms by the surface of a carbon nanotube were carried out using molecular dynamics methods (ReaxFF, LAMMPS). In this work, a two-layer carbon nanotubes with chirality (5.5) and (10.10) with a diameter of 0.678–1.357 nm and chirality (8.0) and (17.0) with a diameter of 0.627–1.332 nm and a length of 2.229 nm have been constructed. It is shown that the adsorption process prevails in the energy range of nitrogen atoms 0.94–15 eV, while the encapsulation process prevails in the range 16–18 eV. It has been established that the nature of the occurring processes depends both on the energy of the interacting nitrogen atoms with the nanotube.

Keywords: adsorption, modeling, carbon nanotube, nanotube diameter, chirality, nanotube length.

I. Введение

Одной из наиболее актуальных в настоящее время областей нанотехнологии является исследование углеродных наноструктур [1-2]. Углеродные нанотрубки (УНТ), обладающие разнообразными электрическими, оптическими, эмиссионными и другими свойствами, представляют как фундаментальный, так и прикладной интерес [3]. Одним из геометрических параметров УНТ является вектор хиральности с индексами n, m [4].

Любую однослойную углеродную нанотрубку, развернутую в лист, можно представить как пример поверхности графена (правильная гексагональная сетка, состоящая из атомов углерода) с заданной парой чисел n, m – индексов хиральности, координат хирального вектора $\overrightarrow{\mathrm{Ch}}$ в криволинейной системе координат (рис. 1). Окружность ОСУНТ определяется ее хиральным вектором $\overrightarrow{\mathrm{Ch}}$

$$\overrightarrow{\mathrm{Ch}} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2,$$

где $\vec{a}_1$ и $\vec{a}_2$ – единичные векторы решетки графена.

Каждая ОСУНТ представляет собой цилиндр, свернутый из графена по хиральному вектору (rolling vector). Индексы хиральности указывают координаты шестиугольника, который в результате сворачивания плоскости должен совпасть с шестиугольником, находящимся в начале координат. Индексы хиральности однозначно опделяют диаметр нанотрубки:

$$D = \sqrt{m^2 + n^2 + nm}\,\frac{\sqrt{3}d_0}{\pi},$$

где d_0 = 0.142 нм – расстояние между соседними атомами углерода в графитовой плоскости.

Экспериментально получено множество структур на основе УНТ: однослойные (ОСУНТ) разных диаметров, двуслойные и многослойные (ДСУНТ, МСУНТ) [5-8].

Двуслойные углеродные нанотрубки (ДСУНТ) представляют собой относительно новый класс углеродных наноструктур. ДСУНТ состоит из двух эквивалентных концентрических углеродных нанотрубок с межстенным расстоянием 0.33–0.42 нм [9]. Эта структура с двойными стенками делает ДСУНТ простейшей системой для изучения влияния межстенной связи на физические свойства углеродных нанотрубок. По сравнению с однослойными углеродными нанотрубками ДСУНТ обладают более высокой механической прочностью и термической стабильностью, а также обладают интересными электронными и оптическими свойствами [6].

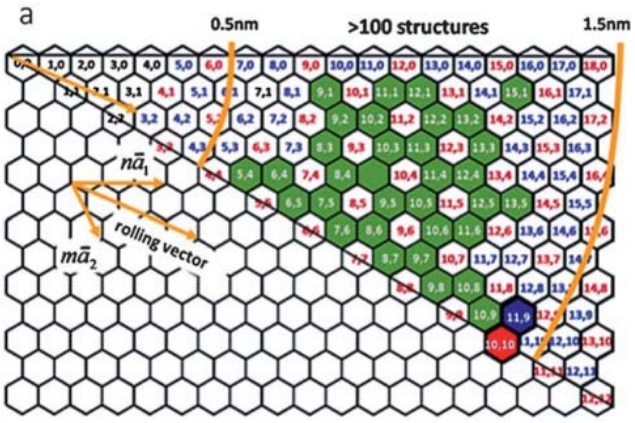


Рисунок 1. Индексы хиральности (n, m), определяющие хиральный вектор, $\vec{a}_1$ и $\vec{a}_2$ – единичные векторы решетки графена.

ДСУНТ обладают как металлическими, так и полупроводниковыми свойствами и могут иметь одну из четырех возможных электронных конфигураций, каждая из которых может быть полупроводниковой (S) или металлической (M): S и S, M и S, M и M, S и M (внутренняя и внешняя трубки). С точки зрения симметрии решетки внутренняя трубка и внешняя стенка могут быть как соизмеримыми, так и несоизмеримыми. ДСУНТ является соизмеримой, если отношение между длинами элементарных ячеек внутренней и внешней трубок является рациональным числом, и несоизмеримой, если это отношение иррацио-нально [10].

