

# 11月27日上机实习安排

1. 使用MS软件Discover模块完成碳纳米管的温度响应特性研究
2. 使用MS软件Forcite模块完成气体CH<sub>4</sub>在聚合物poly(cis-1,4-butadiene) (PBD)中的扩散研究

PPT展示:

管晨光(+10): 反应力场的介绍

# 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）

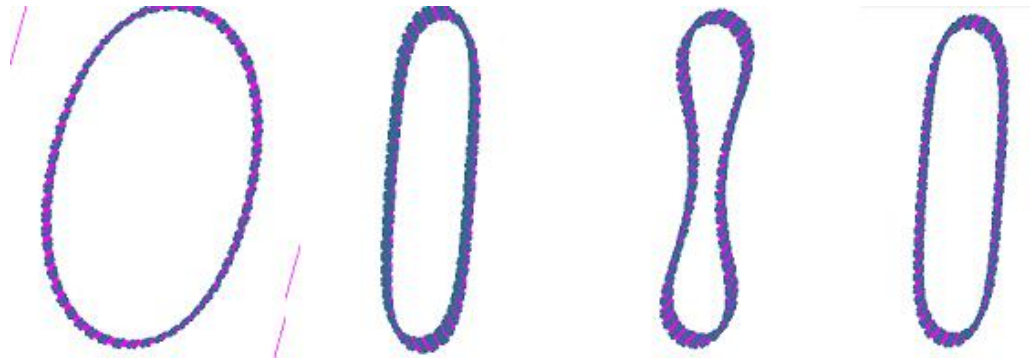
✓不同类型的SWCNTs——手性指数( $n, m$ )：

- $n = m$  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

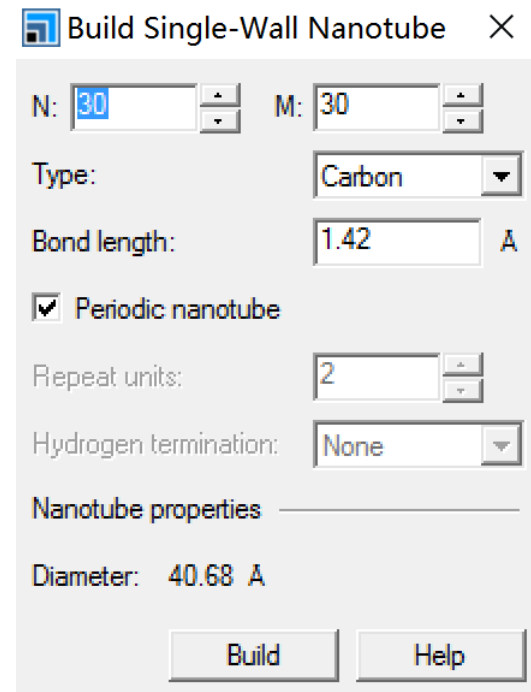
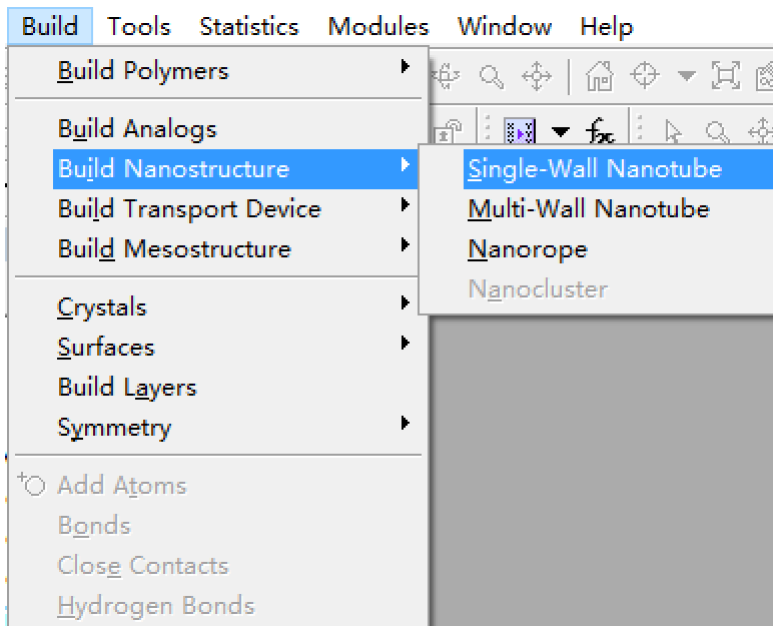
- 拟采取的研究方案（逐条与研究内容对应）
  - ✓ MD simulations (*NVT* ensemble or setting in detail)
- 研究的特色与创新之处（逐条与研究内容对应）

