

# ИЗУЧЕНИЕ КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛИ КАНАЛИРОВАНИЯ АТОМАРНОГО ГАЗА В УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКЕ

Михайлов А.Н.

ФГБОУ ЧГПУ им. И. Я. Яковлева, кафедра ОиТФ, Россия, 428000 Чебоксары, ул. К.Маркса, 38, [michailov88@mail.ru](mailto:michailov88@mail.ru)

В современных работах по каналированию в УНТ рассматривают, в основном, процесс каналирования единичных ионов и простых молекул. В нашем исследовании мы сделали попытку рассмотреть процесс каналирования потока атомных частиц состоящего из 50 и более частиц. Основные атомы, которые были рассмотрены это O, H, N.

При моделировании мы использовали программу LAMMPS с развивающимся на данный момент межатомным потенциалам ReaxFF. В настоящий момент определены потери энергии атомов при каналировании в углеродных нанотрубках с различной геометрией. Произведена оценка структуры нанотрубки после продолжительного каналирования (от нескольких пикосекунд до 1 наносекунды). Показано, что основная часть атомов H деканализует через трубку. При каналировании атомов O характерно деформирование трубки и последующее её разрушение.

Начальные энергии атомов в пучке мы брали равными от 50 до 1000 эВ.

Рассматривали каналирование в углеродных нанотрубках с хиральностями: (10,0), (10,10), (7,5), (10,5) и (11,9). На рис.(1) можно видеть гистограмму распределения по скоростям для 50 атомов кислорода после каналирования в УНТ (10,10) в течении 3 пс.

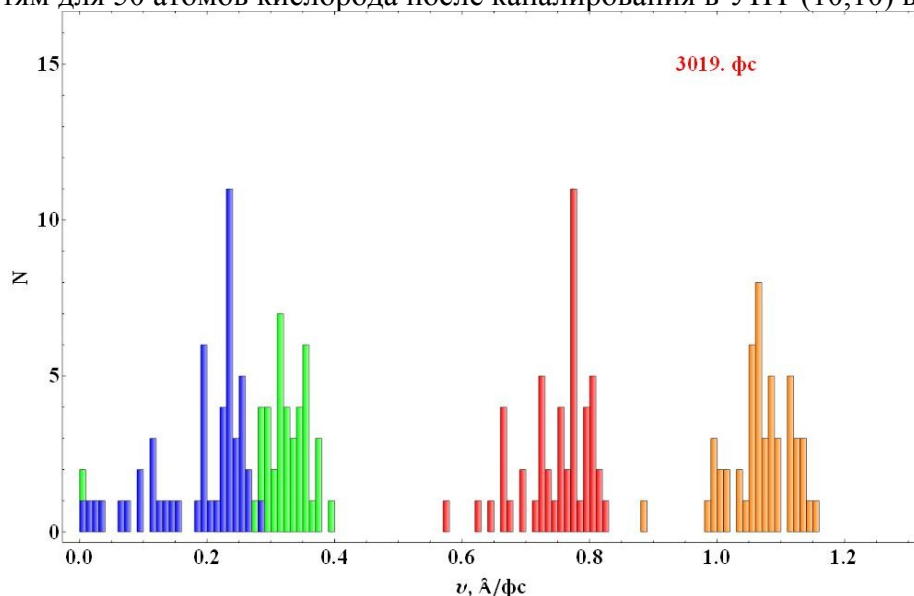


Рис. 1. Распределение по скоростям для 50 атомов кислорода при начальных скоростях 0,25 А/фс, 0,35 А/фс, 0,77 А/фс и 1,1 А/фс. Соответствующие им энергии 50, 100, 500 и 1000 эВ.