

**Торцевое рассеяние атомов водорода на  
углеродных нанотрубках, угловое  
распределение рассеянных атомов**

**Ф.Ф. Умаров, Д.В. Алябьев, И.Д. Ядгаров**

# Области возможного широкого применения (фуллерены и углеродные нанотрубки):

**Квантовые вычислительные системы:** [(«Towards a fullerene-based quantum computer», S.C. Benjamin et al // J. Phys.: Condens. Matter 18 (2006)], [«Electron spin coherence in metallofullerenes: Y, Sc, and La@C<sub>82</sub>». R.M. Brown et al // PHYSICAL REVIEW B 82, 2010]

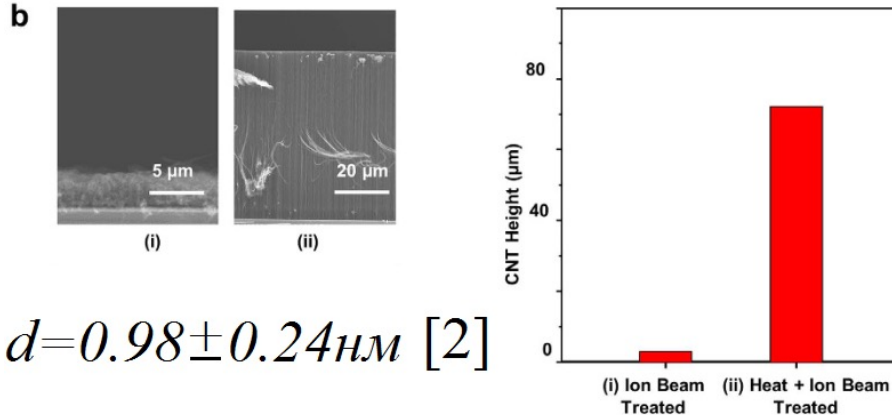
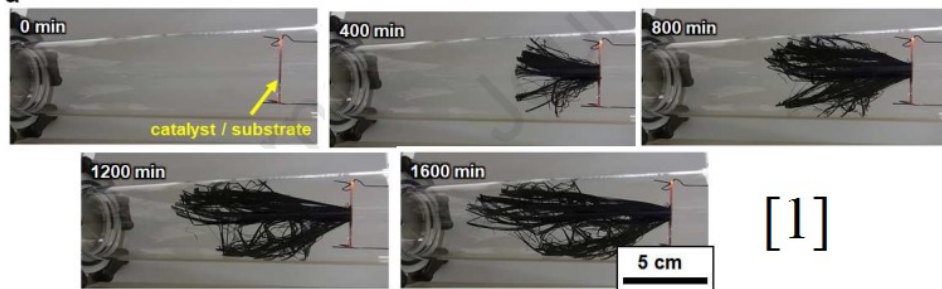
**Материаловедение:** [(«Carbon Nanotubes with Temperature-Invariant Viscoelasticity from - 196 to 1000 °C» // Ming Xu *et al.*, SCIENCE, VOL 330, 2010]

**Оптика:** покрытия, детекторы излучений, [Barone, P., Baik, S., Heller, D. *et al.* Near-infrared optical sensors based on single-walled carbon nanotubes. *Nature Mater* 4, 86–92 (2005). <https://doi.org/10.1038/nmat1276>], [Yang, Z.-P., Ci, L., Bur, J. A., Lin, S.-Y., & Ajayan, P. M. (2008). *Experimental Observation of an Extremely Dark Material Made By a Low-Density Nanotube Array. Nano Letters*, 8(2), 446–451. doi:10.1021/nl072369t ]

**Нанoeлектроника:** электронные компоненты, в т.ч. полупроводниковые, [Flexible carbon nanotube Schottky diode and its integrated circuit applications, Yongwoo Lee et. al// RSC Adv.,2019,9, 22124]

