

УДК 539.12,539.2

ЭВОЛЮЦИЯ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ АТОМОВ ВОДОРОДА ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ ВДОЛЬ НЕХИРАЛЬНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

© 2019 г. Н. В. Максютя¹, В. И. Высоцкий^{1, *}, С. В. Ефименко¹, А. С. Сабиров²,
Г. М. Филиппов³, И. В. Лысова³

¹Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко, 01601 Киев, Украина

²Чувашский государственный университет им. И.Н. Ульянова, 428015 Чебоксары, Россия

³Чувашский государственный педагогический университет им. И.Я. Яковлева, 428000 Чебоксары, Россия

*E-mail: vivysotskii@gmail.com

Поступила в редакцию 26.06.2018 г.

После доработки 17.07.2018 г.

Принята к публикации 22.07.2018 г.

С использованием потенциала Леннарда–Джонса производится расчет точных потенциалов взаимодействия каналируемых атомов водорода с нехиральными углеродными нанотрубками типов $(n, 0)$ и (n, n) . Эти потенциалы после разложения в двумерные ряды Фурье по одномерным векторам обратной решетки и по азимутальным гармоникам используются для анализа движения атомов в канале. В результате численного решения уравнения Шредингера с усредненным электростатическим потенциалом взаимодействия для нанотрубки с хиральностью $(10, 10)$ найдены дискретные уровни поперечной энергии и соответствующие им волновые функции. С помощью фундаментального решения кинетического уравнения исследована эволюция пространственного распределения продольно движущихся каналируемых атомов водорода под влиянием периодического возмущающего потенциала взаимодействия в зависимости от продольной скорости. Показана возможность возникновения фокусирующего эффекта в центре нанотрубки для движущихся атомов водорода.

Ключевые слова: потенциал Леннарда–Джонса, усредненный электростатический потенциал взаимодействия, каналирование атомов водорода, нехиральные углеродные нанотрубки, кинетическое уравнение, пространственное распределение, эффект фокусировки.

DOI: 10.1134/S0207352819040115

ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] изучалось плоскостное каналирование нерелятивистских нейтральных частиц за счет сил Ван-дер-Ваальса. В этом случае (как следует из [2]) можно пренебречь запаздыванием и использовать одночастичный потенциал Леннарда–Джонса [3] для расчета потенциалов взаимодействия. В работах [4, 5] исследовалось каналирование атомов водорода в углеродной нанотрубке (УНТ) с хиральностью типа “кресло” (armchair) $(10, 10)$ в том случае, когда можно пренебречь влиянием возмущающего потенциала взаимодействия. Как будет показано в дальнейшем, такое приближение хорошо согласуется с количественными оценками. В работах [4, 5] также было показано, что функция плотности вероятности каналируемого в УНТ атома водорода имеет в радиальном направлении два локальных максимума: один находится в области минимума непрерывного потенциала взаимодействия, а второй – в центре канала УНТ.

В данной работе рассчитываются потенциалы взаимодействия атомов водорода с нехиральными УНТ произвольных типов $(n, 0)$ и (n, n) , исследуется эволюция пространственного распределения движущихся атомов водорода в рассматриваемых УНТ в зависимости от скорости координаты z .

ПОТЕНЦИАЛЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КАНАЛИРУЕМЫХ АТОМОВ ВОДОРОДА С ВНУТРЕННИМИ СТЕНКАМИ НЕХИРАЛЬНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

При расчете потенциалов взаимодействия каналируемых атомов водорода с внутренними стенками углеродных нанотрубок будем исходить из одночастичного потенциала взаимодействия Леннарда–Джонса [3]:

$$\phi(r) = 4\epsilon \left[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6 \right], \quad (1)$$

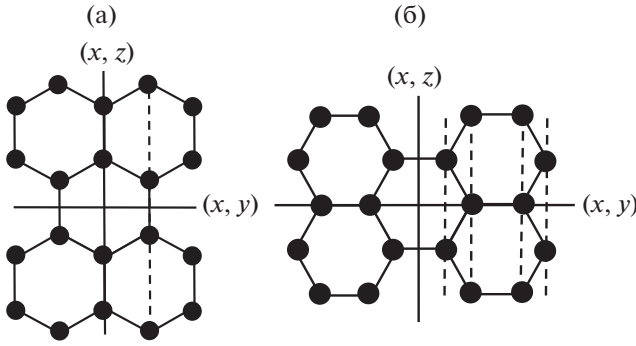


Рис. 1. Схематическое изображение с указанием координатных плоскостей декартовой системы координат фрагментов графеновых стенок для УНТ: а – с хиральностью $(n, 0)$, б – с хиральностью (n, n) .

