

## МОДЕЛИРОВАНИЕ КАНАЛИРОВАНИЯ В УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ

Лысова И.В., Степанов А.В., Александров В.А.<sup>1</sup>, Сабиров А.С.<sup>1</sup>, Филиппов Г.М.<sup>2</sup>

Чувашский государственный педагогический университет им. И.Я.Яковлева, Россия, 428000, г. Чебоксары, ул. К.Маркса, д. 38, тел.: (8352) 62-03-24,

E-mail: [arinia@mail.ru](mailto:arinia@mail.ru), [www.mymail@mail.ru](http://www.mymail@mail.ru).

<sup>1</sup> Чувашский государственный университет им. И.Н.Ульянова, Россия, 428000, г. Чебоксары, Московский проспект, д. 15, тел.: (8352) 49-83-86,

E-mail: [alex0v0a@yandex](mailto:alex0v0a@yandex), [rukansas57@rambler.ru](mailto:rukansas57@rambler.ru),

<sup>2</sup> Чебоксарский политехнический институт (филиал) Московский государственный открытый университет, Россия, г. Чебоксары, ул. К.Маркса, д. 54,

тел.: (8352) 63-21-62, E-mail: [filippov38\\_gm@yandex.ru](mailto:filippov38_gm@yandex.ru).

Одним из важнейших методов исследования наноматериалов является построение их компьютерных моделей (см., например [1]). В данной работе изучены некоторые вопросы каналирования атомарных и молекулярных структур в углеродных нанотрубках. В зависимости от поставленной задачи используется широкий набор моделей. Для аналитических оценок применяются модели нанотрубок с непрерывным потенциалом. Модели нанотрубок с фиксированным положением атомов трубки кроме одного атома, ближайшего к движущейся частице, обладают высоким быстродействием и позволяют рассчитывать такие параметры каналирования, как критический угол каналирования, разброс по углам и координатам вылета. Модели, учитывающие динамику всех атомов нанотрубки, пригодны для исследования заполняемости нанотрубок атомарными и молекулярными структурами, для оценок потерь энергии на взаимодействия с атомами нанотрубки, а также для изучения вопросов дефектообразования. Среди таких моделей в работе рассматриваются модель нанотрубки в случае, когда каждый атом находится в фиксированной параболической потенциальной яме, а также модель, в которой связи между атомами представлены «пружинами» и модель с многочастичными потенциалами типа Терсоффа-Бреннера. Результатом моделирования явилось подтверждение ранее высказывавшейся возможности (Осипьян Ю.А.) заполнения углеродных нанотрубок водородом в значительно большей степени, чем это достижимо с помощью стандартных физико-химических методов. Некоторые результаты этих исследований были частично доложены на конференциях прошедших в 2009 году (см., например [2]).

### Литература.

1. Вахрушев А.В., Липанов А.М., Суетин М.В. Моделирование процессов аккумуляции водорода и углеводородов наноструктурами. – Ижевск: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, 2008. – 120 с.
2. Александров В.А., Диденко П.И., Куликаускас В.С., Сабиров А.С., Филиппов Г.М., Черныш В.С., «Взаимодействие ионов с поверхностью» (труды XIX международной конференции ВИП-2009). Т.2.: Типография «Галерея-принт», С.199-201.