

Исследование структуры тепловых колебаний средствами событийного моделирования

Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е.Жуковского «ХАИ»

Предложен способ уменьшения вычислительных ресурсов при решении задачи адсорбции водорода на поверхности углеродных нанотрубок (УНТ). Приведены формулы для пересчёта скоростей частиц после их взаимодействия. Для учета участия в движении УНТ в целом и участия во вращательном движении УНТ предложено предварительная нормализация скоростей атомов углерода. Проведено исследование колебательных мод атомов углерода в УНТ. Обнаружена зависимость осевой, радиальной и тангенциальной составляющих энергий колебаний для УНТ от такого параметра, как хиральность. Исследовано влияние ширины потенциальной ямы взаимодействия частиц на величины осевой, радиальной и тангенциальной составляющих энергий колебаний атомов углерода в УНТ.

Ключевые слова: событийное моделирование, нанотрубка, адсорбция, колебательные моды, хиральность, потенциальная яма.

1. Постановка задачи

Тепловые колебания атомов в кристаллических системах принципиально отличаются от таковых в одноатомных газах. Это связано со сложной картиной межатомных взаимодействий. Особую сложность представляет изучение колебаний атомов в локально двумерных коллективах связанных атомов, таких как в углеродных нанотрубках (УНТ) и фуллеренах. Информация о распределении колебательных мод существенна для решения задач адсорбции водорода на жгутах из нанотрубок, поскольку эту информацию можно использовать для моделирования скоростей атомов углерода как случайных векторов с заданными законами распределения. В этом случае достигается значительное сокращение необходимых вычислительных ресурсов за счет «замораживания» координат центров отдельных модельных частиц.

2. Основной материал

Для моделирования процесса адсорбции молекул водорода на поверхности УНТ используется событийный алгоритм в применении к методу частиц, подробно представленный в работах [1–3]. Акты взаимодействия частиц в наносистеме, состоящей из молекул водорода и атомов углерода, составляющих нанотрубку, называются событиями. Особенности взаимодействий атомов углерода внутри УНТ описаны в работе [4]. Формулы пересчёта скоростей частиц после событий определяются из законов сохранения энергии, импульса и момента импульса. При упругом отражении скорости \vec{v}'_1, \vec{v}'_2 после столкновения следующие:

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 + \frac{\lambda_0}{m_1} \cdot \frac{\Delta\vec{r}}{|\Delta\vec{r}|}, \quad \vec{v}'_2 = \vec{v}_2 - \frac{\lambda_0}{m_2} \cdot \frac{\Delta\vec{r}}{|\Delta\vec{r}|}. \quad (1)$$

Коэффициент λ_0 определяется из формулы:

$$\lambda_0 = 2M \left(\Delta\vec{v}, \frac{\Delta\vec{r}}{|\Delta\vec{r}|} \right),$$

где $M = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$, $\Delta\vec{v} = \vec{v}_2 - \vec{v}_1$, $\Delta\vec{r} = \vec{x}_2 - \vec{x}_1$.

В формулах пересчета скоростей при наступлении событий, связанных с преодолением границы потенциальной ямы глубины U , должно быть учтено изменение величины потенциальной энергии. Введем в рассмотрение следующую величину:

$$\Delta_{\pm} = \left(\Delta\vec{v}, \frac{\Delta\vec{r}}{|\Delta\vec{r}|} \right)^2 \pm 2 \frac{U}{M}.$$

При внешнем столкновении скорости изменяются согласно формулам:

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 + \frac{\lambda_1}{m_1} \cdot \frac{\Delta\vec{r}}{|\Delta\vec{r}|}, \quad \vec{v}'_2 = \vec{v}_2 - \frac{\lambda_1}{m_2} \cdot \frac{\Delta\vec{r}}{|\Delta\vec{r}|}, \quad (2)$$

где $\lambda_1 = M \cdot \left\{ \left(\Delta\vec{v}, \frac{\Delta\vec{r}}{|\Delta\vec{r}|} \right) + \sqrt{\Delta_{+}} \right\}$.

