

11月20日上机实习安排

使用MS软件Discover/Forcite模块完成碳纳米管的
温度响应特性研究（对比应力的影响）

Report

- 研究意义（国内外研究现状及发展动态分析→提出迫切需要解决的关键科技问题并论述其应用前景→附主要参考文献目录）
- 研究内容、研究目标，以及拟解决的关键科学问题（此部分为重点阐述内容）
- 拟采取的研究方案（计算方法、技术路线、关键技术等说明）及可行性分析
- 研究的特色与创新之处

尽量选择上课内容涉及的nm尺度以内的各种计算方法!!!

1. 碳纳米管的温度响应特性研究

➤ 研究意义：

- ✓ 1991年发现
- ✓ 结构特性：一维管状、极大的长径比
- ✓ 特有的物理、化学性能：探针材料、场发射效应（可掺杂）、电极材料（金属或半导体性质）、储氢材料（比表面积大）
- ✓ 尤其机械性能及其潜在的应用（温敏计，对温度的响应）

研究问题的提炼



温度对结构的影响（管状→两相共存区→塌陷状）

1. 碳纳米管的温度响应特性研究

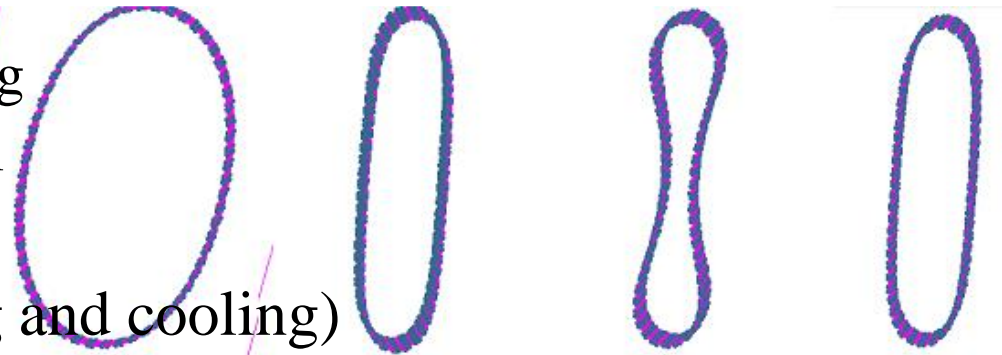
➤ 研究内容：温度对结构的影响（管状→两相共存区→塌陷状）

✓ 不同类型的SWCNTs——手性指数(n, m)：

- $n = m$ armchair
- $n > m = 0$ zigzag
- $n > m \neq 0$ chiral

✓ 管径

✓ 转变温度(heating and cooling)