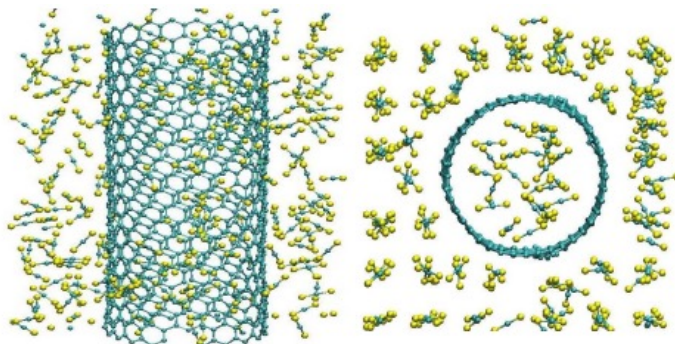
**Медицина:** фотодинамическая терапия, адресная доставка лекарств, радиоиммунотерапия (контрасты, модифицированные контрасты, имеющие лечебный эффект), гипоаллергенность [Думпис М.А., Николаев Д.Н., Литасова Е.В., и др. «Биологическая активность фуллеренов — реалии и перспективы» // Обзоры по клинической фармакологии и лекарственной терапии. – 2018.–Т.16.–№1], [М.А. Орлова и др. «Противоопухолевая активность производных фуллерена и возможности их использования для адресной доставки лекарств» // Новые направления медицинской науки, Онкогематология №2,2013г.]

# «Лес» нанотрубок (carbon nanotube forest)

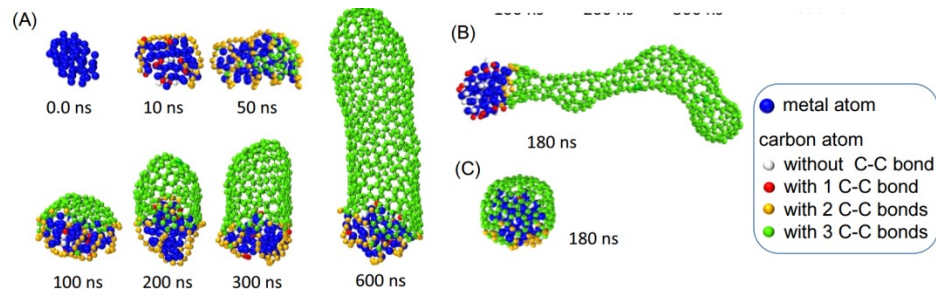


$$d = 0.98 \pm 0.24 \text{ nm} \quad [2]$$

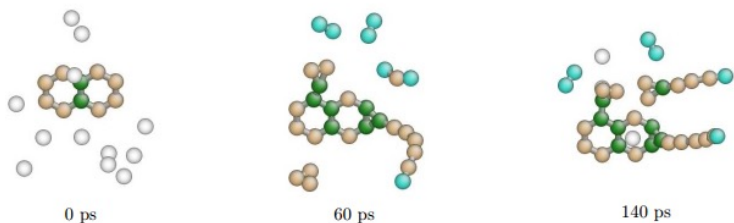
1. H. Sugime, T. Sato, R. Nakagawa, T. Hayashi, Y. Inoue, S. Noda, Ultra-long Carbon nanotube forest via in situ supplements of iron and aluminum vapor sources, *Carbon*, <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.10.066>
2. **Yang, N. et al.** A Forest of Sub-1.5-nm-wide Single-Walled Carbon Nanotubes over an Engineered Alumina Support. *Sci. Rep.* **7**, 46725; doi: 10.1038/srep46725 (2017)



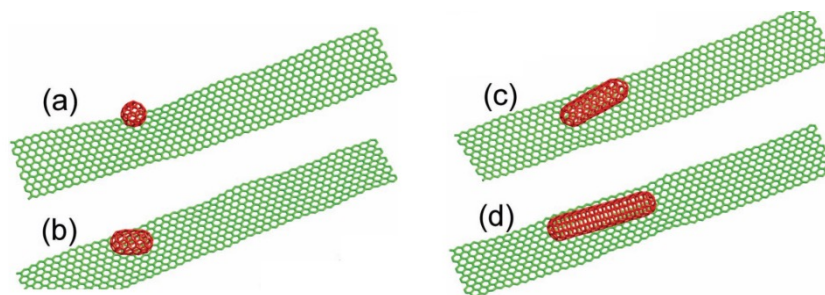
**Figure 3.** Structural presentations of the CNT- CS<sub>2</sub> system (top and bottom).



