

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ПОТОКА МОЛЕКУЛ ВОДОРОДА С УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКОЙ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Степанов А.В., Филиппов Г.М. <sup>1</sup>

Чувашский государственный педагогический университет им. И.Я. Яковлева,  
физико-математический факультет, кафедра общей и теоретической физики,  
Россия, 428000, г. Чебоксары, ул. К. Маркса, 38,  
Тел.: (8352) 62-43-26, Факс: (8352) 62-43-26,  
E-mail: [for.antonstep@gmail.com](mailto:for.antonstep@gmail.com)

<sup>1</sup>Московский государственный открытый университет Чебоксарский политехнический институт, кафедра физики,  
Россия, 428000, г. Чебоксары, ул. П. Лумумбы, 8,  
Тел.: (8352) 63-04-59, Факс: (8352) 63-21-62  
E-mail: [filippov38-gm@yandex.ru](mailto:filippov38-gm@yandex.ru)

Исследуется взаимодействие потока молекул водорода с углеродной нанотрубкой (УНТ) в процессе заполнения массива углеродных нанотрубок водородом или транспортировки газа через каналы УНТ. Для исследования применяются методы молекулярной динамики с набором потенциалов типа Абеля–Терссоффа–Бреннера [1], приспособленные для вычислений на массивно–параллельных графических процессорах (GPU) [2]. В модели учитываются как ковалентные так и нековалентные взаимодействия, и кроме того динамика всех атомов. Данные особенности позволяют произвести полный анализ фазовых траекторий изучаемых систем, получить точные сведения о фазовых переходах, если таковые имеют место при выбранных условиях, рассчитать основные термодинамические параметры и статистические характеристики системы.

## Литература

1. *Donald W Brenner, Olga A Shenderova, Judith A Harrison, Steven J Stuart, Boris Ni, Susan B Sinnott. A second-generation reactive empirical bondorder (REBO) potential energy expression for hydrocarbons // J. Phys.: Condens. Matter, 14 2002. P.783–802*
2. *Боресков А.В., Харламов А.А. Основы работы с технологией CUDA. – М.: ДМК Пресс, 2011. – 232 с.: ил.*