➤ 研究目标（与研究内容对应）

➤ 拟解决的问题逐条（与研究内容对应）

1. 碳纳米管的温度响应特性研究

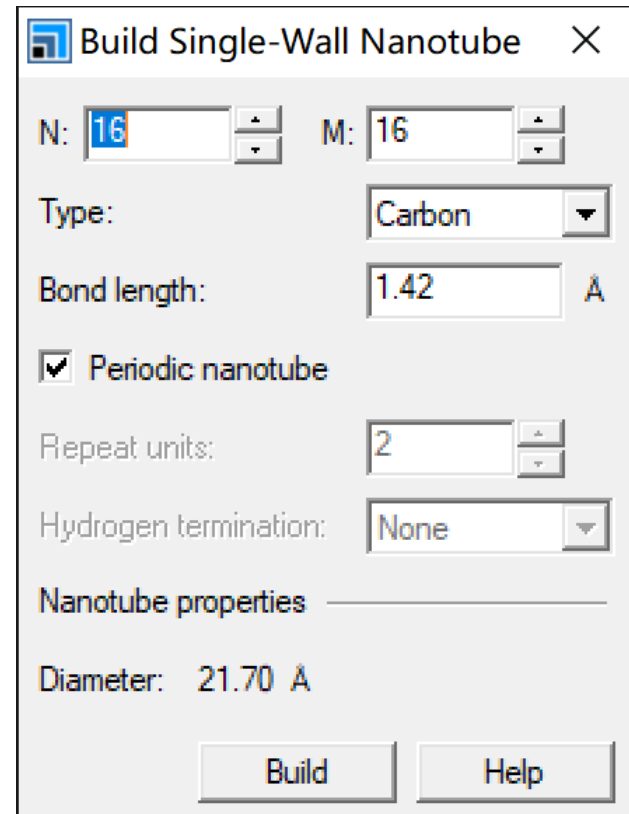
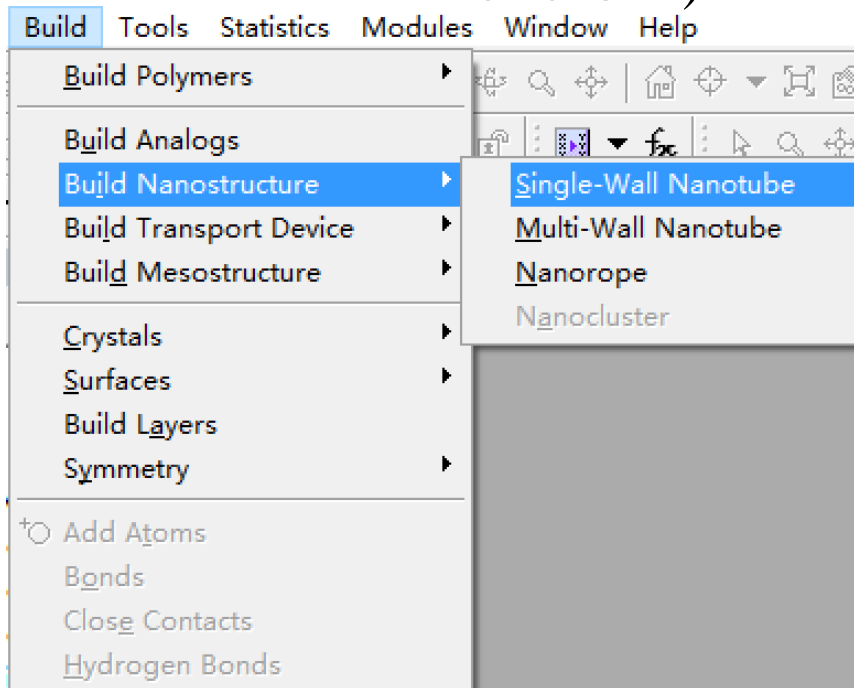
- 拟采取的研究方案（逐条与研究内容对应）
 - ✓ MD simulations (*NVT* ensemble or setting in detail)
- 研究的特色与创新之处（逐条与研究内容对应）

1. 碳纳米管的温度响应特性研究

➤ 以SWCNT(16, 16)为例的MD模拟

✓ Model building

- Supercell ($1 \times 1 \times 6$)
- Rebuild crystal (for a larger cell: $90 \text{ \AA} \times 90 \text{ \AA} \times 14.757073 \text{ \AA}$)



