

УДК 549.454; 548.7; 544.034.7

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАСЧЕТ ИОННОЙ
ПРОВОДИМОСТИ И СТРУКТУРЫ ФТОРИДА СВИНЦА (II)
В ОДНОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ МЕТОДОМ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

© *А. К. Иванов-Шуц, И. В. Мурин, А. В. Петров, Г. А. Романцов, 2013*

Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия, alexey.k.ivanov@gmail.com

Методом молекулярной динамики моделировались углеродные одностенные нанотрубки, заполненные фторидом свинца (II). Расчеты проводились для трубок: (9,7); (9,8); (9,9); (10,7); (10,8); (10,9); (10,10); (11,7); (11,8); (11,9); (11,10); (11,11). Длина трубок составляла 200 Å. Заряды на атомах свинца и фтора брались из квантово-химических расчетов и составляли +1.88 и -0.94 соответственно. В остальном взаимодействия между атомами описывались модельными потенциалами, построенными на основе модели силового поля Universal Force Field.

Нанотрубка заполнялась атомами свинца и фтора в стехиометрическом соотношении и нагревалась до температур, близких к температуре плавления объемного кристалла.

Было установлено, что с увеличением диаметра нанотрубки подвижность атомов фтора и свинца возрастает, но у атомов фтора подвижность (величина коэффициента диффузии) в несколько раз выше, что согласуется с экспериментальными данными по подвижности в объемном кристалле.

Во всех моделированных нанотрубках наблюдались упорядоченные структуры из чередующихся концентрических цилиндров из атомов свинца и фтора. В узких нанотрубках формировались нитчатые структуры из атомов одного типа. При температурах, предшествующих плавлению кристалла, атомы фтора заметно разупорядочены, в то время как подрешетка свинца образует, как правило, достаточно стабильную регулярную нанотубулярную структуру (возможно, с дополнительной внутренней нитью или нитями из атомов Pb).

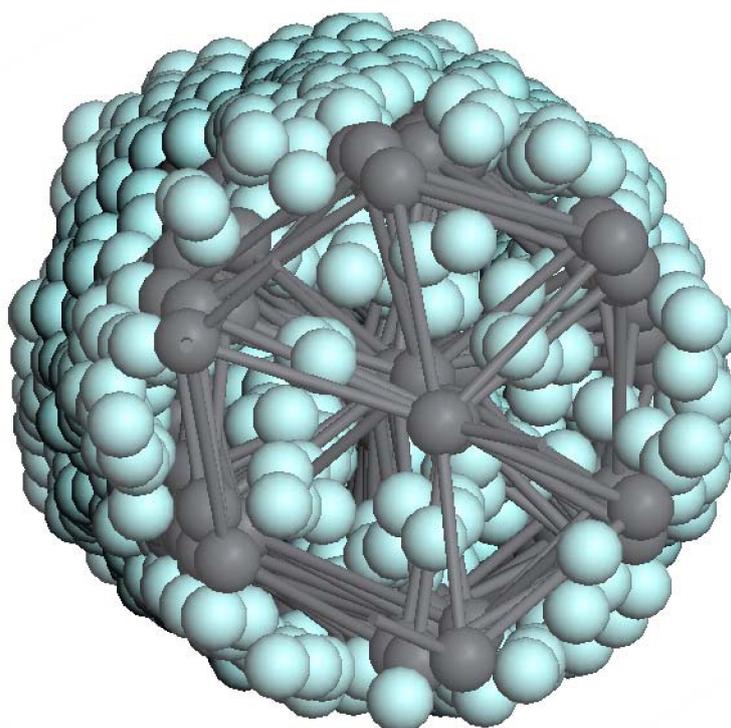


Рис. 1. Структура PbF₂ в одностенной углеродной нанотрубке (10,10) по данным компьютерного моделирования. Серым цветом обозначены атомы свинца, голубым – атомы фтора