# 水分子通过形变碳纳米管的运输行为分析

来源：网络 作者：清香如梦 更新时间：2024-01-09

*碳纳米管生长和合成实验中总有一些拉伸或压缩的形变碳纳米管存在，下面是一篇关于水分子通过形变碳纳米管运输行为分析探究的论文范文，供大家阅读借鉴。 水是地球上最常见的物质之一，也是生物体的最重要的组成部分，同时水在生命活动中起到重要的作用，...*

碳纳米管生长和合成实验中总有一些拉伸或压缩的形变碳纳米管存在，下面是一篇关于水分子通过形变碳纳米管运输行为分析探究的论文范文，供大家阅读借鉴。

水是地球上最常见的物质之一，也是生物体的最重要的组成部分，同时水在生命活动中起到重要的作用，在这些活动中涉及到水通道蛋白。由于碳纳米管具有独特的结构和奇特的性质[1],故许多学者[2-4]将其作为水通道的简化模型加以研究。

Hummer等人[5]在202\_年采用分子动力学模拟的方法，发现水分子不仅可以在单壁碳纳米管中运输，而且会加快其运输速度。一部分研究人员发现如果把碳纳米管口作部分扭曲后，能很大地加快水分子通过碳纳米管的速率。202\_年李敬源等人[6]将电荷放置于碳纳米管之外，研究了外加电荷对管内水分子的影响，观察到了电荷对于水分子运输的开关方面非常灵敏。此后，大量的学者[7-9]在这些重大成果启发之下，对水在碳纳米管中动力学性质作了许多研究。如周毅[7]在碳纳米管中水的行为的分子动力学模拟中讲述：在纳米尺度下的受限空间中，水分子所表现的行为与宏观中截然不同。何俊霞等人[8]通过改变形变位置探究纳米通道中的窄结构对水输运产生的开关特性。

由于碳纳米管生长和合成实验中[10],总有一些拉伸或压缩的形变碳纳米管存在，但形变碳纳米管内水分子的运输特性未见到相关报道。故本文运用分子动力学的方法研究碳纳米管拉伸或压缩时其形变程度对其内部水的运输行为影响。即选择手性矢量(7,7)和(8,8)2种碳纳米管，拉伸或压缩量k分别为：0.5,0.6,0.8,1.0,1.2,1.5,1.8倍的碳纳米管进行模拟计算，进而分析形变碳纳米管中水分子的流量、偶极矩概率分布、轴向分布以及径向分布。

1、研究模型与方法

本文采用分子动力学软件NAMD和CHARMM力场文件。研究模型如图1所示，它主要由1个形变的单壁碳纳米管和2个石墨烯层构成，并且2个石墨烯成处于碳纳米管的2个端口处，在石墨烯层外同时添加2个TIP3P水体，其大小为1.5nm1.5nm1.5nm,其中形变碳纳米管由NanotubeModeler软件生成，其原长为6.05nm.

模拟时，设定温度为300K,并采用Berenden方法进行控温，截断半径为1.2nm,利用Particle-Mesh-Ewald的方法计算系统的静电相互作用，网格划分精度设置为0.1nm,当超过1nm时采用过渡函数修正计算，采用周期性边界条件其大小为1.5nm1.5nm9.2nm,模拟步长2fs,模拟时长均为10ns.为解决错误结构的影响本文执行10000步的能量最小化处理，同时为了减少运算量和简化模拟体系，将碳纳米管和石墨烯层进行固定。为使水分子通过碳纳米管，本文沿z轴正方向施加0.5v/nm的电场。所有的计算任务均是在高性能服务器上完成的。

2、结果与分析

2.1水分子通过碳纳米管的流量

水分子通过形变碳纳米管的流量可以发现：当碳纳米管未发生形变时，即k=1时，管径大的流量大，该结论与王俊等人[11]一致;当碳纳米管发生较小的形变时，即k=0.8或1.2时，管径大的水分子流量反而减小，但均大于未发生形变时的流量;当形变程度k1.5时，2种管径的水分子流量几乎为零，这说明(7,7)和(8,8)型碳纳米管被拉伸到1.5倍以上时，几乎没有水分子能通过碳纳米管。分析认为碳纳米管的轴向形变程度对管内水分子的运输有重要的影响作用，同时可以通过改变碳纳米管的形变程度使其起到分子开关的作用。