Рассмотрим реакцию на внутреннее столкновение внешних границ. Если выражение Δ_{+} неотрицательно, то в результате столкновения внешних границ модельные частицы покидают зону притяжения и разлетаются со следующими новыми скоростями:

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 + \frac{\lambda_2}{m_1} \cdot \frac{\Delta\vec{r}}{|\Delta\vec{r}|}, \quad \vec{v}'_2 = \vec{v}_2 - \frac{\lambda_2}{m_2} \cdot \frac{\Delta\vec{r}}{|\Delta\vec{r}|}, \quad (3)$$

где $\lambda_2 = M \left\{ \left(\Delta\vec{v}, \frac{\Delta\vec{r}}{|\Delta\vec{r}|} \right) - \sqrt{\Delta_{+}} \right\}$.

Если же кинетической энергии частиц недостаточно для преодоления потенциального барьера, т.е. $\Delta_{+} < 0$, то происходит обычное упругое отражение.

Рассматривается наносистема, в которой учитывается только два типа взаимодействий: между молекулами водорода; между молекулами водорода и УНТ. Взаимодействия между атомами углерода не учитываются. Предлагается в момент, когда происходит пересчет скоростей после события, связанного с взаимодействием молекулы водорода с атомом углерода, заменить вектор скорости атома углерода на случайный вектор.

Для выбора эффективных распределений случайных векторов скоростей отдельных атомов углерода проведём исследование колебательных мод атомов углерода в УНТ.

Для каждой модельной частицы в процессе событийного моделирования вектор скорости разлагается по трем ортам. Первый из них направлен вдоль оси

нанотрубки, второй имеет направление нормали к поверхности, третий равен их векторному произведению (рис. 1).

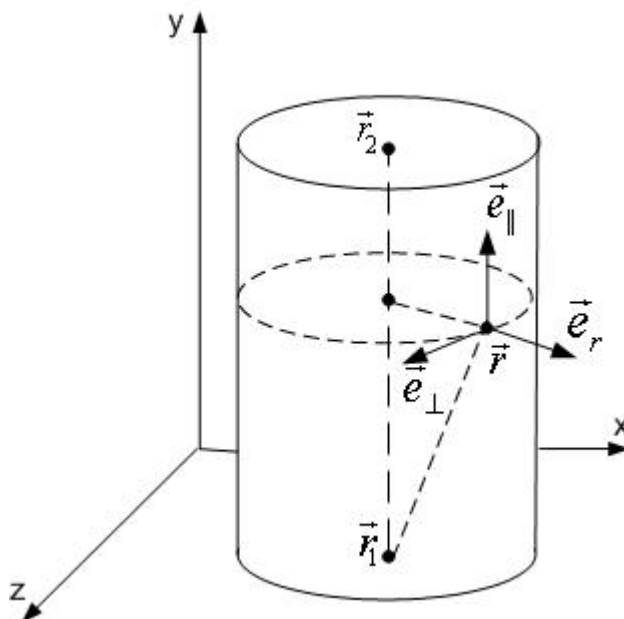


Рис. 1. Разложение вектора скорости атома углерода по трём ортам

Осевой, тангенциальный и радиальный орты вычисляются по следующим формулам:

$$\vec{e}_{//} = \frac{\vec{r}_2 - \vec{r}_1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|}, \vec{e}_{\perp} = \frac{(\vec{r} - \vec{r}_1) \times (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)}{|(\vec{r} - \vec{r}_1) \times (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)|}, \vec{e}_r = \frac{\vec{e}_{//} \times \vec{e}_{\perp}}{|\vec{e}_{//} \times \vec{e}_{\perp}|}. \quad (4)$$

Таким образом, вектор скорости i -го атома углерода в УНТ представляется в виде суммы соответственно осевой, тангенциальной и радиальной составляющих:

$$\vec{v}_i = v_{\perp i} \vec{e}_{\perp i} + v_{//i} \vec{e}_{//i} + v_{ri} \vec{e}_{ri}, \quad (5)$$

где $v_{\perp i} = \vec{v}_i \cdot \vec{e}_{\perp i}$ – тангенциальная составляющая;

$v_{//i} = \vec{v}_i \cdot \vec{e}_{//i}$ – осевая составляющая;

$v_{ri} = \vec{v}_i \cdot \vec{e}_{ri}$ – радиальная составляющая.