**Figure 1:** Snapshots of the SWNT growth process from (A) Co and (B) Fe catalysts. The blue balls represent metal atoms, while the white, red, orange, and green balls represent carbon atoms with different numbers of C-C bonds. The growth temperature was 1500 K with  $n_{\text{free}} = 3$ . (C) Deactivated Co catalyst due to encapsulation by a carbon shell.



**Figure 1.** Direct MD-simulations with a double ring seed with ReaxFF model.



**Figure 1 |** Motion of (a) fullerene C<sub>60</sub> molecule, and (b-d) short-length (5,5) carbon nanotubes C<sub>100</sub>, (c) C<sub>180</sub>, and (d) C<sub>260</sub>, respectively, along a finite-width zigzag carbon nanoribbon. Valent bonds of the nanoribbon are shown in green, while the valent bonds of the absorbed fullerene-like molecules, are shown in red. Temperature is  $T = 300$  K.

1. Molecular dynamics simulations of the interaction of carbon nanotube and a carbon disulfide solvent //K Kholmurodov et al,Natural Science, Vol.2, No.8, 902-910 (2010)
2. Kaoru Hisama, Ryo Yoshikawa, Teppei Matsuo, Takuya Noguchi, Tomoya Kawasuzuki, Shohei Chiashi, and Shigeo MaruyamaThe Journal of Physical Chemistry C, 2018
3. Nucleation of carbon nanostructures: Molecular dynamics with reactive potentials // G M Galiullina et al Journal of Physics: Conference Series 774 (2016) 012033
4. Savin, A.V. & Kivshar, Y.S. Transport of fullerene molecules along graphene nanoribbons. Sci. Rep. 2, 1012; DOI:10.1038/srep01012 (2012)

