

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ УГЛЕРОДА ПРИ БЫСТРОМ ОХЛАЖДЕНИИ УГЛЕРОДНОГО ГАЗА*

С. А. Губин¹, А. В. Кудинов², И. В. Маклашова³, Ю. А. Богданова⁴

Аннотация: На основе квазиравновесного термодинамического и молекулярно-динамического (МД) моделирования рассчитан процесс образования наночастиц углерода при быстром охлаждении углеродного газа, нагретого до высокой температуры при постоянной плотности, за счет конденсации из газовой фазы в конденсированную наноуглеродную фазу. Для этого в термодинамическом расчете учтена повышенная энтальпия образования для наночастиц углерода. По результатам МД расчета рекомендованы три параметризации реакционно-силовых полей (ReaxFF-CHO, ReaxFF-c2013 и ReaxFF-ПАН) для МД моделирования образования наноуглеродных частиц.

Ключевые слова: молекулярно-динамическое моделирование; термодинамический расчет; наноуглеродные частицы

DOI: 10.30826/CE22150101

Литература

- Howard J. B., McKinnon J. T., Makarovskiy Y., Lafleur A. L., Johnson M. E. Fullerenes C₆₀ and C₇₀ in flames // *Nature*, 1991. Vol. 352. No. 6331. P. 139–141. doi: 10.1038/352139a0.
- Chen X., Deng F., Wang J., Yang H., Wu G., Zhang X., Peng J., Li W. New method of carbon onion growth by radio-frequency plasma-enhanced chemical vapor deposition // *Chem. Phys. Lett.*, 2001. Vol. 336. No. 3–4. P. 201–204. doi: 10.1016/S0009-2614(01)00085-9.
- Niwase K., Homae T., Nakamura K., Kondo K. Generation of giant carbon hollow spheres from C₆₀ fullerene by shock-compression // *Chem. Phys. Lett.*, 2002. Vol. 362. No. 1. P. 47–50. doi: 10.1016/S0009-2614(02)00997-1.
- Kang J., Li J., Du X., Shi C., Zhao N., Nash P. Synthesis of carbon nanotubes and carbon onions by CVD using a Ni/Y catalyst supported on copper // *Mat. Sci. Eng. A — Struct.*, 2008. Vol. 475. No. 1–2. P. 136–140. doi: 10.1016/j.msea.2007.04.027.
- Бгашева Т. В., Вревкишко П. С., Фролов А. М., Шейндлин М. А. Кристаллизация углерода из пара при давлениях до 0,6 ГПа // *Труды Конференции-конкурса молодых физиков*, 2016. Т. 22. № 15. С. 88–90.
- Zheng G., Irle S., Morokuma K. Performance of the DFTB method in comparison to DFT and semiempirical methods for geometries and energies of C₂₀–C₈₆ fullerene isomers // *Chem. Phys. Lett.*, 2005. Vol. 412. No. 1–3. P. 210–216. doi: 10.1016/j.cplett.2005.06.105.
- Qian H.-J., van Duin A. C., Morokuma K., Irle S. 2011. Reactive molecular dynamics simulation of fullerene combustion synthesis: ReaxFF vs DFTB potentials // *J. Chem. Theory Comput.*, 2011. Vol. 7. No. 7. P. 2040–2048. doi: 10.1021/ct200197v.
- Dozhdikov V., Basharin A. Y., Levashov P., Minakov D. Atomistic simulations of the equation of state and hybridization of liquid carbon at a temperature of 6000 K in the pressure range of 1–25 GPa // *J. Chem. Phys.*, 2017. Vol. 147. No. 21. P. 214302. doi: 10.1063/1.4999070.
- Van Duin A. C. T., Dasgupta S., Lorant F., Goddard W. A. ReaxFF: A reactive force field for hydrocarbons // *J. Phys. Chem. A*, 2001. Vol. 105. No. 41. P. 9396–9409. doi: 10.1021/jp004368u.
- Galiullina G., Orekhov N., Stegailov V. Nucleation of carbon nanostructures: Molecular dynamics with reactive potentials // *J. Phys. Conf. Ser.*, 2016. Vol. 774. No. 1. P. 012033. doi: 10.1088/1742-6596/774/1/012033.
- Chenoweth K., van Duin A. C. T., Goddard W. A. ReaxFF reactive force field for molecular dynamics simulations of hydrocarbon oxidation // *J. Phys. Chem. A*, 2008. Vol. 112. No. 5. P. 1040–1053. doi: 10.1021/jp709896w.
- Mueller J. E., van Duin A. C., Goddard W. A., III. Development and validation of ReaxFF reactive force field for hydrocarbon chemistry catalyzed by nickel // *J. Phys. Chem. C*, 2010. Vol. 114. No. 11. P. 4939–4949. doi: 10.1021/jp9035056.
- Ashraf C., van Duin A. C. Extension of the ReaxFF combustion force field toward syngas combustion and initial oxidation kinetics // *J. Phys. Chem. A*, 2017. Vol. 121. No. 5. P. 1051–1068. doi: 10.1021/acs.jpca.6b12429.
- Mao Q., Ren Y., Luo K. H., van Duin A. C. T. Dynamics and kinetics of reversible homo-molecular dimerization of polycyclic aromatic hydrocarbons // *J. Chem. Phys.*, 2017. Vol. 147. P. 244305. doi: 10.1063/1.5000534.