Для учета участия в движении УНТ в целом и участия во вращательном движении УНТ предлагается произвести предварительную нормализацию скоростей атомов углерода по следующей формуле:

$$\vec{v}'_i = \sqrt{\frac{W_0}{E_0 - K_0}} \left(\vec{v}_i - \frac{\vec{P}_0}{m} \right), \quad (6)$$

где m – полная масса УНТ;

$W_0 = m \frac{v_{\text{тепловая}}^2}{2}$ – внутренняя энергия;

$V_{\text{тепловая}}$ – тепловая скорость;

$$K_0 = \frac{P_0^2}{2m} \text{ – полная кинетическая энергия движения;}$$

$$E_0 = \sum_{i=1}^n \frac{m_i v_i^2}{2} \text{ – полная энергия;}$$

$$P_0 = \sum_{i=1}^n m_i v_i \text{ – импульс.}$$

После пересчёта скоростей по формулам (6) суммарный импульс оказывается равным нулю, причём суммарная кинетическая энергия принимает значение заданной тепловой энергии.

С помощью метода событийного моделирования исследовались одиночные УНТ из 520 атомов углерода при температуре 80⁰К. Высокая скорость вычислений, отличающая метод событийного моделирования, позволила получить достаточно представительные выборки (порядка десятков миллионов событий) для построения гистограмм и статистической обработки.

Были получены гистограммы распределения тангенциальной, осевой и радиальной составляющей векторов скоростей атомов углерода в УНТ (рис. 2).

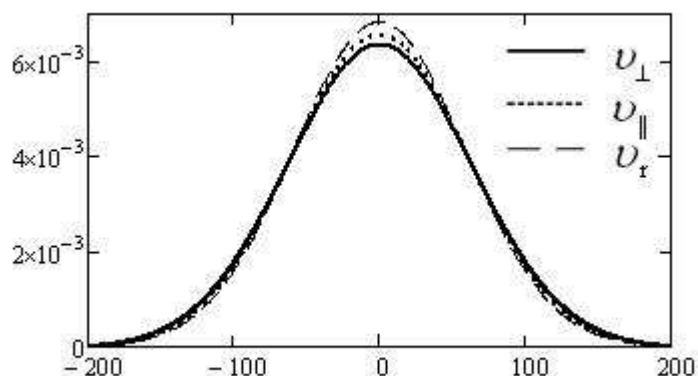


Рис. 2. Гистограммы распределения тангенциальной, осевой и радиальной составляющей векторов скоростей атомов углерода в УНТ с хиральностью (10, 10)

Наибольшую долю в суммарные колебания вносит тангенциальная составляющая энергии (34,7 %). Осевая составляющая энергии вносит 34,3 %, а наименьшую долю вносит радиальная составляющая (31 %).

Если в наносистему добавить молекулы водорода, то процесс адсорбции на поверхности УНТ не влияет на распределение тангенциальной, осевой и радиальной составляющей векторов скоростей атомов углерода.

В таблице 1 представлены значения тангенциальной, осевой и радиальной составляющей энергии для атомов УНТ с хиральностью (10, 10) при различных значениях ширины потенциальной ямы для соседних атомов углерода.

Таблица 1

Тангенциальная, осевая и радиальная составляющая энергии атомов углерода в УНТ при различных значениях ширины потенциальной ямы взаимодействия соседних атомов углерода

$d, \text{Å}$	0,03	0,04	0,05	0,06
$E_{\tau}, \text{Дж}$	$3,901 \cdot 10^{-23}$	$3,914 \cdot 10^{-23}$	$3,918 \cdot 10^{-23}$	$3,928 \cdot 10^{-23}$
$E_{\parallel}, \text{Дж}$	$3,831 \cdot 10^{-23}$	$3,844 \cdot 10^{-23}$	$3,847 \cdot 10^{-23}$	$3,875 \cdot 10^{-23}$
$E_r, \text{Дж}$	$3,564 \cdot 10^{-23}$	$3,54 \cdot 10^{-23}$	$3,532 \cdot 10^{-23}$	$3,494 \cdot 10^{-23}$

При увеличении ширины потенциальной ямы d , значения тангенциальной E_{τ} и осевой E_{\parallel} составляющей энергии увеличиваются, а радиальной E_r – уменьшается.

Обнаружена зависимость гистограмм от такого параметра, как хиральность. Согласно вычислениям, полученным с помощью метода событийного моделирования, соотношения между осевой, радиальной и тангенциальной составляющими энергий колебаний для УНТ с различными хиральностями имеют различия (рис. 3).

