ACADEMIC RESEARCH IN EDUCATIONAL SCIENCES VOLUME 2 | ISSUE 5 | 2021
ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
DOI: 10.24411/2181-1385-2021-01013

УГЛЕРОД НАНОТРУБКАСИДА ОЛТИН КЛАСТЕРИ ВА УГЛЕВОДОРОДЛИ МОЛЕКУЛАЛАРНИНГ ЎЗАРО ТАЪСИРИНИ МОДЕЛЛАШТИРИШ

Ў. Б. Ўлжаев
ЎЗР.ФА Ион-плазма ва лазер технологиялари илмий текшириш институти.
uub1988@mail.ru

Ш. Х. Бердиев
Тошкент вилояти Чирчик давлат педагогика институти
shokir.berdiyev88@gmail.com

АННОТАЦИЯ

Ушбу ишда углеродли нанотрубкасида олтин нанокластерининг углеводородлар билан ўзаро таъсирини молекуляр динамика усулида моделлаштириш жараёни ўрганилган.
Калит сўзлар: олтин, нанокластер, нанотрубка, углеводород.

MODELING OF GOLDEN CLUSTER AND HYDROCARBON MOLECULES IN CARBON NANOTRUBE

ABSTRACT

In this paper, the process of modeling the interaction of gold nanoclusters with hydrocarbons in a carbon nonotube is studied by the method of molecular dynamics.
Keywords: gold, nanocluster, nanotube, hydrocarbon

КИРИШ

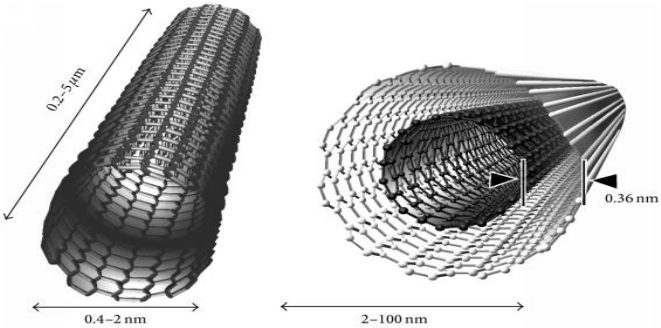
Ҳозирги кунда жаҳонда янги углерод наноструктуралари олиниш усулларини ўрганиш ва улар ёрдамида янги энергия манбалари, жумладан кайта тикланувчи энергия манбаларини яратиш мақсадида кенг миқиёсда тадқиқотлар олиб борилмокда. Хусусан, углерод нанонайчасида нанокластерлар ва углеводородли молекулаларнинг ўзаро таъсирини ўрганиш янги энергия манбаларини синтези учун жуда самарали бўлаяпти. Турли хил ўлчамдаги углерод наноструктуралари ушбу усулдан фойдаланиб муваффақиятли синтез қилинаётган бўлсада, катализаторнинг синергетик ролини тушуниш ҳали ҳам турли қийинчиликлар келтириб чиқармокда.

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
DOI: 10.24411/2181-1385-2021-01013