# Потенциал Бреннера

$$E_b = \sum_i \sum_{j(>i)} [V^R(r_{ij}) - b_{ij} V^A(r_{ij})]$$

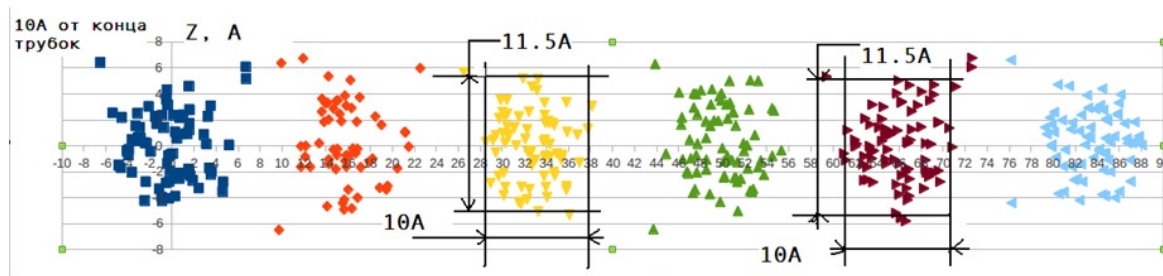
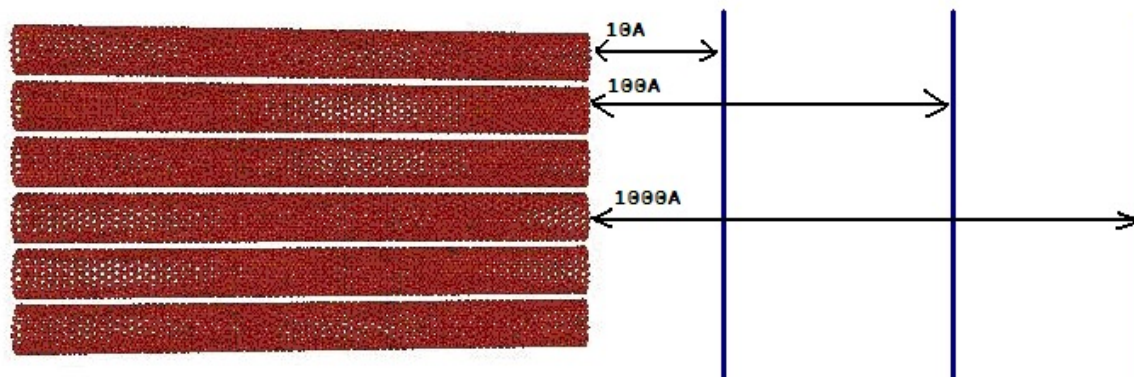
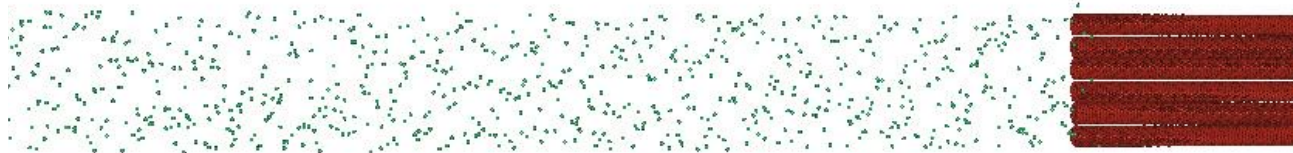
$$V^R(r) = f^C(r)(1 + Q/r)A \cdot \exp(-\alpha \cdot r)$$

