

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АТОМАРНОГО ПОТОКА ЧАСТИЦ В УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКЕ

Михайлов А.Н., Лысова И.В.

ФГБОУ ЧГПУ им. И. Я. Яковлева, кафедра ОиТФ,  
Россия, 428000 Чебоксары, ул. К.Маркса, 38, michailov88@mail.ru

В современных работах по взаимодействию частиц с углеродными нанотрубками (ОУНТ) в основном рассматривается каналлирование ионов и протонов, а также заполнение метаном и водородом [1,2]. В нашей работе мы рассмотрели энергетические характеристики однородного потока частиц, каналирующего внутри одностенной углеродной нанотрубки (ОУНТ). Исследован процесс каналлирования потоков частиц в ОУНТ трех типов (10,10), (10, 0) и (11, 9). Определены потери энергии атомов при каналлировании в ОУНТ с различной геометрией. Построены гистограммы распределения атомов по скоростям во всех рассматриваемых случаях. В данной работе проведены расчёты по каналлированию атомарного потока частиц из атомов водорода и кислорода. В ходе компьютерного эксперимента был обнаружен эффект возникающей деформации трубки после продолжительного каналлирования потока атомов. Все расчеты проведены методом молекулярной динамики в пакете LAMMPS [3] с использованием многочастичного потенциала ReaxFF [4,5]. Также в ходе эксперимента был обнаружен эффект закупорки канала из-за взаимодействия атомов с атомами трубки.

### 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.
2. Матюхин С.И., Гришина С.Ю. // Письма в ЖТФ, 2005. Т.31. Вып. 8. С.12.
3. Plimpton S. J. // *J. Comput. Phys.* 1995. **1**. P. 117
4. Strachan A., Kober E. M., van Duin A. C. T. // *J. Chem. Phys.* 2005. **122**. P. 54502.
5. Chenoweth K., van Duin A. C. T. and Goddard W. A. // *J. Phys. Chem. A.* 2008. **112**. 1040.