где $\sigma \approx 3.025 \text{ \AA}$, $\varepsilon \approx 2.064 \times 10^{-3} \text{ \text{ЭВ}}$ [6]. Канализованное движение атомов водорода вдоль нанотрубок типов $(n, 0)$ и (n, n) , где $n > 0$ (n – натуральное число), будем рассматривать в декартовых системах координат, в которых оси z совпадают с осями симметрии нанотрубок, а плоскости (x, y) и (x, z) зафиксированы в положениях, показанных на рис. 1а, 1б для этих типов нанотрубок. В такой геометрии для обоих типов нанотрубок радиус-векторы атомов углерода, расположенных вдоль продольных направлений, можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} \vec{r}_{smp}^{(n,0)} &= R(\vec{e}_x \cos \psi_m + \vec{e}_y \sin \psi_m) + \vec{e}_z z_{smp}, \\ \vec{r}_{smp}^{(n,n)} &= R(\vec{e}_x \cos \psi_{mp} + \vec{e}_y \sin \psi_{mp}) + \vec{e}_z z_{sp}, \end{aligned} \quad (2)$$

R – радиус УНТ, равный соответственно $an/2\pi$ для нанотрубок типа $(n, 0)$ и $an\sqrt{3}/2\pi$ для нанотрубок типа (n, n) [7], $\psi_m = \pi m/n$ – центральные углы, отсчитываемые от плоскости (x, z) до $2n$ цепочек атомов углерода, расположенных на одинаковом расстоянии одна от другой; $m = 0, \dots, 2n-1$; $z_{smp} = z_s + z_{mp}$, $z_s = sd$, $z_{mp} = d[1 + (-1)^m]/4 + a(-1)^p/2\sqrt{3}$, $p = 1, 2$; $\psi_{mp} = \pi p/3n + 2\pi m/n$ – центральные углы, отсчитываемые от плоскости (x, z) до $4n$ цепочек атомов углерода, индексированных числами $m = 0, \dots, n-1$ и $p = 1, \dots, 5$; $z_{sp} = z_s + z_p$, $z_s = sd$, $z_p = d[1 - (-1)^p]/4$. Здесь $d = a\sqrt{3}$ для нанотрубок типа $(n, 0)$ и $d = a$ для нанотрубок типа (n, n) , $a = d_0\sqrt{3}$, где $d_0 \approx 1/42$, a – минимальное расстояние между атомами углерода в плоскости графена [7], s – произвольное целое число. На рис. 1а одна из цепочек при $m = 1$ отмечена штриховой линией, а на рис. 1б таким же образом отмечены четыре цепочки, находящиеся на одном периоде.

С использованием формул (1) и (2) теперь можно получить выражения для точных потенци-

алов взаимодействия атома водорода, находящегося в точке с радиус-вектором $\mathbf{r} = (\rho, z)$, со всеми атомами УНТ типов $(n, 0)$ и (n, n) :

$$U(\mathbf{r}) = 4\varepsilon \sum_{s=-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^M \sum_{p=1}^P (1 - \delta_{3p}) \times \left[\sigma^{12} / |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{smp}^{(n,0),(n,n)}|^{12} - \sigma^6 / |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{smp}^{(n,0),(n,n)}|^6 \right], \quad (3)$$

где числа M и P равняются, соответственно, $2n-1$ и 2 для нанотрубок типа $(n, 0)$, $n-1$ и 5 для нанотрубок типа (n, n) ; δ_{3p} – символ Кронекера.