$$V^A(r) = f^C(r) \sum_{n=1,3} B_n \cdot \exp(-\beta_n \cdot r)$$

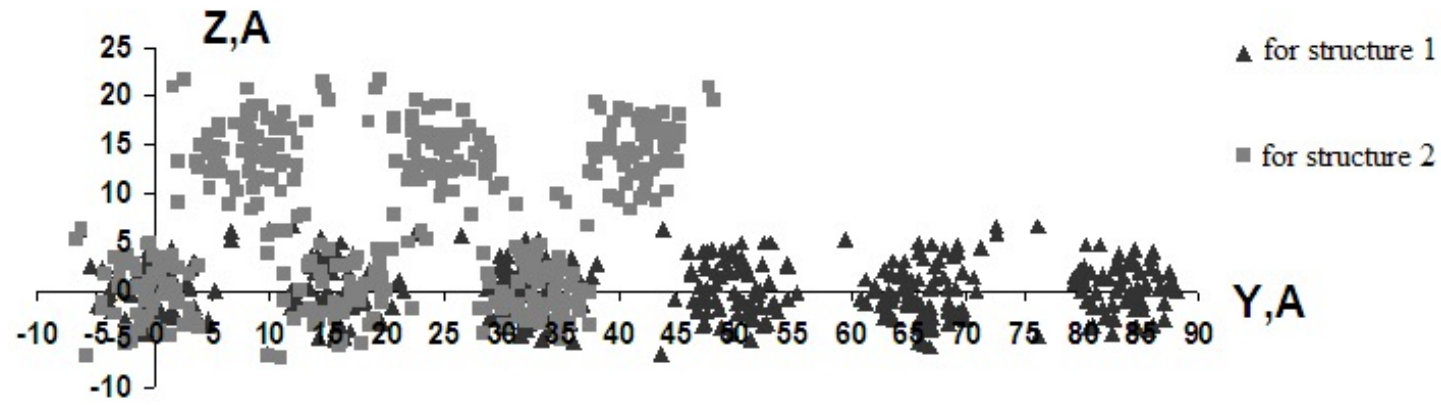
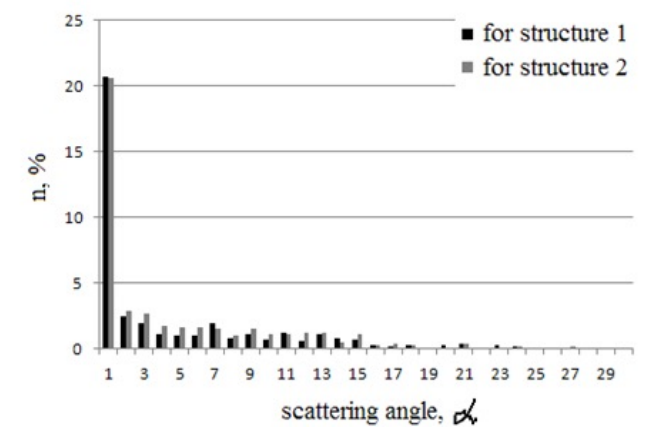
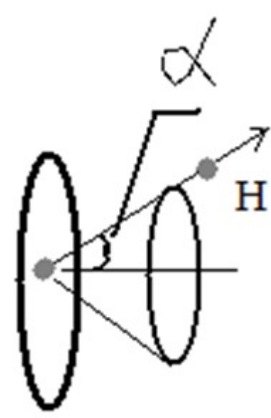
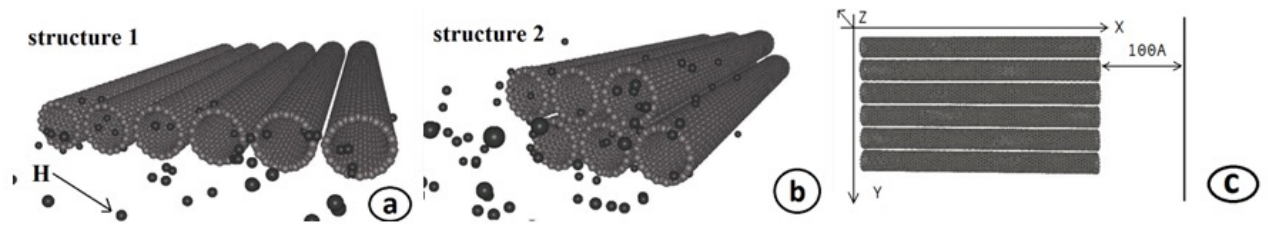
$$f^C(r) = \begin{cases} 1 & r < D_{ij}^{\min} \\ \left\{ 1 + \cos \left[ \frac{(r - D_{ij}^{\min})}{(D_{ij}^{\max} - D_{ij}^{\min})} \right] \right\} / 2 & D_{ij}^{\min} < r < D_{ij}^{\max} \\ 0 & r > D_{ij}^{\max} \end{cases}$$

$A$ ,  $Q$ ,  $\alpha$ ,  $B_n$  и  $\beta_n$  ( $1 \leq n \leq 3$ ) - это параметры для связей между двумя атомами. Здесь  $n$  тип связи (т.е. одинарная, двойная или тройная связи).