# 1. 碳纳米管的温度响应特性研究

## ➤ 以SWCNT(30, 30)为例的MD模拟

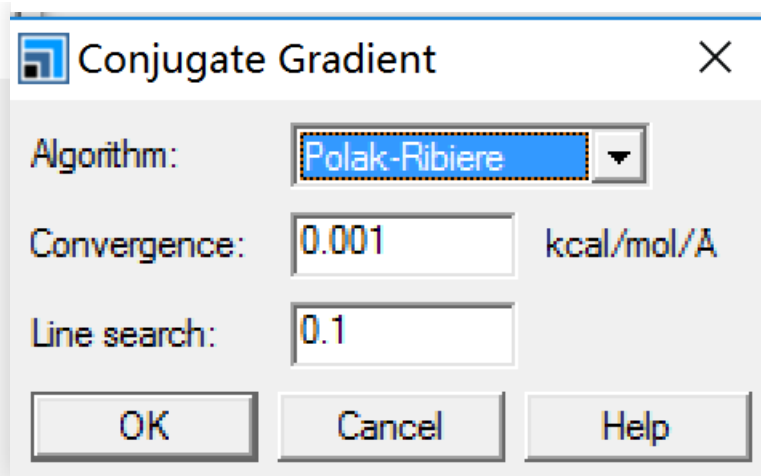
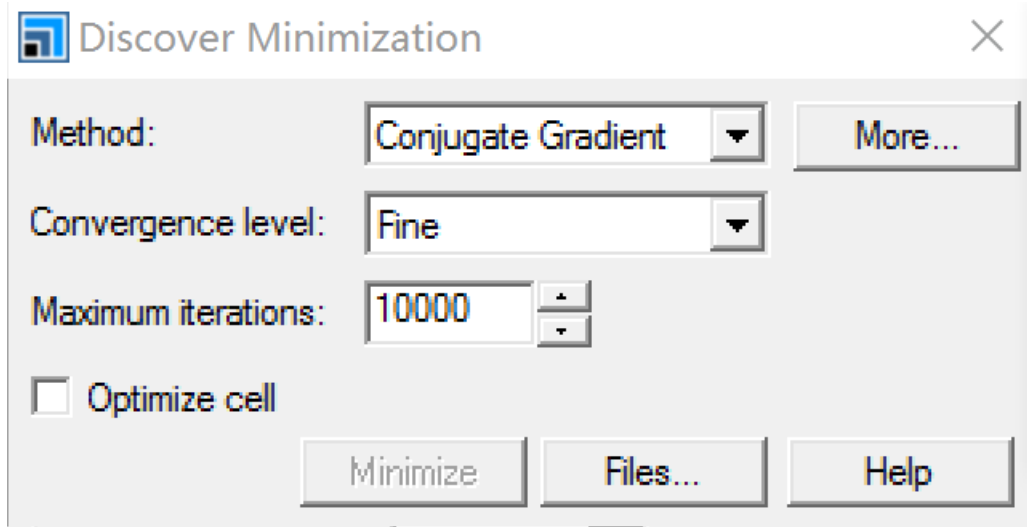
### ✓ Model building

- Put into a larger cell ( $80 \text{ \AA} \times 80 \text{ \AA} \times 2.459512 \text{ \AA}$ )
- Supercell ( $1 \times 1 \times 3$ )



# 1. 碳纳米管的温度响应特性研究

- 以SWCNT(30, 30)为例的MD模拟
- ✓ Minimization



# 1. 碳纳米管的温度响应特性研究

➤ 以SWCNT(30, 30)为例的MD模拟

✓Dynamics