Также проводятся исследования процессов адсорбции и десорбции атомов и молекул как однослойными, так и многослойными УНТ. Контролирование этих процессов [11] и определение их параметров и характеристик являются одними из актуальных задач нанотехнологии [12].

Адсорбированные атомы вызывают изменение электронной структуры УНТ, что приводит к изменению их электронных свойств [13, 14]. Различают два типа процессов адсорбции – физическая адсорбция (силы Ван-Дер-Ваальса и электростатическая поляризация определяют природу взаимодействия) и хемосорбция (электростатические силы Кулона и др.) [15].

В настоящей работе рассматриваются результаты моделирования взаимодействия ДСУНТ с различными хиральностями и атомов азота (процессы адсорбции, инкапсуляции).

II. Описание объекта и методов исследования

В работах [16-17] приведены результаты исследования процессов взаимодействия ДСУНТ с атомами азота как экспериментальными, так и методами численного моделирования.

Для проведения модельных экспериментов по рассеянию атомов азота поверхностью углеродной нанотрубки использован программный пакет LAMMPS с потенциалом ReaxFF, который широко используется для моделирования подобных атомно-молекулярных систем.

Рассмотрены два типа ДСУНТ – в виде «кресла» с хиральностью (5.5) и (10.10) и «зигзага» с хиральностью (8.0) и (17.0). Внутренний и внешний диаметры для ДСУНТ (5.5) и (10.10) составляют 0.678 нм и 1.357 нм, для (8.0) и (17.0) соответственно 0.627 нм и 1.332 нм (рис. 2). Геометрические модели ДСУНТ получены из формул для графенового листа соответствующего размера с длиной связи 0.141 нм [18].

Для моделирования исследуемых процессов был применен метод реактивной молекулярной динамики, для описания взаимодействия атомов азота (N) с ДСУНТ был выбран потенциал ReaxFF [19]. Рассмотрены процессы адсорбции и инкапсуляции атомов азота на ДСУНТ (рис. 3).

Продолжительность исследуемых процессов составила 100 пс с временным шагом 0.5 фс.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2023 г.

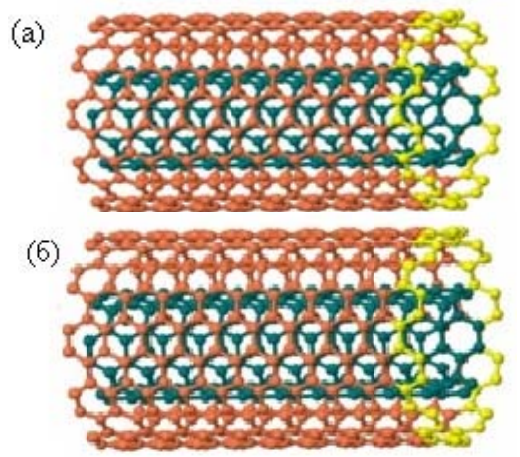
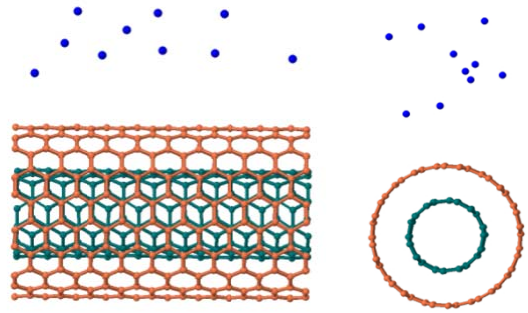


Рисунок 2. Модели двухслойных нанотрубок: (а) – (5.5) и (10.10), «кресло»; (б) – (8.0) и (17.0), «зигзаг».



а) б)

Рисунок 3. Геометрическая модель двуслойной углеродной нанотрубки, используемая в настоящей работе: а – вид сбоку, б – вид с торца ДСУНТ (5.5) и (10.10), с рассеиваемыми атомами азота на ней.

III. Описание и анализ результатов

Результаты взаимодействия атомов азота с поверхностью ДСУНТ зависят как от энергии атомов азота, так и от точки рассеяния. Процессы адсорбции и инкапсуляции различных атомов на УНТ изучали в [19]. Начиная с энергий атомов азота 0.95–1 эВ, наблюдается процесс адсорбции атомов азота поверхностью внешнего слоя ДСУНТ. Процессы адсорбции являются преобладающими до энергии 14.2 эВ для хиральности (5.5) и (10.10) и 15 эВ для (8.0) и (17.0) (рис. 4).

Энергия адсорбции линейно связана с концентрацией атомов азота и изменяется в пределах от 3.32 до 19.78 эВ в процессе адсорбции [20]. В процессе адсорбции длина связи N-C составляла в среднем 0.122–0.178 нм при (5.5) и (10.10), 0.124–0.145 нм при (8.0) и (17.0). В литературе длина связи N-C между атомом азота и атомом углерода в среднем составляет 0.129 нм.