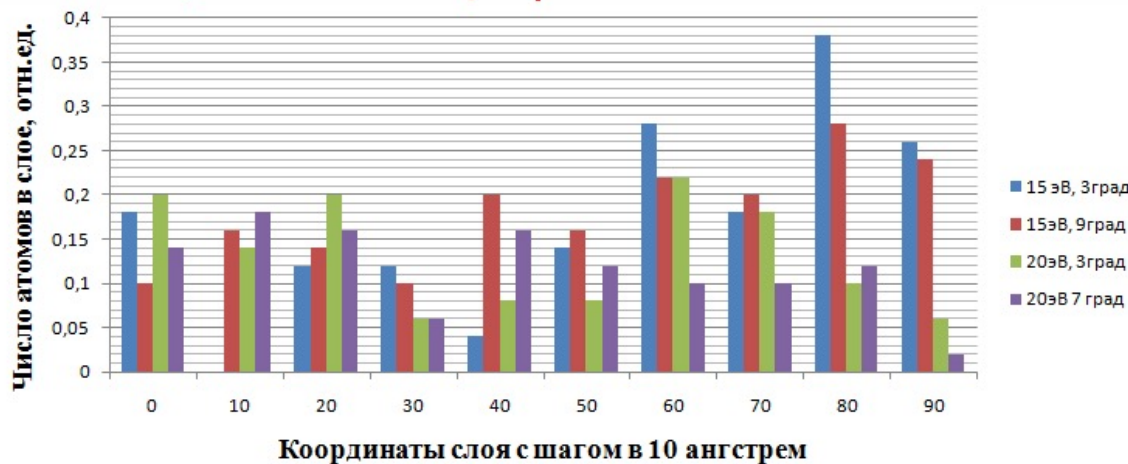
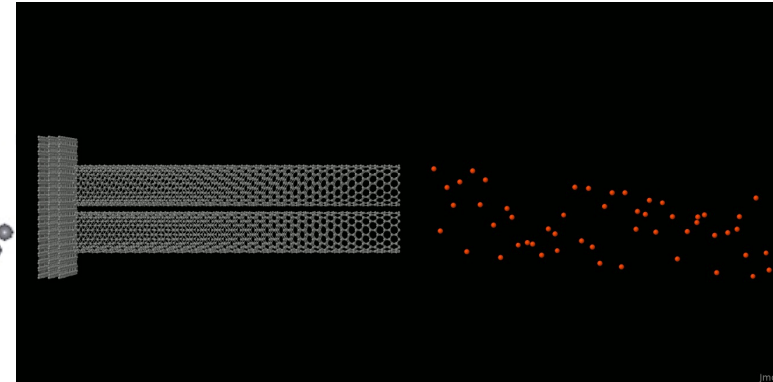
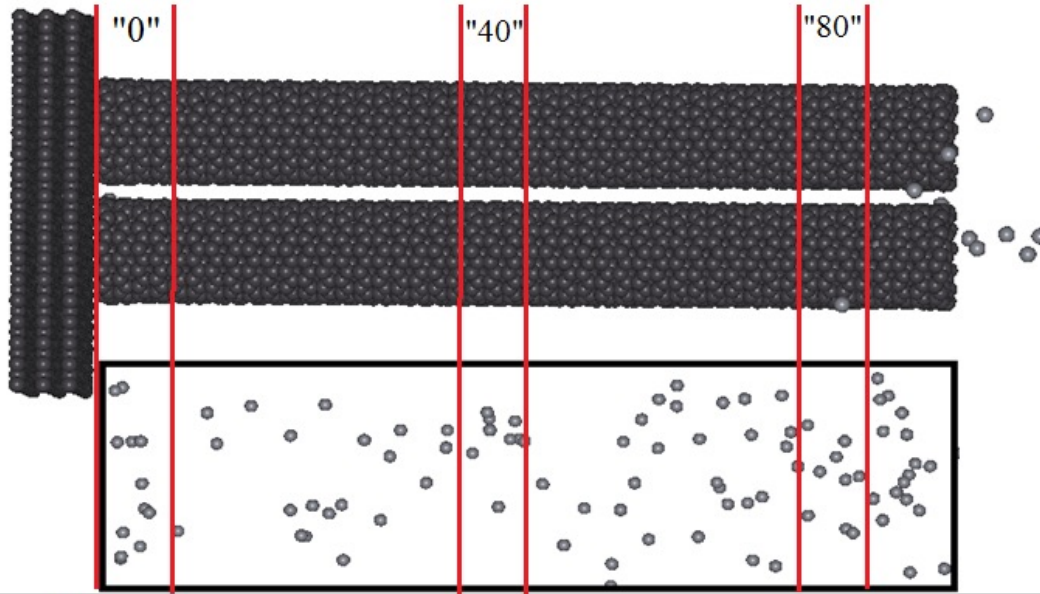
# Рассеяние атомов водорода на торце нанотрубок с энергией 100эВ/атом, «регистрация» рассеянных атомов на «экране»