После разложения потенциала (3) в двумерный ряд Фурье по одномерным векторам обратной решетки $\mathbf{g}_k = (2\pi k/d)\mathbf{e}_z$ [4], а также по азимутальным гармоникам приходим к выражению

$$U(\rho, \varphi, z) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} U_{kl}(\rho) \exp[i(g_k z + l\varphi)], \quad (4)$$

где коэффициенты $U_{kl}(\rho)$ с учетом (2) и (3) вычисляются по следующей формуле:

$$U_{kl}(\rho) = \frac{16R\varepsilon n}{\pi a} f(k, l) \int_0^{\infty} \cos(g_k R w) dw \times \int_0^{\pi} \left\{ \frac{(\sigma/R)^{12}}{[\zeta^2 + w^2]^6} - \frac{(\sigma/R)^6}{[\zeta^2 + w^2]^3} \right\} \cos(l\varphi n) d\varphi. \quad (5)$$

Здесь $f(k, l) = \cos(\pi k/3) [(-1)^l + (-1)^k] / \sqrt{3}$ и $f(k, l) = \cos(2\pi l/3) + (-1)^k \cos(\pi l/3)$ – для нанотрубок типов $(n, 0)$ и (n, n) , $\zeta(\rho, \varphi) = [1 + (\rho/R)^2 - 2(\rho/R)\cos\varphi]^{1/2}$. Из структуры выражений (4) и (5) следует, что точный потенциал $U(\rho, \varphi, z)$ слабо зависит от азимутального угла φ (для больших значений n можно считать, что потенциал вообще не зависит от угла φ). Интересно отметить, что гармоника с $k = 0$ и $l = 0$ совпадает с используемым в теории канализования усредненным электростатическим потенциалом взаимодействия [8, 9]. Она имеет следующий вид:

$$V(\rho) \equiv U_{00}(\rho) = V_0 \left[\frac{21}{32} \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{11} {}_2F_1 \left(\frac{11}{2}, \frac{11}{2}; 1; \frac{\rho^2}{R^2} \right) - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^5 {}_2F_1 \left(\frac{5}{2}, \frac{5}{2}; 1; \frac{\rho^2}{R^2} \right) \right], \quad (6)$$

где $V_0 = 6\pi\varepsilon\sigma n/d$, ${}_2F_1(a, b; c; x)$ – гипергеометрическая функция Гаусса. Графики потенциалов взаимодействия (6) для, например, нанотрубок с хиральностями $(8, 0)$, $(17, 0)$ и $(26, 0)$ изображены на рис. 2. Радиусы этих нанотрубок, соответственно, равны: $R \approx 3.13, 6.66, 10.18 \text{ \AA}$. Очевидно,

что потенциалы взаимодействия для нанотрубок с хиральностями (5, 5), (10, 10) и (15, 15), радиусы которых имеют близкие значения ($R \approx 3.39; 6.78; 10.17 \text{ \AA}$), оказываются очень близкими к потенциалам взаимодействия, изображенным на рис. 2.

Таким образом, нулевые гармоники потенциалов взаимодействия (4) для нехиральных УНТ типов $(n, 0)$ и (n, n) с приблизительно равными геометрическими параметрами приводят к близким по структуре потенциальным ямам, в которых существуют дискретные энергетические уровни поперечной энергии. Остальные компоненты в формуле (4) приводят к переходам между этими дискретными уровнями. Анализ показывает, что основной вклад в возмущающий потенциал взаимодействия $W(\rho, z) = U(\rho, z) - V(\rho)$ вносит слагаемое с $l = 0$ и $k = 2$. С учетом этого условия функцию $W(\rho, z)$ можно записать в более простой для анализа форме:

$$\begin{aligned}
 W(\rho, z) \approx W_0 \exp(ig_2 z) \int_0^\pi \exp[-g_2 R \zeta(\rho, \varphi)] \times \\
 \times \left\{ \frac{g_2^3 \sigma^6}{480 R^3} \left[\frac{1}{\zeta^6(\rho, \varphi)} + \frac{15}{g_2 R \zeta^7(\rho, \varphi)} + \right. \right. \\
 \left. \left. + \frac{105}{g_2^2 R^2 \zeta^8(\rho, \varphi)} + \frac{420}{g_2^3 R^3 \zeta^9(\rho, \varphi)} + \right. \right. \\
 \left. \left. + \frac{945}{g_2^4 R^4 \zeta^{10}(\rho, \varphi)} + \frac{945}{g_2^5 R^5 \zeta^{11}(\rho, \varphi)} \right] - \right. \\
 \left. - \left[\frac{1}{\zeta^3(\rho, \varphi)} + \frac{3}{g_2 R \zeta^4(\rho, \varphi)} + \frac{3}{g_2^2 R^2 \zeta^5(\rho, \varphi)} \right] \right\} d\varphi + \\
 + k.c. = W(\rho) \exp(ig_2 z) + k.c.,
 \end{aligned}
 \tag{7}$$