АДАБИЁТЛАР ТАҲЛИЛИ ВА МЕТОДОЛОГИЯ

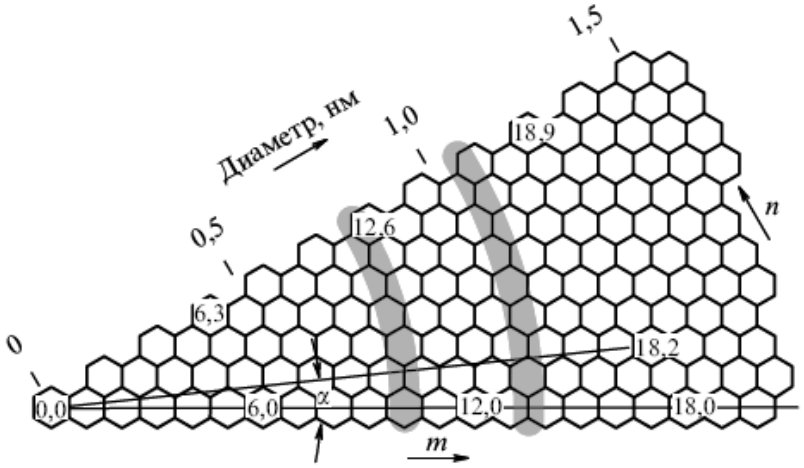
Шунинг учун биз бу муаммони қисман бартараф этиш мақсадида углеродли нанотрубка билан олтин нанокластерини ва углеводород молекулаларининг ўзаро богланишларини молекуляр динамика усулида моделлаштириш масаласини кўриб чиқдик.

Углеродли нанотрубка углероднинг аллотропик модификацияси бўлиб, у диаметри ўндан ўнлаб нанометргача ва узунлиги бир микрометрдан бир неча сантиметргача бўлган бўш цилиндрсимон структурадир [1],[2].



1-расм. Углерод нанотрубкалари

Нанотрубкаларни ҳосил қилишда уларни чираллиги (chiral) жуда мухим, яъни уларнинг ўралиши. Ҳар қандай бир деворли углерод нанотубкаси чираллик (chiral) индекслари деб аталадиган бир жуфт рақам (n, m) билан берилган графен сирти (углерод атомлари билан мунтазам олти бурчакли панжара) намуна сифатида ифодаланиши мумкин. Чираллик индекслари (n, m) - трубка ўқининг графен текислигига ва унинг диаметрига нисбатан йўналишини аниқловчи графен текислигида аниқланган қийшиқ координата системасида радиус вектор r нинг координаталари.



2-расм. Нанотрубканинг чираллиги бўйича ўралиши

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
DOI: 10.24411/2181-1385-2021-01013

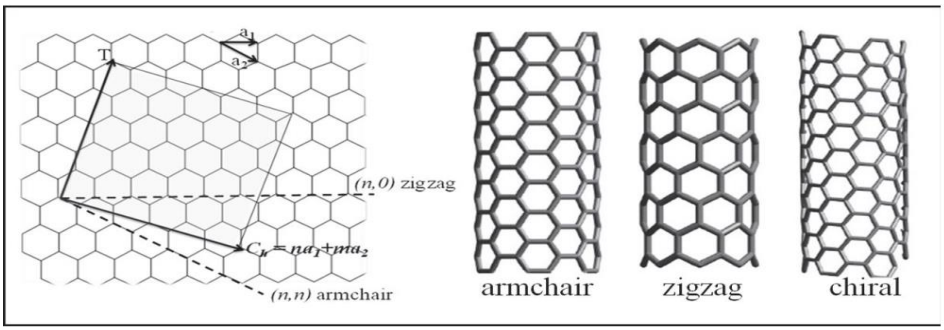
Нанотўлқин диаметри айланаси r вектор узунлигига тенг бўлган цилиндр диаметри ҳисобланади ва чираллик кўрсаткичлари (n, m) сифатида ифодаланади:

$$D = \frac{\sqrt{3}d0}{\Pi} * \sqrt{n2 + m2 + nm}$$

d_0 = 0.142 нм — графит текислигида қўшни углерод атомлари орасидаги масофа.

МУҲОКАМА

Чиралувчанликни кўрсатишнинг яна бир усули, нанотўлқиннинг букланиш йўналиши билан қўшни гексагонлар умумий томонга алмашадиган йўналиши орасидаги α бурчакни кўрсатишдир. 0° ≤ α ≤ 30° бўлиши учун энг кичик бурчак танланади. Бироқ, бу ҳолда нанотрубка геометриясини тўлиқ тасвирлаш учун унинг диаметрини белгилаш керак. [3].



