

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА КАНАЛИРОВАНИЯ ЧАСТИЦ В
УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКЕ**
Лысова И.В.¹, Михайлов А.Н.²

¹Чувашский государственный педагогический университет им. И.Я. Яковлева,
каф. ОиТФ, Россия, 428000, Чебоксары, ул. К. Маркса, 38,
E-mail: arinia@mail.ru

² Чувашский государственный педагогический университет им. И.Я. Яковлева,
каф. ОиТФ, Россия, 428000, Чебоксары, ул. К. Маркса, 38, Тел.: 89373999434,
E-mail: michailov88@mail.ru

При движении в углеродной нанотрубке частицы испытывают потери энергии на упругое взаимодействие с атомами стенок нанотрубки и потери на электронном газе. Эти потери будут зависеть от массы и структуры частиц.

В данной работе рассматривается моделирование процесса каналирования таких молекул как: H_2 , O_2 , HCl , C_2H_4 и др. Исследуются распределения энергии на выходе из УНТ и их зависимость от вида частиц, их начальной энергии, углов, и от свойств самой УНТ. Классические траектории каналирующих частиц изучаются на основе решения уравнений движения в потенциале, создаваемом всеми атомами стенок нанотрубки.

$$M \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = - \sum_n \frac{\partial U(\vec{r} - \vec{r}_n)}{\partial \vec{r}} + \vec{f}(\vec{r}, \vec{v})$$

где $U(\vec{r})$ - потенциал взаимодействия каналирующей частицы с отдельным атомом стенки УНТ; $\vec{f}(\vec{r}, \vec{v})$ – диссипативная сила, учитывающая торможение частицы за счет потерь в электронном газе.

Потери энергии на электронах рассчитываются в приближении локальной плотности на основе экспериментальных данных для твердого тела. Для описания взаимодействия частицы с атомами УНТ и самих атомов УНТ друг с другом применяются известные модельные потенциалы, как одночастичные, так и многочастичные, широко используемые в подобных расчетах[1]. При этом во всех случаях учитываются потери энергии каналирующих частиц на электронной подсистеме нанотрубки.

Литература.

1. Вахрушев А.В., Липанов А.М., Суетин М.В. Моделирование процессов адсорбирования водорода наноструктурами. – Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований; НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2008. -120 с.