где $W_0 = 16\pi^2 \sigma^6 \epsilon n / d^3 R^3$ для нанотрубок типа $(n, 0)$ и $W_0 = 32\pi^2 \sigma^6 \epsilon n / d^3 R^3$ для нанотрубок типа (n, n) .

Далее с использованием потенциала (7) рассматривается эволюция пространственного распределения каналируемых атомов водорода, осуществляемая за счет влияния когерентных процессов, вызванных детерминированным взаимодействием со стенками УНТ. Намного более слабый вклад некогерентных процессов, вызванных стохастическим взаимодействием с валентными электронами колеблющихся атомов УНТ, приводящим к деканализированию атомов водорода, будет рассмотрен в другой работе.

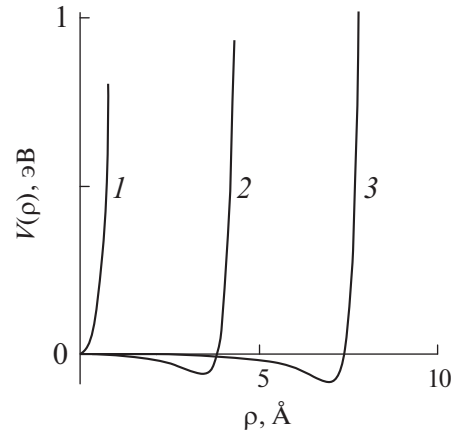


Рис. 2. Графики потенциалов взаимодействия атомов водорода с УНТ типа (8, 0) – кривая 1, типа (17, 0) – кривая 2 и типа (26, 0) – кривая 3.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КАНАЛИРУЕМЫХ АТОМОВ ВОДОРОДА

При решении уравнения Шредингера в цилиндрической системе координат для атома водорода, движущегося со скоростью $\vec{v} = v\vec{e}_z$ с помощью программы, находящейся в библиотеке IMSL (FORTRAN 90), с учетом граничных условий $\chi_{n,l}(0) = \chi_{n,l}(R) = 0$ были численно найдены уровни энергии $\epsilon_{n,l}$ и соответствующие им волновые функции $\chi_{n,l}(\rho)$ при решении задачи Штурма–Лиувилля:

$$\{-d[p_l(\rho) d/d\rho]/d\rho + q_l(\rho) - \lambda_{n,l} r_l(\rho)\} \chi_{n,l}(\rho) = 0.$$

Здесь $p_l(\rho) = r_l(\rho) = \rho^{2l+1}$, $q_l(\rho) = -2mV(\rho) \times \rho^{2l+1} / \hbar^2$, $\lambda_{n,l} = 2m\epsilon_{n,l} / \hbar^2$, $l = 0, 1, \dots$ – орбитальное квантовое число, m – масса атома водорода.

Далее на примере УНТ типа (10, 10) был проведен численный расчет энергетических уровней и соответствующих им волновых функций. На рис. 3а схематически изображены нижние пять энергетических уровней $\epsilon_{n,0}$, начальные населенности которых являются наибольшими в случае падения атома водорода на вход этой УНТ под нулевым углом к оси симметрии. На рис. 3б приведены графики волновых функций, соответствующих этим уровням. Из этих данных видно, что для частиц, находящихся на этих уровнях поперечного движения (а также для всех остальных используемых в расчетах уровней поперечного движения), доступная область ограничивается расстояниями $\rho \leq \rho_0 \approx 4.5 \text{ \AA}$.