3-расм. Нанотрубканинг чираллиги бўйича ҳосил қилиш

Чираллик индекслари (n, m) ва α бурчак орасидаги муносабат қуйидагича ифодаланади:

$$sin\alpha = \frac{m\sqrt{3}}{2\sqrt{n2 + m2 + nm}}$$

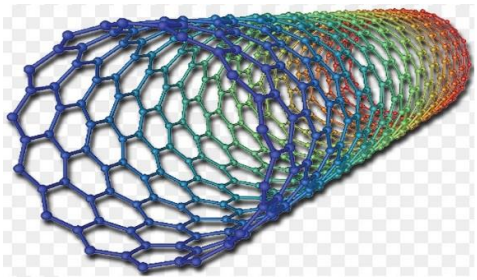
Қатламлар сони бўйича нанотрубкалар бир қатламли ва кўп қатламли кўринишда бўлади[2],[4]. Чираллик индекслари бўйича бир деворли нанотрубкалар 3 турга бўлинади:

n = m - кресло (armchair), α = 30°

m = 0 - зигзаг (zigzag), α = 0°

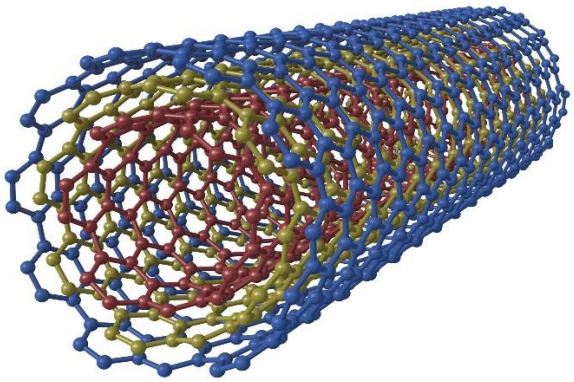
n ≠ m – хирал (chiral)

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
DOI: 10.24411/2181-1385-2021-01013



4-расм. Бир қаватли углеродли нанотрубка

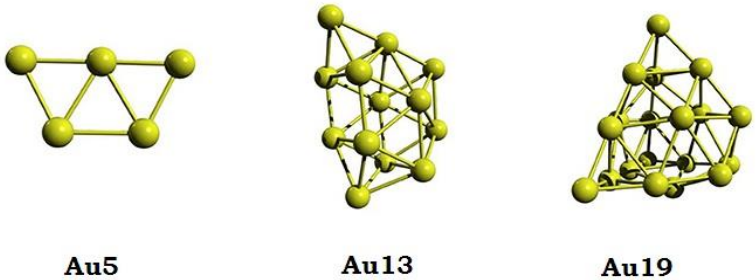
Кўп қаватли углерод нанотрубкалари бир қаватли нанотубкалардан турли хил шакл ва конфигурациялар билан фарқ қилади. Тузилмаларнинг хилма-хиллиги бўйлама ва кўндаланг йўналишларда ҳам намоён бўлади.



5-расм. Кўп қаватли углеродли нанотрубка

Кластер металл аралашмалари билан умумий ифода (mn) ли таснифланади, ичига кичик (m/n< 1), ўрта (m/n ~ 1), катта (m/n > 1) ва улкан (m>> n) кластерлар синфига ажралади. Кичик кластерлар одатда 12 та металл атомлари, ўрта ва йириклари – 150 гача, гигантлари эса - 150 тадан кўп атомлардан иборат бўлиб, уларнинг диаметри 2-10 нм га етади.

