

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ В СИСТЕМАХ «УГЛЕРОДНАЯ НАНОТРУБКА – РАСТВОРИТЕЛЬ»

**С.В.Буров, А.А.Шаповалова, В.В.Сизов**

*Санкт-Петербургский государственный университет*

*Химический факультет*

*198504 Санкт-Петербург, Старый Петергоф, Университетский пр., д. 26*

*E-mail: sizovvv@mail.ru*

Изучение адсорбции и диффузии в углеродных нанотрубках представляет значительный интерес из-за необычных свойств молекулярных флюидов в наноразмерных гетерогенных системах. Установление закономерностей протекания диффузии молекулярных жидкостей в нанотрубках играет важную роль, в том числе, при разработке энергонакопительных конденсаторов. Одним из методов, находящих все более широкое применение при решении подобных задач, является компьютерное моделирование (см., например, работы [1-3]). В настоящей работе этот подход используется для изучения особенностей диффузии растворителя в модельных системах, содержащих одностенные углеродные нанотрубки различного диаметра, помещенные в растворитель (вода, ацетонитрил, метанол, диметилсульфоксид) при температуре 298 К. Изучение таких систем, являющихся модельными аналогами дисперсий нанотрубок, открывает возможность интерпретации экспериментальных данных на основании результатов молекулярно-динамических расчетов, предоставляющих информацию о структуре и диффузии растворителя на молекулярном уровне.

Для проведения расчетов методом молекулярной динамики использовался программный пакет GROMACS v. 4.0 [4], структуры углеродных нанотрубок были подготовлены с помощью программы TubeVBS [5]. Для всех исследованных систем изучено распределение растворителя в моделируемой системе и определены значения коэффициентов диффузии растворителя в объемной фазе, вблизи поверхности и во внутреннем объеме нанотрубок.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 09-03-01105-а.

[1] K.Koga, G.T.Gao, H.Tanaka, X.C.Zeng. Nature 412, 802 (2001).

[2] O.Byl, et al. J.Amer.Chem.Soc. 128, 12090 (2006).

[3] O.N.Kalugin, et al. Nano Lett. 8, 2126 (2008).

[4] B.Hess, et al. J.Chem.Theory Comput. 4, 435 (2008).

[5] TubeVBS. R.G.A.Veiga, Universidade Federal de Uberlandia, Brazil, and David Tomanek, MSU, 2007.