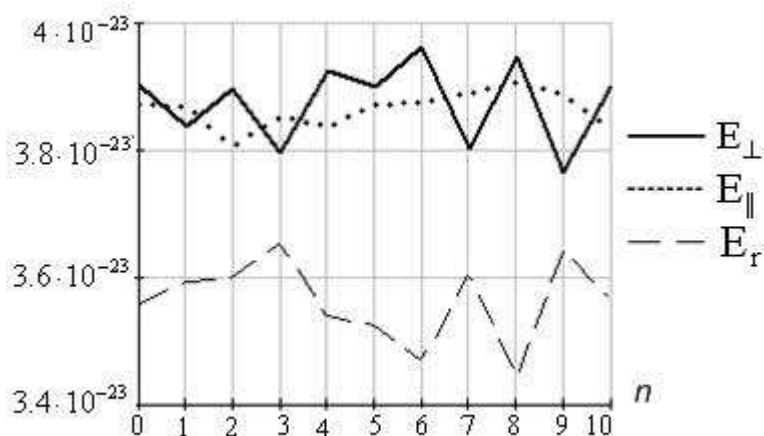


Рис. 3. График зависимости осевой, радиальной и тангенциальной составляющих энергий колебаний для УНТ (10, n) от хиральности

3. Выводы

Использование параметров вероятностных распределений составляющих случайных векторов скоростей атомов углерода в УНТ позволяет упростить процесс обработки актов адсорбции молекул водорода на поверхности УНТ в том случае, когда положения центров модельных частиц остаются неизменными. Это значительно сокращает время расчётов с помощью ЭВМ и тем самым позволяет рассчитывать на получение обоснованных оценок накопления водорода на пучках нанотрубок.

Список литературы

1. Чернышев Ю.К. Событийное программирование. Применение к решению некоторых задач физики / Ю.К. Чернышев. – Х.: ХАИ, 2008. – 68 с.
2. Чернышев Ю.К. Решение задач имитационного моделирования поведения большого количества модельных частиц / Ю.К. Чернышев. – Х.: ХАИ, 2006. – 58 с.
3. Слепичева М.А. Использование прямоугольного потенциала при имитационном моделировании фазовых переходов в простых кристаллах / М.А. Слепичева // Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии. – Харків, ХАІ. – 2008. – Вып. 38. – С. 211 – 216.
4. Слепичева М.А. Построение углеродсодержащих структур с помощью средств событийного моделирования / М.А. Слепичева, Ю.К. Чернышев // Матеріали НТК «Інтегровані комп'ютерні технології в машинобудуванні», Х.: ХАІ. – 2009. – С. 122.

Рецензент: д.т.н., проф., зав. каф. Соколов А.Ю., Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Харьков

Поступила в редакцию 06.05.10

Дослідження структури теплових коливань засобами подієвого моделювання

Запропоновано спосіб зменшення обчислювальних ресурсів при роз'язанні задачі адсорбції водню на поверхні вуглецевих нанотрубок (ВНТ). Наведено формули для перерахунку швидкостей частинок після їх взаємодії. Для участі в русі ВНТ в цілому та участі в обертальному русі ВНТ запропоновано попередню нормалізацію швидкостей атомів вуглецю. Проведено дослідження коливальних мод атомів вуглецю у ВНТ. Виявлено залежність осьової, радіальної та тангенціальної складових енергій коливань для ВНТ від такого параметра, як хіральність. Досліджено вплив ширини потенційної ями взаємодії частинок на величини осьової, радіальної та тангенціальної складових енергій коливань атомів вуглецю у ВНТ.

Ключові слова: подієве моделювання, нанотрубка, адсорбція, коливальні моди, хіральність, потенційна яма.

Research of structure of thermal vibration by the method of event-driven simulation

A method for reducing the computational resources to solve the problem of hydrogen adsorption on the surface of carbon nanotubes (CNT) is offered. The formulas for converting the velocity of the particles after their interaction are resulted. To account for the participation in the movement of CNTs in general and the participation in the rotational motion of CNTs is proposed preliminary normalization of the velocity of carbon atoms. Research of the vibrational modes of carbon atoms in carbon nanotubes is conducted. Found out dependence of axial, radial and tangential component of the energy fluctuations of CNTs from such parameter, as chirality. Research of the influence of the width of the potential well interaction of particles on the magnitude of axial, radial and tangential component of the energy vibration of carbon atoms in carbon nanotubes is conducted.

Keywords: event simulation, nanotubes, adsorption, vibrational modes, chirality, the potential well.