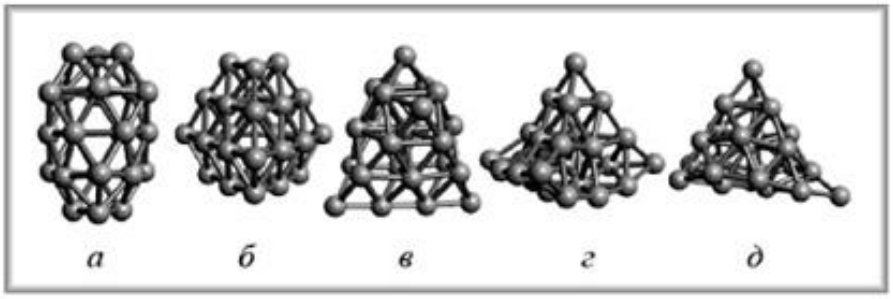
Нанокластерларнинг шакли уларнинг ўлчамига, айниқса, кам сонли атомларга боғлиқ. Биз нанокластер сифатида олтин кластерларидан фойдаландик [5].



6-расм. Олтин нанокластерлари (Au5, Au13 ва Au19 та атом)

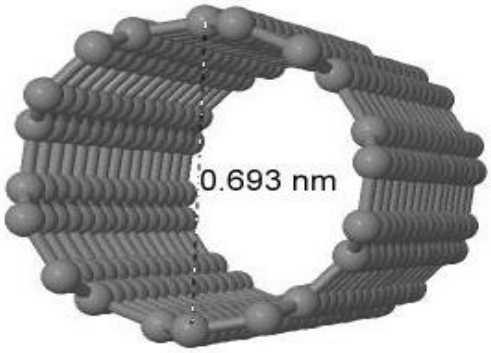
ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
DOI: 10.24411/2181-1385-2021-01013

Назарий ҳисоб-китоблар билан бирга олиб борилган экспериментал тадқиқотлар натижалари шуни кўрсатдики, 13 ва 14 атомли олтин наноклустерлари ясси тузилишга эга бўлиб, 16 атомли ҳолатда – уч ўлчамли структура, 20 – атомли ҳолатда эса оддий олтин структурасига ўхшаш марказли куб ҳужайрани ташкил қилади. Атомлар сонининг янада ортиши билан бу структура сақланиб қолиши керак. Бироқ, бундай эмас, 24 та олтин атомидан ташкил топган заррача газ фазасида ўзгача чўзиқ шаклга эга бўлади.



7-расм. Олтин нанокластери (Au24 та атом)

Нанокластерларнинг икки тури мавжуд: ҳажми 1-5 нм бўлган, 1000 атомгача (нанокластерс ёки нанокристаллар) бўлган структурали зарралар ва диаметри 5 дан 100 нм бўлган нанокластерлар бўлиб, 103-106 та атомдан иборат. Бу тасниф фақат изотроп (сферик) зарралар учун амал қилади.



8-расм. Бир қаватли углерод нанотрубкаси

НАТИЖАЛАР

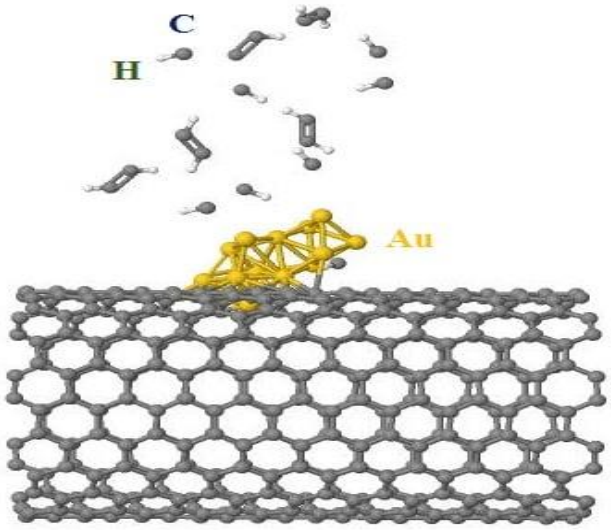
Ушбу ҳодисаларни тушунтириш учун биз бу ерда углерод (CH) ва углеводород (C2H ёки C2H2) турларидан SWNT даги углерод занжирларининг Au катализли нуклеацияси ва ўсишини реактив молекуляр динамика (MD) симуляциялар ҳамда зичлик функционал назарияси (DFT) ҳисоблари ёрдамида ўрганамиз.

