

Моделирование нанопористого углерода методом закалки (QMD)

Е.С. Яковлев

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Объединенный институт высоких температур РАН

Нанопористый углерод может появляться в различных структурах, расположенных между аморфным и кристаллическим углеродом. Последнее время наибольший интерес представляет применение нанопористого углерода в качестве электродов для суперконденсаторов. Однако структура нанопористого углерода пока недостаточно изучена. Существует несколько методов получения модели структуры нанопористого углерода. В данной работе был использован метод закалки.

Построение хорошей модели позволит понять геометрические свойства нанопористого углерода, получить коэффициент диффузии для жидкостей. Будут изучены свойства системы «нанопористый углерод – ионная жидкость».

В работе обсуждаются статьи, посвященные молекулярному моделированию нанопористого углерода и методу закалки [1], [2]. Метод закалки подразумевает быстрое охлаждение газообразного или жидкого углерода до конечной структуры. В соответствии со статьей [2] были выбраны следующие начальные условия: $T_0 = 1.5 \times 10^4 K$,

$T_k = 0.66 \times 10^4 K$, $r = 2.5 \times 10^{12} \frac{K}{c}$, где T_0 – начальная температура, T_k – конечная

температура, r – скорость закалки. Был использован потенциал взаимодействия ReaxFF. Посчитана радиальная функция распределения. Расчеты производились с помощью программного пакета LAMMPS.

Литература

1. *Palmer Jeremy C., Gubbins Keith E.* Atomistic models for disordered nanoporous carbons using reactive force fields. – *Microporous and Mesoporous Materials.* – 2012 – № 154. – 24–37.
2. *Palmer J.C., Llobet A., Yeon S.-H., Fischer J.E., Shi Y., Gogotsi Y., Gubbins K.E.* Modeling the structural evolution of carbide-derived carbons using quenched molecular dynamics. – *Carbon.* – 2010. – № 48. – 1116–1123