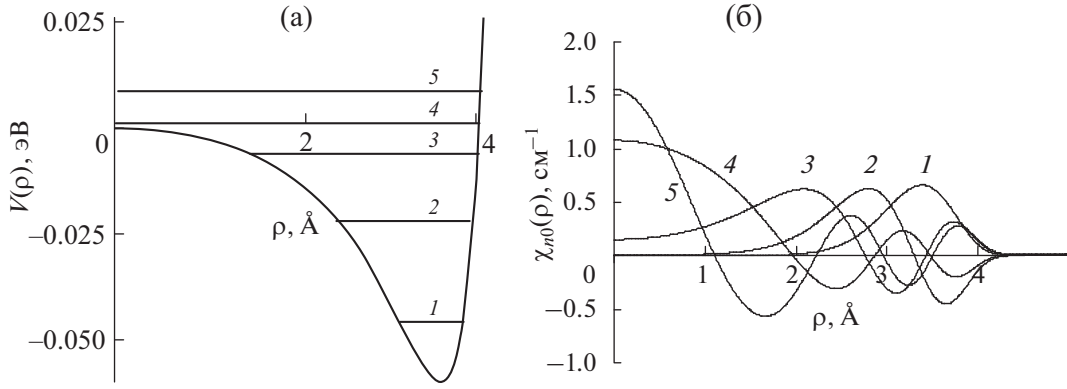


Рис. 3. График потенциала взаимодействия с УНТ типа (10, 10) каналируемого атома водорода (изображены схематически первые пять уровней поперечной энергии $\varepsilon_{n_p,l}$) (а), графики волновых функций $\chi_{n_p,0}(\rho)$, соответствующих этим уровням (б).

Под действием возмущающего потенциала взаимодействия (7) возникают переходы между уровнями каналированного движения с одинаковыми орбитальными квантовыми числами l . Далее будем рассматривать только бесфононные переходы, т.е. полагать, что при описании взаимодействия с движущимися атомами водорода стенку УНТ можно считать идеальным кристаллом. Из этого правила отбора по l следует, что импульс атома водорода может изменяться лишь на величину вектора $\mathbf{g}_2 = 4\pi\mathbf{e}_z/d$ и при этом должен выполняться закон сохранения полной энергии $\varepsilon_{n_p,l} + p_z^2/2m = \varepsilon_{n'_p,l} + p'_z{}^2/2m$ [9]. Исходя из этих допущений, выражение для вероятности перехода между уровнями $\varepsilon_{n_p,l}$ и $\varepsilon_{n'_p,l}$ принимает вид [10]:

$$W_{n'_p,l,n_p,l}(v) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| W_{n'_p,l,n_p,l} \right|^2 \delta(\varepsilon_{n'_p,l} - \varepsilon_{n_p,l} - \hbar g_2 v). \quad (8)$$

Необходимо еще раз подчеркнуть, что входящий в формулу (8) матричный элемент

$$W_{n'_p,l,n_p,l} = \int_0^R \rho^{2l+1} \chi_{n'_p,l}(\rho) \chi_{n_p,l}(\rho) W(\rho) d\rho \quad (9)$$

отличается от нуля только в случае, если переходы осуществляются между состояниями с одинаковыми орбитальными квантовыми числами l (при этом квантовые числа n_p и n'_p в формуле (9) должны быть такими, чтобы выполнялось равенство $\varepsilon_{n'_p,l} = \varepsilon_{n_p,l} + \hbar g_2 v$). Это связано с аксиальной симметрией потенциала взаимодействия $W(\rho)$.

В дальнейшем (для большей наглядности) будем рассматривать наиболее простой случай, когда нерасходящийся (с нулевой угловой дисперсией) пучок атомов водорода падает на вход канала под углом $\vartheta = 0$. В этом случае последующий

расчет существенно упрощается, так как соответствующие населенности [11]:

$$P_{n_p,l}(\vartheta) = \frac{2\pi(2 - \delta_{l,0})}{A} \times \left| \int_0^{\rho_0} J_l\left(\frac{p\rho}{\hbar} \sin \vartheta\right) \chi_{n_p,l}(\rho) \rho^{l+1} d\rho \right|^2, \quad (10)$$