1. 碳纳米管的温度响应特性研究

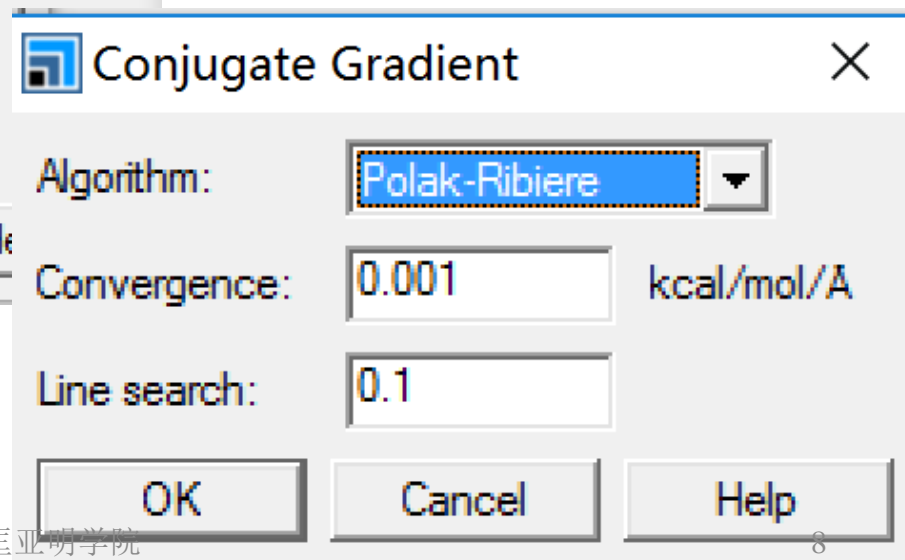
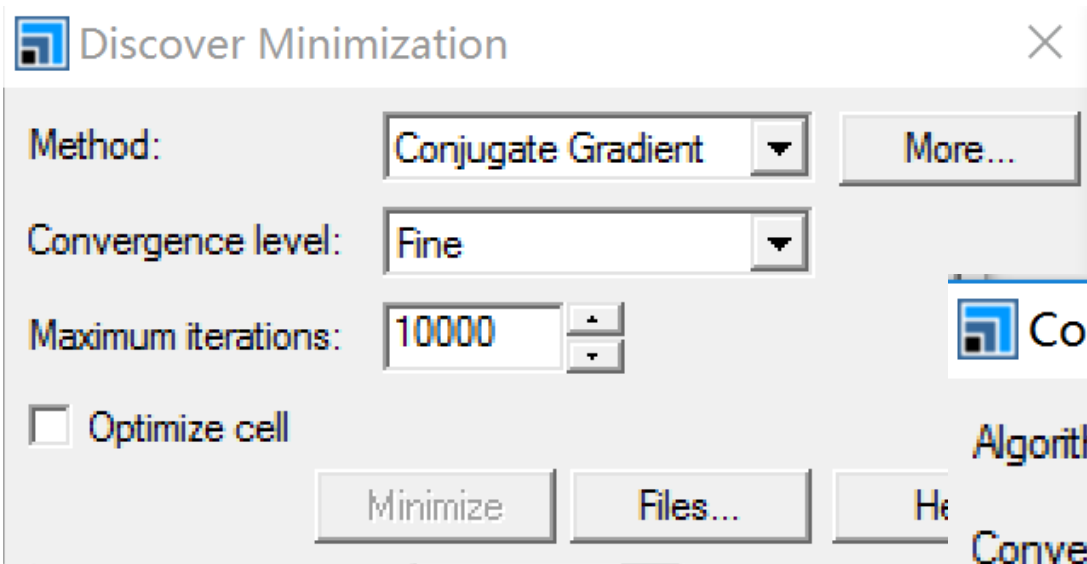
➤ 以SWCNT(16, 16)为例的MD模拟(**Discover** Module)

✓ Setup

- compass27
- Summation method: atom based
- Automation: **No No No**
- Assign FF for C atoms: **c3a**