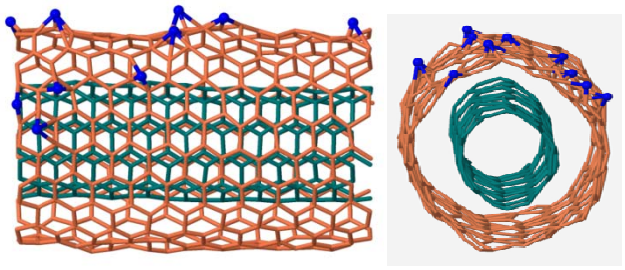
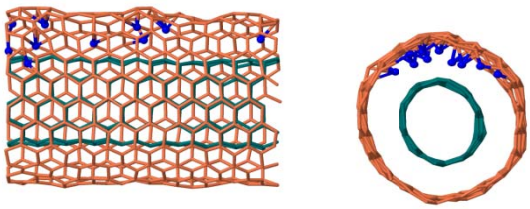


Рисунок 4. Адсорбция атомов азота поверхностью двухслойной углеродной нанотрубки (5.5) и (10.10).

В двух разных хиральных (5.5) и (10.10), (8.0) и (17.0) ДСУНТ процесс инкапсуляции наблюдается при энергиях атомов азота от 16 до 18 эВ (рис. 5). Длина связи N-C в среднем составляла 0.145–0.176 нм при (5.5) и (10.10), 0.144–0.172 нм при (8.0) и (17.0).



а) б)

Рисунок 5. Процесс инкапсуляции атомов азота в ДСУНТ (5.5) и (10.10): а – вид сбоку, б – вид с торца атомы азота инкапсулированы между УНТ.

На рис. 6 приведены зависимости числа адсорбированных атомов от их энергии взаимодействия. Как видно из графика, максимум адсорбции находится в интервале энергий 6–12 эВ.

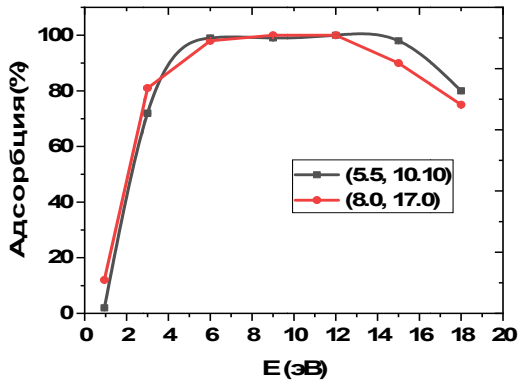


Рисунок 6. Зависимости числа адсорбированных атомов от их энергии взаимодействия.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2023 г.

IV. Заключение

Методами молекулярной динамики проведены модельные эксперименты по взаимодействию атомов азота с поверхностью углеродной нанотрубки (потенциал ReaxFF, температура 300 К). Показано, что характер происходящих процессов зависит от энергии атомов азота: процесс адсорбции преобладает в диапазоне энергий атомов азота 0.94–15 эВ, а процесс инкапсуляции в диапазоне 16–18 эВ. Установлены длины связей инкапсулированных и адсорбированных ДСУНТ атомов азота. Хиральность не влияет ощутимо на длину связи атомов азота с ДСУНТ.

Метаданные

Adsorption of nitrogen atoms on the surface of carbon nanotubes

Sh.A. Muminova[1], Ф.Ф. Умаров[2], D.V. Alyabev[1], I.D. Yadgarov[1]

[1]Institute of Ion-Plasma and Laser Technologie, Uzbekistan Academy of Sciences, 100125, Tashkent, Uzbekistan
[2]Kazakh-British Technical University, Tole Bi str. 59, Almaty, Kazakhstan

Model experiments on the scattering of nitrogen atoms by the surface of a carbon nanotube were carried out using molecular dynamics methods (ReaxFF, LAMMPS). In this work, two-layer carbon nanotubes with chirality (5.5) and (10.10) with a diameter of 0.678–1.357 nm and chirality (8.0) and (17.0) with a diameter of 0.627–1.332 nm and a length of 2.229 nm have been constructed. It is shown that the adsorption process prevails in the energy range of nitrogen atoms 0.94–15 eV, while the encapsulation process prevails in the range 16–18 eV. It has been established that the nature of the occurring processes depends both on the energy of the interacting nitrogen atoms.

Keywords: adsorption, modeling, carbon nanotube, nanotube diameter, chirality, nanotube length.

