

# СЕЧЕНИЕ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА ФУЛЛЕРЕНАХ И УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ

Запрягаев С.А., Карпушин А.А.

Воронежский Государственный Университет, ф-т Компьютерных Наук,  
Россия, 394006, Университетская пл. 1  
Email: [zsa@main.vsu.ru](mailto:zsa@main.vsu.ru)

Фуллерены и углеродные нанотрубки привлекают большое внимание со времени своего открытия. Однако исследование процессов столкновений для таких молекулярных кластеров ограничено небольшим числом работ. Некоторые экспериментальные и теоретические исследования для электронов высоких энергий представлены в [1]. Результаты сечения упругого рассеяния для электронов низких энергий на фуллерене C60 представлены в [2], [3].

В настоящей работе сечение упругого рассеивания быстрых электронов на C60 и углеродных нанотрубках вычислено на основе Борновского приближения:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4m^2 e^2}{\hbar^4 q^4} \left| \int \rho(\vec{r}) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) dV \right|^2,$$

где  $q = |\vec{k} - \vec{k}'|$ ,  $\vec{k}$  и  $\vec{k}'$  - волновые векторы электрона в начальном и конечном состоянии соответственно,  $\rho(\vec{r})$  - плотность заряда кластера:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{k=1}^N Z_k e \delta(\vec{r} - \vec{r}_k) - n(\vec{r}).$$

Здесь  $Z_k$  - заряд ядра k-го атома в кластере,  $\vec{r}_k$  - положение k-го атома в кластере, а  $n(\vec{r})$  - электронная плотность кластера. Вычисление электронной плотности  $n(\vec{r})$  выполнялось по программе Gaussian03 для различных базисов. Для вычисления форм-фактора использовались методы численного интегрирования, включая методы вычисления быстро осциллирующих функций. Для ускорения вычисления форм-фактора разработан алгоритм переноса вычислений с центрального процессора на графический процессор. Разработанный алгоритм распараллеливания вычислений дает рост производительности численных расчетов в десятки раз [4].

Результаты работы представлены в виде таблиц сечения рассеяния для различных энергий падающего электрона в диапазоне 500-5000 эВ и различных углов рассеивания в зависимости от угла падения электрона по отношению к осям симметрии систем C60 и нанотрубки. Кроме того, результаты представлены в графическом виде в форме дифракционных картин.

## Литература

1. L.G.Gerchikov, P.V.Efimov, V.M.Mikoushkin Phys.Rev.Lett.81,2707 (1998)
2. F.A.Gianturco and R.R. Lucchese, J.Chem.Phys.111,6769 (1999)
3. C.Winstead and V.МcКoy, Phys. Rev. A.73, 012711 (2006)
4. Koji Yasuda, *Two-electron integral evaluation on the graphics processor unit*,. Journal of Computational Chemistry (2007)