# Сравнительные данные по рассеянию для разноупакованных нанотрубок (атомы водорода, 100эВ/атом)

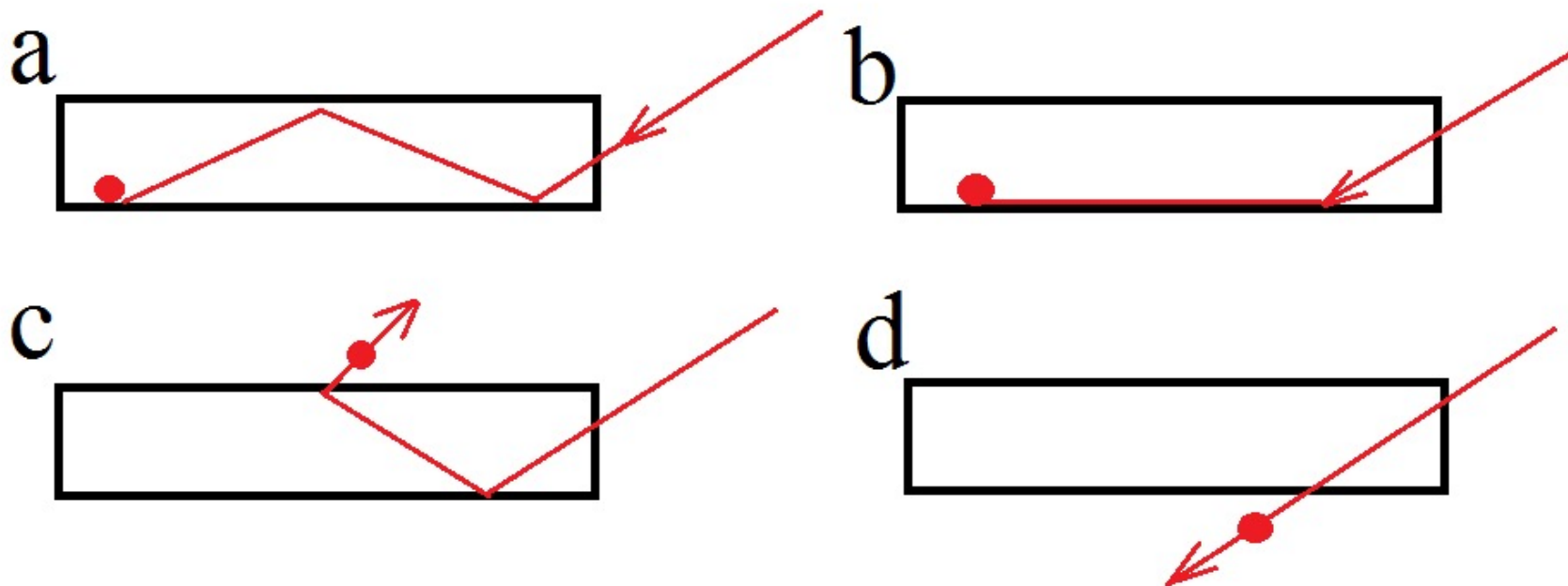


# Рассеяние атомов на торце пучка нанотрубок, распределение инкапсулированных атомов



Распределение инкапсулированных атомов внутри нанотрубок. На графике представлены послойные распределения инкапсулированных атомов (для энергий рассеиваемых атомов 15 и 20 эВ/атом и различных углов)





Траектории (схематически) атомов водорода, рассеянных на торце углеродной нанотрубки: а).- рассеиваемый атом водорода претерпевает несколько столкновений внутри нанотрубки, инкапсулируясь внутри нее, или покидая ее с другого конца, б).- атом водорода, претерпев одно (или несколько) столкновений, «скользит» по стенке нанотрубки, в).- атом водорода, претерпев несколько столкновений, покидает нанотрубку через ее стенку, д) – атом водорода пробивает стенку нанотрубки, покидая ее.

Спасибо за внимание