1. 碳纳米管的温度响应特性研究

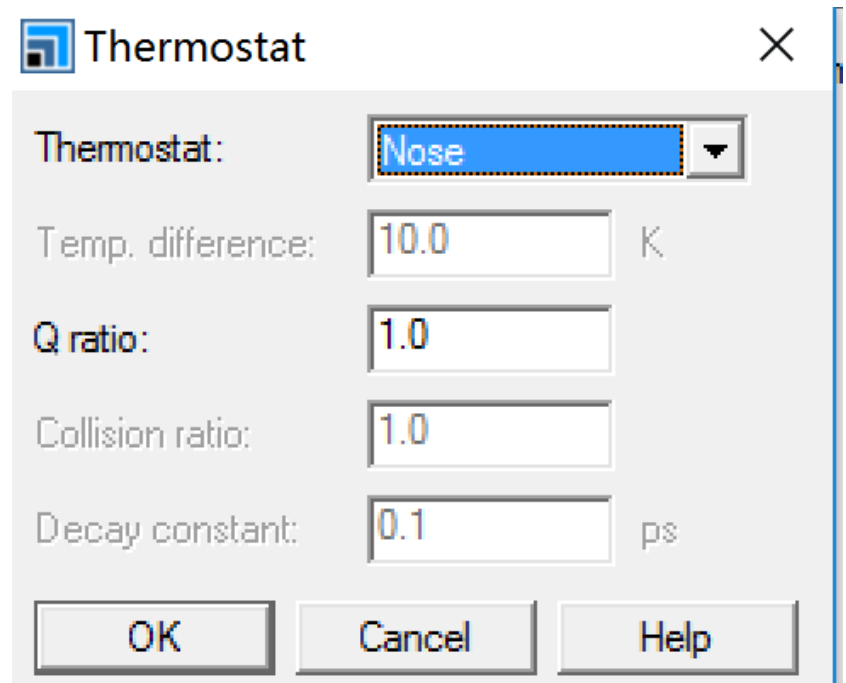
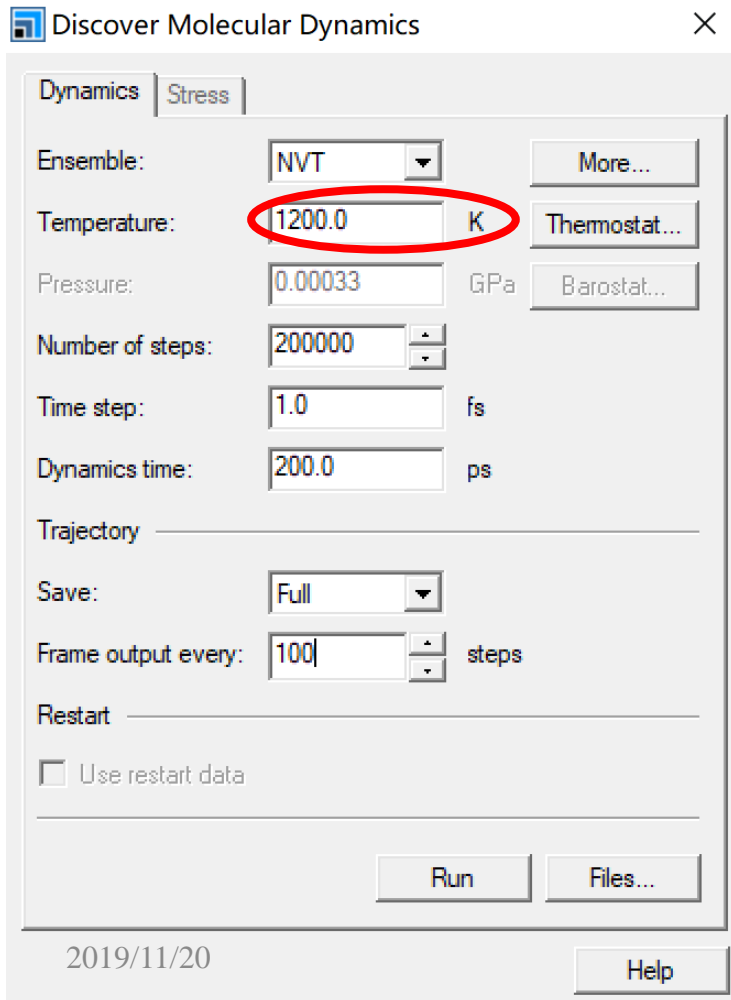
- 以SWCNT(16, 16)为例的MD模拟
- ✓ **Minimization**



1. 碳纳米管的温度响应特性研究

➤ 以SWCNT(16, 16)为例的MD模拟

✓ **Dynamics: 300 K, 600 K, 900 K, and 1200 K**



2. 碳纳米管的应力响应特性研究

- 以SWCNT(16, 16)为例的MD模拟
 - ✓ Use original supercell
 - ✓ Minimization
 - ✓ NPT ensemble: **0.0001 GPa, 0.001 GPa, and 0.01 GPa along x and z directions respectively**

NPT ✕

Energy deviation: kcal/mol

Thermostat ✕

Thermostat:

Temp. difference: K

Q ratio:

Collision ratio:

Decay constant: ps

Discover Molecular Dynamics ✕

Dynamics **Stress**

Ensemble:

Temperature: K

Pressure: GPa

Number of steps:

Time step: fs

Dynamics time: ps

Trajectory _____

Save:

Frame output every: steps

Restart _____

☐ Use restart data

2019/11/20

Discover Molecular Dynamics ✕

Dynamics **Stress**

External stress in GPa

	x:	y:	z:
x:	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>
y:	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>
z:	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="-0.001"/>

Equivalent hydrostatic pressure:

external stress to zero

Barostat ✕

Barostat:

Cell mass: amu

Decay constant: ps

Forcite Module

- Try to use **Forcite** module to realize the **same** MD simulations
 - ✓ Minimization → NVT/NPT Ensemble
 - ✓ Parameter setting

3. Forctie Analysis的使用

- Edit Sets → choose sampling targets
- Use Forcite Analysis to export data