уровней поперечной энергии на входе в нанотрубку будут отличны от нуля только при $l = 0$ (здесь $A = \pi\rho_0^2$ – площадь доступной области в поперечном сечении УНТ). Временную эволюцию населенностей $P_v(\varepsilon, t)$ уровней каналированного движения с поперечными энергиями $\varepsilon_{n_p,l}$ можно исследовать с помощью следующего кинетического уравнения [9]:

$$\frac{\partial P_v(\varepsilon, t)}{\partial t} - \frac{D_2(v)}{2} \frac{\partial^2 P_v(\varepsilon, t)}{\partial \varepsilon^2} + D_1(v) \frac{\partial P_v(\varepsilon, t)}{\partial \varepsilon} = 0, \quad (11)$$

где $D_k(v) = (\hbar g_2 v)^k \lim_{n_p \rightarrow \infty} \sum_{n_p, l} w_{n_p, l, n_p, l}(v)$ – коэффициенты диффузии [9]. Необходимо отметить, что использование уравнения (11), следующего из уравнения для матрицы плотности, является физически корректным, поскольку ее недиагональные элементы затухают очень быстро [12]. Использование фундаментального решения [13]:

$$E_v(\varepsilon, t) = \theta(t) \exp\left\{-[\varepsilon - D_1(v)t]^2 / 2D_2(v)t\right\} / \sqrt{2\pi D_2(v)t} \quad (12)$$

уравнения (11) при начальном условии $P_v(\varepsilon, 0) = \sum_{n_p} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{n_p,0}) P_{n_p}$, в котором населенности $P_{n_p} \equiv P_{n_p,0}$ вычисляются при условии $\vartheta = 0$ с помощью формулы (10), приводит к следующему выражению для относительной населенности состояний с поперечными энергиями $\varepsilon_{n_p,l}$ на расстоянии $z = vt$:

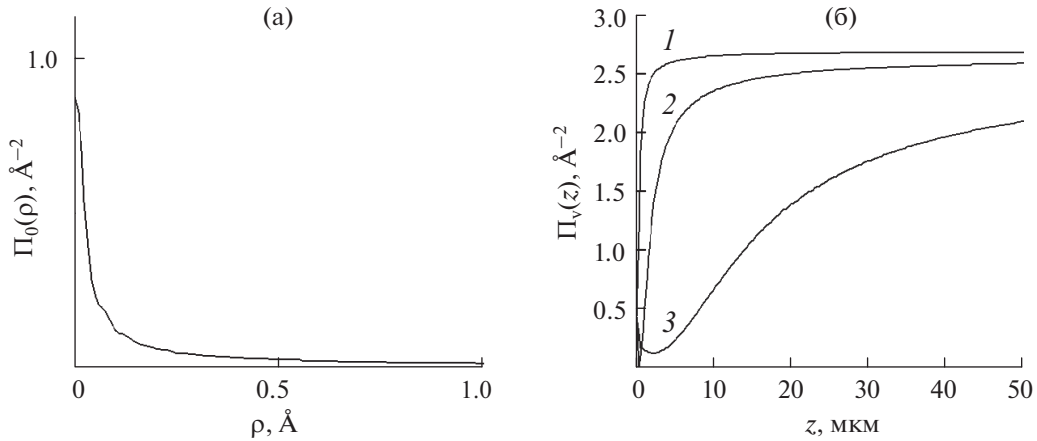


Рис. 4. Графики профилей функций плотностей вероятностей нахождения атома водорода в УНТ типа (10, 10): а – радиального при $z = 0$; б – продольного при $\rho = 0$ для скоростей: $v \approx 0.55 \times 10^7$ см/с (кривая 1), $v \approx 0.65 \times 10^7$ см/с (кривая 2) и $v \approx 0.75 \times 10^7$ см/с (кривая 3).

$$W_{n_p,l}(z, v) = \frac{(2 - \delta_{l,0}) \sum_{n_p} P_{n_p} \exp \left\{ - \left[\epsilon_{n_p,l} - \epsilon_{n_p,0} - D_1(v) z/v \right]^2 / (2D_2(v) z/v) \right\}}{\sum_{n_p,l} (2 - \delta_{l,0}) \sum_{n_p} P_{n_p} \exp \left\{ - \left[\epsilon_{n_p,l} - \epsilon_{n_p,0} - D_1(v) z/v \right]^2 / (2D_2(v) z/v) \right\}}. \quad (13)$$

