Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына

Воздействие быстрых атомов на наноструктуры и полимерные композиты

Е.Н. Воронина

01.04.08 – физика плазмы 01.04.16 – физика атомного ядра и элементарных частиц

> Москва декабрь 2011

Содержание диссертационной работы

- Перспективы применения наноматериалов в космической технике
- Основные методы многомасштабного моделирования наноструктур и наноматериалов
- Влияние процессов адсорбции атомов кислорода на наноструктуры из углерода и нитрида бора
- Моделирование процессов образования дефектов в наноструктурах под воздействием быстрых атомов
- Влияние структуры полимерных нанокомпозитов на их стойкость к воздействию частиц космической плазмы

Многомасштабное моделирование

Время, с



Используемые методы и программное обеспечение

- Квантовомеханические методы (ab initio)
 - Метод теории функционала плотности (DFT) Accelrys Materias Studio, Atomistix ToolKit
- Полуэмпирические методы
 - Метод теории функционала плотности в схеме сильной связи (DFTB) Accelrys Materias Studio
 - Полуэмпирические методы на основе метода Хартри-Фока
- Метод молекулярной динамики Accelrys Materias Studio
- Мезомасштабные методы
 - Метод диссипативной динамики частиц (DPD) Accelrys Materias Studio
- Метод Монте-Карло TRIM, GEANT

Метод теории функционала плотности (DFT)

$$E_{\mathrm{HK}}[n] = T_e[n] + V_{ee}[n] + \int d\mathbf{r} V_{\mathrm{ext}} n(\mathbf{r}) + E_{NN}.$$

$$E_{\text{KS}}[n] = T_s[n] + E_{\text{Hartree}}[n] + \int d\mathbf{r} V_{\text{ext}} n(\mathbf{r}) + E_{NN} + E_{\text{XC}}[n].$$

Энергия как функционал от электронной плотности *n*(**r**)

Приближение локальной плотности (LDA) Обобщенное градиентное приближение (GGA)

$$\mathbf{H}_{\mathrm{KS}} \Psi_{i} = \varepsilon_{i} \Psi_{i},$$

$$\mathbf{V}_{\mathrm{KS}} = \mathbf{V}_{\mathrm{ext}} + \mathbf{V}_{\mathrm{Hartree}} + \mathbf{V}_{\mathrm{XC}} = \mathbf{V}_{\mathrm{ext}} + \int d\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{\delta E_{\mathrm{XC}}[n]}{\delta n}.$$

,

уравнения Кона-Шэма

Метод DFT в схеме сильной связи (DFTB)

$$\begin{split} E_{\mathrm{KS}}[n+\delta n] &= E_0[n_0] + E_{\mathrm{rep}}[n_0] + E_{2\mathrm{nd}}[n_0,\delta n], \\ E_{2\mathrm{nd}}[n_0,\delta n] &= \frac{1}{2} \iint \Biggl[\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} + \frac{\delta^2 E_{\mathrm{XC}}}{\delta n' \delta n} \Biggr|_{n_0} \Biggr] \delta n' \delta n d\mathbf{r}' d\mathbf{r}. \qquad \delta n = \sum_{\alpha}^N \delta n_\alpha \\ \left\langle \mu \,|\, \mathbf{H}_0 \,|\, \nu \right\rangle &= \begin{cases} \epsilon_{\mu}^{\mathrm{free}}, \mu = \nu; \\ \left\langle \phi_{\mu} \,|\, \mathbf{T}_{\mathrm{S}} + \mathbf{V}_{\mathrm{KS}}[n_0^{\alpha} + n_0^{\beta}] \big| \phi_{\nu} \right\rangle, \text{при } \mu \in \{\alpha\}, \nu \in \{\beta\}, \alpha \neq \beta; \\ 0, \text{ в остальных случаях.} \end{cases} \end{split}$$









Эфирная и эпоксидная структуры





Графеновые наноленты

Адсорбция атома О на поверхности кресельной УНТ и графена

Взаимодействие атома кислорода с углеродными наноструктурами

Взаимодействие атома кислорода с наноструктурами из нитрида бора

Адсорбция атома О на поверхности кресельной BN-HT и листа *h*-BN





Наноленты из *h*-BN





Коллективные эффекты

Присоединение нескольких атомов О к параллельным связям







1 атом О

3 атома О





Зависимость энергии адсорбции атома О от диаметра УНТ

Относительное удлинение связей при последовательном присоединении трех атомов О





Энергия адсорбции атома О на поверхности кресельных и зигзагообразных УНТ различного диаметра





Unzipping («расстегивание») нанотрубок

Воздействие пар атомов О на УНТ и BN-HT









Пространственное распределение электронной плотности вблизи атомов О





Относительное удлинение С-С и В-N-связей при воздействии нескольких пар атомов О





Зависимость энергии адсорбции пар атомов О от диаметра УНТ





Одиночные вакансии в листах графена и *h*-BN





Расчетное распределение электронной плотности вблизи вакансий и изображения, полученные с помощью электронного микроскопа









Процессы образования и миграции дефектов в наноструктурах

Образование вакансий в УНТ в результате воздействия быстрого атома



Миграция смещенного атома по поверхности УНТ









Потери энергии атомов Н и О



Удельные потери энергии атомов H, C, N, O в тонком слое графита



Оценка потерь энергии атомов О с энергиями до 200 эВ в графене при различных прицельных параметрах

Адсорбция атомов кислорода и других молекулярных соединений вблизи дефектов



Взаимодействие быстрого атома О с листом графена



Диссипативная динамика частиц (DPD)





Моделирование равновесной структуры полимерных нанокомпозитов с УНТ

УНТ (10,10)

УНТ (15,15)

Исследование процесса образования конгломератов из наночастиц в полимерных нанокомпозитах







Процессы торможения быстрых атомов в многослойных полимерных композитах

Однослойная структура







Обратное рассеяние







Двухслойная структура



Удельные потери энергии

Выводы

- Показано, что присоединение атомов к поверхности наноструктур из углерода и нитрида бора вызывает удлинение и смещение межатомных связей, приводящее к общей деформации наноструктур. Впервые получены зависимости изменений структурных параметров нанотрубок и величины энергии адсобрции от их диаметра.
- Для процесса «расстегивания» (*unzipping*) нанотрубок установлено, что с увеличением диаметра УНТ растет пороговое число присоединенных пар атомов, соответствующее началу процесса «расстегивания». Впервые показано, что нанотрубки из нитрида бора более устойчивы к возникновению эффекта расстегивания за счет химического взаимодействия между атомами кислорода, присоединившимся к разорванным связям, которое в случае УНТ отсутствует.
- Показано, что применение метода SCC DFTB значительно повышает точность расчета пороговой энергии для *h*-BN по сравнению со стандартным методом DFTB. Пороговая энергия выбивания атома зависит от величины заряда, переданного ему налетающей частицей.
- Установлено, что равномерное распределение частиц наполнителя достигается в узком диапазоне параметров, характеризующих взаимодействие частиц между собой и с полимером.
- Методом Монте-Карло произведено моделирование процессов торможения атомов водорода и кислорода с энергиями до 100 кэВ в многослойных полимерных нанокомпозитах. Получены количественные данные о влиянии процессов обратного рассеяния частиц на величину энергии, передаваемой системе в каждом слое

Образование дефектов в наноструктурах