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект государственного задания № 07232020-0036).

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»; Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, gubin_sa@mail.ru

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», swen379@gmail.com

³Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», ivmaklashova@mephi.ru

⁴Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», bogdanova.youlia@bk.ru

15. *Victorov S. B., El-Rabii H., Gubin S. A., Maklashova I. V., Bogdanova Y. A.* An accurate equation-of-state model for thermodynamic calculations of chemically reactive carbon-containing systems // *J. Energ. Mater.*, 2010. Vol. 28. P. 35–49. doi: 10.1080/07370652.2010.491496.
16. *Viecelli J. A., Bastea S., Glosli J. N., Ree F. H.* Phase transformations of nanometer size carbon particles in shocked hydrocarbons and explosives // *J. Chem. Phys.*, 2001. Vol. 115. No. 6. P. 2730–2737. doi: 10.1063/1.1386418.
17. *Губин С. А., Джелилова Е. И., Маклашова И. В.* Влияние формы и размера наночастиц на фазовую диаграмму углерода // *Горение и взрыв*, 2014. Т. 7. С. 226–229.
18. *Von Helden G., Gotts N. G., Bowers M. T.* Experimental evidence for the formation of fullerenes by collisional heating of carbon rings in the gas phase // *Nature*, 1993. Vol. 363. No. 6424. P. 60–63. doi: 10.1038/363060a0.
19. *Liu L., Liu Y., Zybin S. V., Sun H., and Goddard W. A., III.* ReaxFF-1g: Correction of the ReaxFF reactive force field for London dispersion, with applications to the equations of state for energetic materials // *J. Phys. Chem. A*, 2011. Vol. 115. P. 11016–11022. doi: 10.1021/jp201599t.
20. *Srinivasan S. G., van Duin A. C. T., Ganesh P.* Development of a ReaxFF potential for carbon condensed phases and its application to the thermal fragmentation of a large fullerene // *J. Phys. Chem.*, 2015. Vol. 119. P. 571–580. doi: 10.1021/jp510274e.
21. LAMMPS — a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. <https://www.lammps.org/>.
22. *Ostroumova G., Orekhov N., Stegailov V.* 2019. Reactive molecular-dynamics study of onion-like carbon nanoparticle formation // *Diam. Relat. Mater.*, 2019. Vol. 94. P. 14–20. doi: 10.1016/j.diamond.2019.01.019.
23. *Yasuoka K., Matsumoto M.* Molecular dynamics of homogeneous nucleation in the vapor phase. I. Lennard–Jones fluid // *J. Chem. Phys.*, 1998. Vol. 109. No. 19. P. 8451–8462. doi: 10.1063/1.477509.
24. *Bundy F. P.* Pressure–temperature phase diagram of elemental carbon // *Physica A*, 1989. Vol. 156. Iss. 1. P. 169–178. doi: 10.1016/0378-4371(89)90115-5.

Поступила в редакцию 24.12.2021