Пространственное распределение пучка атомов водорода, каналируемых вдоль УНТ, можно описать с помощью функции:

$$\Pi(\rho, z, v) = (2\pi)^{-1} \sum_{n_p,l} \rho^{2l} \chi_{n_p,l}^2(\rho) W_{n_p,l}(z, v). \quad (14)$$

Если учесть, что для населенностей (13) имеет место условие нормировки: $\sum_{n_p,l} W_{n_p,l}(z, v) = 1$, то очевидно, что функция (14) является плотностью вероятности нахождения атома водорода в УНТ, для которой также должно выполняться нормировочное условие $\int_0^{2\pi} \int_0^R \rho d\rho d\phi \Pi(\rho, z, v) = 1$.

Далее рассмотрим особенности функций плотностей вероятностей нахождения атома водорода в канале УНТ как в радиальном, так и в продольном направлениях (исследуются их профили). Так, на рис. 4а показана функция радиального профиля $\Pi_0(\rho) = \left[\sum_{n_p} \chi_{n_p,0}^2(\rho) P_{n_p} \right] / \left(2\pi \sum_{n_p} P_{n_p} \right)$ на входе в УНТ, т.е. при $z = 0$ (в области $1 \text{ \AA} \leq \rho \leq 4.5 \text{ \AA}$ функция $\Pi_0(\rho)$ имеет еще два небольших максимума $\sim 0.03 \text{ \AA}^{-2}$). На рис. 4б представлены графики функции продольного профиля:

$$\Pi_v(z) \equiv \Pi(0, z, v) = (2\pi)^{-1} \sum_{n_p} \chi_{n_p,0}^2(0) W_{n_p,0}(z, v), \quad (15)$$

полученной из (14) при $\rho = 0$, соответственно, для трех скоростей атомов водорода: $v \approx 0.55 \times 10^7$ см/с, $v \approx 0.65 \times 10^7$ см/с и $v \approx 0.75 \times 10^7$ см/с. Из рис. 4б

видно, что в результате взаимодействия со стенками УНТ имеет место эффект фокусировки каналируемых атомов водорода в центре канала, резко зависящий от продольной скорости v . При скоростях $v \leq 0.6 \times 10^7$ см/с фокусировка монотонно возрастает с увеличением расстояния, быстро достигая стационарного режима. Как отмечается в работе [9], на аналогичное поведение указывал Фирсов [14] при исследовании движения протонов в осевом канале идеального кристалла. При скоростях $v > 0.6 \times 10^7$ см/с (за исключением интервала скоростей $v \approx (3-4) \times 10^7$ см/с, соответствующих энергиям возбуждения $\hbar g_2 v = 10.09-13.45$ эВ электрона в атоме водорода) вероятность нахождения атома водорода в центре канала УНТ уменьшается, достигая минимального значения на некотором расстоянии, которое с увеличением скорости растет, а затем начинает возрастать, восстанавливая фокусирующий эффект. Следует отметить, что эти расчеты хорошо коррелируют с численными расчетами, проведенными в работе [16] в случае ориентационного движения атомов аргона при конкретной скорости в нанотрубках с различной хиральностью.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исходя из проведенных в работе теоретических исследований процесса каналирования атомов водорода в нехиральных УНТ типов $(n, 0)$ и

(n, n) , можно сделать следующие выводы и обобщения полученных результатов.

Впервые определена структура потенциальных ям, определяющих взаимодействие движущихся атомов водорода с внутренним полем нанотрубок типа $(8, 0)$, $(17, 0)$ и $(26, 0)$ и показано, что основной вклад в возмущающий потенциал взаимодействия вносит гармоника с $l = 0$ и $k = 2$. Эти результаты получены после разложения точного потенциала взаимодействия атома водорода со всеми атомами УНТ по одномерным векторам \mathbf{g}_n обратной решетки, а также – по азимутальным гармоникам.