2.2水分子通过碳纳米管的径向分布

碳纳米管中水分子的径向分布函数如图3所示，其中图3(a)、(b)分别表示(7,7)和(8,8)型碳纳米管中水分子的径向分布图。由图3(a)可以发现不同形变程度下，碳纳米管内水分子的径向分布函数均只出现1个峰值并位于r=0.16nm处，说明水分子在该处出现的概率最大，这表明水分子在管内是以水柱面的形式通过碳纳米管;同时还可以发现，当k越小时其峰越尖锐，这说明水分子仅仅从柱面处通过，当k增加时其水柱内也有水分子通过。由图3(b)同样可以发现径向分布函数仅存在1个位于r=0.23nm处的峰，同样也说明水分子是以水柱面的形式通过碳纳米管。同时可以发现管径大的其水柱面的半径大。

2.3偶极矩概率分布

为了认识水分子通过碳纳米管时其取向分布，图4给出了水分子偶极矩方向与z轴正方向的夹角的概率分布。由图4(a)可以发现对于(7,7)型碳纳米管中水分子的偶极矩方向的概率分布仅出现1个的峰，说明水分子是以较规则的方式通过碳纳米管。同时还可以发现，出现峰的位置与碳纳米管的形变程度k有关，如当k1时，其偶极矩方向的概率分布的峰位置随着k值的减小而减小，这说明当碳纳米管压缩越大时水分子的偶极矩取向越接近z轴正方向;当k1时，其偶极矩方向的概率分布的峰位置随着k值的增加而增加，这说明当碳纳米管拉伸越大时水分子的偶极矩取向越垂直于z轴。由于k为1.5和1.8时碳纳米管中水分子的流量较小，从而采样较小，所以水分子偶极矩方向分布没有出现尖锐的峰值。由图4(b)可知对于(8,8)型碳纳米管，当k1.5时，其水分子偶极矩方向的概率分布均只出现1个峰值，并且峰的位置与碳纳米管的形变程度无关，这说明管径大的其内部水分子的取向与管本身的形变程度无关。同样由于k为1.5和1.8时，管内水分子的流量较小，所以水分子概率分布未出现尖锐的峰值。

3、总结

本文通过分子动力学的方法研究了水分子通过形变碳纳米管的运输行为，即探究碳纳米管在拉伸或压缩时其形变程度k与管内水分子的流量、径向分布函数和偶极矩概率分布的关系。结果表明：碳纳米管的轴向形变程度对管内水分子的运输有重要的影响作用;水分子在管内是以水柱面的形式通过碳纳米管，当k越小时其仅能从水柱的表面通过，并且发现管径大的其水柱面的半径大;对于(7,7)型碳纳米管中水分子的偶极矩方向的概率分布仅出现1个的峰，并且峰的位置与碳纳米管的形变程度k有关;对于(8,8)型碳纳米管其水分子偶极矩方向的概率分布也均只出现1个峰值，但峰的位置与碳纳米管的形变程度无关。分析认为碳纳米管的形变程度对管内水分子的运输有重要的影响作用。本文的研究对认识生命的新陈代谢活动、受限水的行为和纳米运输器件有着重要的参考作用。

参考文献：

[1]王普宝。碳纳米管的相关力学问题研究[D].大连：大连理工大学，202\_.

[2]王禹。水分子在碳纳米管中的分子动力学模拟[D].上海：复旦大学，202\_.

[3]曾明颖。多壁碳纳米管弯曲角度的研究[D].厦门：厦门大学，202\_.

[4]吕小彬。受限于碳纳米管中水的分子动力学模拟[D].太原：中北大学，202\_.

本DOCX文档由 www.zciku.com/中词库网 生成，海量范文文档任你选，，为你的工作锦上添花,祝你一臂之力！