Литература (References)

[1] S. Iijima, T. Ichihashi. Nature **363**, 603-605 (1993). http://dx.doi.org/10.1038/363603a0
[2] A. Loiseau, P. Launois, P. Petit, S. Roche, and J.-P. Salvetat. Understanding Carbon Nanotubes: From Basics to Applications (Springer, Berlin, 2006)
[3] A. Tchernatinsky, B. Nagabhinrava, S. Desai, G. Sumanasekera, B. Alphenaar, C.S. Jayanthi, and S.Y. Wu. arXiv:cond-mat/0502012.
[4] Deepmala Gupta, Bhasker P. Choudhary, Nakshatra B. Singh and N. S. Gajbhiye. Emerging Materials Research **2**, EMR6, 299-337 (2013).
[5] Nick F.W. Thissen, N.F.W Thissen, M.A. Verheijen, R.G. Houben, C. Van der Marel, W.M.M. Kessels, A.A. Bol. Carbon **121**, 389-398 (2017)
[6] Cai Shen, Alexandra H. Brozena and Yu Huang Wang. Nanoscale (2011). DOI: 10.1039/c0nr00620c..
[7] V. Zólyomi, J. Koltai, Á. Rusznyák, J. Kürti, Á. Gali, F. Simon, H. Kuzmany, Á. Szabados, and P.R. Surján. Physical Review B **77**, 245403 (2008).
[8] H. Cui, G. Eres, J.Y. Howe, A. Puretkzy, M. Varela, D.B. Geohegan, D.H. Lowndes. Chemical Physics Letters **374**, 222-228 (2003).
[9] Y.J. Li, K.L. Wang, J.Q. Wei, Z.Y. Gu, Z.C. Wang, J.B. Luo and D.H. Wu. Carbon **43**, 31 (2005).
[10] M. Damnjanovic, I. Milosevic, T. Vukovic and R. Sredanovic. Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys. **60**, 2728 (1999).
[11] S.V. Bulyarskii and A.S. Basaev. J. Experimental and Theoretical Physics **108**, No.4, 688-698 (2009).
[12] M.J. Jung, J.W. Kim, J.S. Im, S.J. Park, Y.S. Lee. J. Ind. Eng. Chem. **15**, 410-414 (2009).
[13] K. Murata and K. Kaneko. J. Phys. Chem. B **105**, 102 (2001).
[14] V. Gayathri and R. Geetha. Adsorption **13**, 53 (2007).
[15] F.F. Vol'kenshteyn. Physical Chemistry of the Surface of Semiconductors (Nauka, Moscow, 1973).
[16] B.J. Alder and T.E. Wainwright. J. Chem. Phys. **27**, 1208 (1957).
[17] J. Kürti, V. Zólyomi, M. Kertesz, and G. Sun. New J. Phys. **5**, 125 (2003).
[18] C. Zou, Y.K. Shin, A.C.T. van Duin, H. Fang, Z.-K. Liu. Acta Mater. **83**, (2015).
[19] U.B. Uljaev, I.D. Yadgarov, D.V. Alyabev, U.B. Khalilov. Uzbek Journal of Physics **23**, No.3, 24-28 (2021).
[20] M. Jamshidi, M. Razmara, B. Nikfar, M. Amiri. Physica E: **103**, 201-207 (2018). doi: 10.1016/j.physe.2018.06.003.

Углерод нанотрубкалари сиртида азот атомларининг адсорбцияси

Ш.А. Муминова[1], Ф.Ф. Умаров[2], Д.В. Алябьев[1], И.Д. Ядгаров[1]

[1]ЎзФА Ион-Плазма ва лазер технологиялари институти, Дўрмон йўли 33, 100125, Тошкент, Ўзбекистон
[2]Казахстан-Британский технический университет, Толе би кўч. 59, Алматы, Казахстан

Азот атомларининг углеродли нанотрубка сиртидан сочилиши бўйича тажрибалар молекуляр динамика усуллари (ReaxFF, LAMMPS) ёрдамида амалга оширилди. Ушбу ишда диаметрлари 0.678–1.357 нм, 0.627–1.332 нм ва узунлиги 2.229 нм, хиралликлари (8.0) ва (17.0) ҳамда (5.5) ва (10.10) бўлган икки қаватли углеродли нанотрубкалардан фойдаланилди. Азот атомларининг 0.94–15 эВ энергия оралиғида адсорбция жараёни, 16–18 эВ оралиғида эса инкапсуляция жараёнлари ҳосил бўлиши кузатилди. Кўриниб турибдики, содир бўладиган жараёнларнинг табиати азот атомларининг энергиясига боғлиқ.

Калит сўзлар: адсорбция, углерод атоми, моделлаштириш, углерод нанотрубкалари, , хираллик, нанотрубка диаметри ва узунлиги.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2023 г.