Реактив MD симуляцияларида ReaxFF потенциалидан [6] Zou ва бошқалар томонидан ишлаб чиқилган параметрлардан фойдаланамиз.[7]. Эндоэдрал карбин ўстириш учун (5,5) SWNT ни, 3-расмда кўрсатилгандек танланади. Бир

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
DOI: 10.24411/2181-1385-2021-01013

қаватли углерод нанотрубканинг (SWNT) диаметри 0.705 нм. Бу қиймат экспериментал натижалар билан солиштириб олинган бўлиб, экспериментда нанотрубканинг ички диаметри 0.63 нм < d< 0.79 нм оралигида олинган.[8].

Симуляцияланган тизим дастлаб *NpT* ансамблида Берендсен термостатини [9] қўллаб керакли ҳароратда тенглаштирилади. Кейинчалик Бусси термостати [10] каноник *NVT* симуляцияларидаги ҳароратни назорат қилиш учун ишлатилади. Симуляциялар давомида танланган ўсиш турлари, яъни C2, C2H ва C2H2 ички нанотрубкага мос равишда 1 нс ва 2нс оралиғида юқори (600 К) ва паст (300 К) температураларда киритилади.



9-расм. Углерод нанотрубкасида олтин нанокластерининг жойлашуви

ХУЛОСА

Ҳисоб китоблар шуни кўрсатдики (Au13) олтин нанокластери яъни 13 та атомли нанокристали углеродли нанотрубка билан моделлаштиришда муқобил вариант эканлиги аниқланди. Бу ҳисоб китоблар ёрдамида турли хил ўлчамдаги нанотрубкаларда водород сақлаш масаласини кўриб чиқиш мумкин.

REFERENCES

1. Laboratory Grows World Record Length Carbon Nanotube.
2. Перейти обратно:нанотрубка, углеродная.thesaurus.rusnano.com. Дата обращения: 14 ноября 2017.
3. Iijima, S. and Ichihashi, T. (1993) Single-Shell Carbon Nanotubes of 1-nm Diameter. Nature, 363, 603-605. http://dx.doi.org/10.1038/363603a0

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
DOI: 10.24411/2181-1385-2021-01013

4. Noriaki Hamada, Shin-ichi Sawada, Atsushi Oshiyama. New one-dimensional conductors: Graphitic microtubules // Physical Review Letters. -1992-03-09. -T. 68, вып. 10. -С. 1579-1581. - doi:10.1103/PhysRevLett.68.1579.
5. Кластеры золота: синтез и строениеhttps://ozlib.com/802111/ tehnika/ klastery_zolota_sintez_stroenie.
6 A.C.T. van Duin, S. Dasgupta, F. Lorant, W.A. Goddard III, ReaxFF: a reactive force field for hydrocarbons, J. Phys. Chem. A 105 (2001) 9396e9409.
7 C. Zou, Y.K. Shin, A.C.T. van Duin, H. Fang, Z.-K. Liu, Molecular dynamics simulations of the effects of vacancies on nickel self-diffusion, oxygen diffusion and oxidation initiation in nickel, using the ReaxFF reactive force field, Acta Mater. 83 (2015) 102e112.
8 G. Chen, et al., Chemically doped double-walled carbon nanotubes: cylindrical molecular capacitors, Phys. Rev. Lett. 90 (2003) 257403.
9 H.J.C. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F. van Gunsteren, A. Di Nola, J.R. Haak, Molecular dynamics with coupling to an external bath, J. Chem. Phys. 81 (1984) 3684e3690.
10 G. Bussi, D. Donadio, M. Parrinello, Canonical sampling through velocityrescaling, J. Chem. Phys. 126 (2007) 014101.