Для нанотрубок типа $(10, 10)$ (рис. 3а) вычислены матричные элементы резонансных переходов, на их основе найдены диффузионные коэффициенты и, в итоге, обосновано и решено уравнение диффузии для движущихся атомов водорода. Использование этих результатов позволило определить зависимость населенности энергетических уровней от продольной координаты z и скорости v движущихся атомов;

Для идеализированного случая нерасходящегося пучка атомов водорода, движущихся под нулевым углом по отношению к оси симметрии УНТ, рассчитана зависимость плотностей вероятностей нахождения этих атомов в канале УНТ от расстояния и скорости. Предсказана возможность фокусировки этих атомов в центре канала, параметры которой кардинально зависят от продольной скорости. Данное явление с точки зрения квантовой механики соответствует эффекту зависания и связано с так называемым эффектом радужного рассеяния.

Необходимо подчеркнуть, что учет угловой дисперсии исходного пучка атомов водорода при использовании системы кинетических уравнений [9] может существенно дополнить полученные выше результаты. Такие исследования будут проводиться в последующих работах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Высоцкий В.И., Максюта Н.В.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон исслед. 1997. № 6. С. 11.
2. *Бараш Ю.С.* Силы Ван-дер-Ваальса. М.: Наука, 1988. 344 с.
3. *Киттель Ч.* Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 791 с.
4. *Максюта Н.В., Высоцкий В.И., Ефименко С.В.* // Тез. докл. XLV международной Тулиновской конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М.: "КДУ". "Университетская книга", 2015. С. 36.
5. *Maksyuta N., Vysotskii V., Efimenko S.* // Abstract of the XXIX International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, 22–28 July. Toledo (Spain). 2015. ICPEAC – Abstracts Available Online. TU-152.
6. *Stuart S.J., Tutein A.B., Harrison J.A.* // J. Chem. Phys. 2000. № 14. P. 6472. doi 10.1063/1.481208
7. *Елецкий А.В.* // УФН. 1997. Т. 167. № 9. С. 945.
8. *Оцуки Е.-Х.* Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. М.: Мир, 1985. 280 с.
9. *Базылев В.А., Жеваго Н.К.* Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях. М.: Наука, 1987. 272 с.
10. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Наука, 1989. 768 с.
11. *Andersen J.U., Bonderup E., Laegsgaard E. et al.* // Nucl. Instrum. Methods. 1982. V. 194. P. 209.
12. *Каган Ю.М., Кононец Ю.В.* // ЖЭТФ. 1973. Т. 64. № 3. С. 1042.
13. *Владимиров В.С., Вассарин А.А., Каримова Х.Х. и др.* Сборник задач по уравнениям математической физики. М.: Физматлит, 2001. 288 с.
14. *Firsov O.B.* // Radiation Effects. 1974. V. 21. № 3. P. 265.
15. *Александров В.Л., Лысова И.В., Сабиров А.С. и др.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон исслед. 2012. № 2. С. 83.
16. *Лысова И.В.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон исслед. 2013. № 2. С. 37. doi 10.7868/S0207352812080124

The Evolution of the Space Distribution of Hydrogen Atoms at the Channeling along Non-Chiral Carbon Nanotubes

N. V. Maksyuta, V. I. Vysotskii, S. V. Efimenko, A. S. Sabirov, G. M. Filippov, I. V. Lysova

In the work using the Lennard-Jones potential, calculations of the exact potentials of interaction of channeled hydrogen atoms with non-chiral carbon nanotubes of $(n, 0)$ and (n, n) types are made. These potentials after expansion in the two-dimensional Fourier series of one-dimensional reciprocal lattice vectors and azimuthal harmonics are used to analyze the motion of atoms in the channel. As a result of the numerical solution of the Schrödinger equation with the averaged electrostatic interaction potential for a nanotube with $(10, 10)$ chirality, discrete levels of transverse energy and the corresponding wave functions are found. The evolution of the spatial distribution of longitudinally moving channeled hydrogen atoms under the influence of the periodic perturbing interaction potential as a function of the longitudinal velocity is studied by help of the fundamental solution of the kinetic equation. The possibility of the appearance of a focusing effect at the center of a nanotube for moving hydrogen atoms is shown.

Keywords: Lennard-Jones potential, averaged potential of electrostatic interaction, channeling of hydrogen atoms, non-chiral carbon nanotubes, kinetic equation, spatial distribution, focusing effect.