

01;10

Кинетика ориентированного взаимодействия ускоренных частиц с углеродными armchair- и zigzag-нанотрубками

© С.И. Матюхин, С.Ю. Гришина

Орловский государственный технический университет

E-mail: sim1@mail.ru

Орловский государственный аграрный университет

E-mail: sim1@mail.ru

В окончательной редакции 5 июля 2005 г.

Представлены результаты исследования кинетики каналирования ускоренных частиц в однослойных углеродных нанотрубках armchair- и zigzag-конфигурации. Основное внимание уделяется ориентированному движению положительных ионов. Исходя из первых принципов, на основе стохастических уравнений движения частиц внутри нанотрубок построено и решено уравнение Фоккера–Планка для функции распределения частиц по поперечным переменным. Получены простые аналитические формулы для функции распределения частиц по поперечным энергиям, для их радиально-аксиального распределения, а также для длины деканалирования частиц из armchair- и zigzag-нанотрубок.

PACS: 61.46.Fg

Как известно [1–3], внедрение частиц во внутренние полости фуллеренов и нанотрубок может существенно менять их механические, электромагнитные и химические свойства, что открывает новые перспективы использования этих углеродных структур в прикладной химии, материаловедении и наноэлектронике. При этом, как показано в работах [4–6], одним из наиболее эффективных способов допирования нанотрубок может стать метод их углубленного легирования пучками ускоренных ионов в сочетании с эффектом каналирования [7–9].

Ранее [5,6] были изучены особенности ориентированного движения частиц в однослойных нанотрубках с промежуточной хиральностью. В настоящей работе представлены результаты исследования кинетики

каналирования частиц в углеродных нанотрубках armchair- и zigzag-конфигурации.

В отличие от нанотрубок с промежуточной хиральностью armchair- и zigzag-нанотрубки можно представить как совокупность небольшого числа плотноупакованных цепочек атомов, параллельных оси нанотрубок и расположенных определенным образом по периметру цилиндра (рис. 1). Так, однослойные zigzag-нанотрубки с хиральностью $(m, 0)$ состоят из $2m$ атомных цепочек с периодом следования атомов $d = 3a/2$, где a — длина углерод-углеродных связей ($a \approx 0.142$ nm). В случае однослойных armchair-нанотрубок с совпадающими индексами хиральности (m, m) в общей сложности имеется $4m$ цепочек с периодом $d = \sqrt{3}a$, расположенных парами. В цилиндрической системе координат (r, φ, z) , в которой радиальная координата r отсчитывается от оси нанотрубок, величина азимутального угла между цепочками такой пары $\delta\varphi = 2\pi/(3m)$.

Если частицы влетают в armchair- или zigzag-нанотрубку под углом ψ к ее оси, меньшим критического угла осевого каналирования ψ_c [7–9], они будут испытывать коллективные коррелированные столкновения с углеродными атомами образующих нанотрубку цепочек. Такое ориентированное взаимодействие частиц со стенками нанотрубки может быть описано непрерывным потенциалом $U(r, \varphi)$, который, в отличие от нанотрубок с промежуточной хиральностью [5], представляет собой сумму непрерывных потенциалов атомных цепочек [7–9] и существенно зависит от азимутального угла φ (рис. 1). Благодаря этой зависимости момент импульса частиц относительно оси нанотрубки быстро разрушается из-за динамической стохастизации [10–12] при рассеянии на отдельных цепочках, поэтому ориентированное движение положительных ионов в потенциальном поле $U(r, \varphi)$ будет характеризоваться единственным адабатическим инвариантом — поперечной по отношению к оси нанотрубки энергией частиц E_{\perp} .

Таким образом, в отличие от нанотрубок с промежуточной хиральностью [6], в armchair- и zigzag-нанотрубках полная функция распределения частиц по поперечным переменным будет зависеть только от E_{\perp} и в любой момент времени t может быть представлена в виде

$$\Phi(r, \varphi, E_{\perp}; t) = \frac{\Phi(E_{\perp}; t)}{S(E_{\perp})}, \quad (1)$$

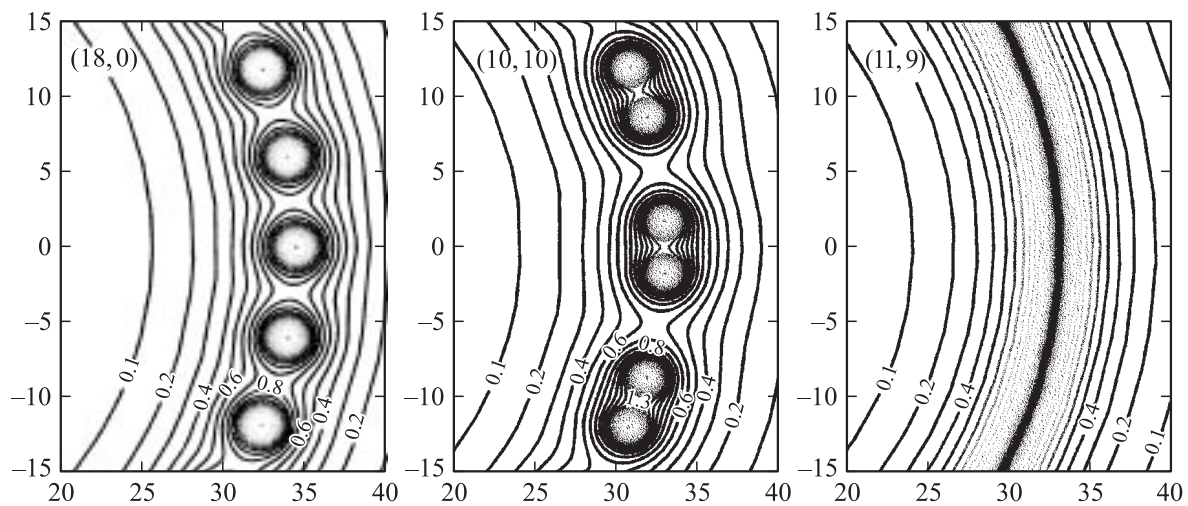


Рис. 1. Контурные графики потенциала (в а.е.) вблизи стенок однослойной zigzag-нанотрубки (18,0), armchair-нанотрубки (10,10) и углеродной нанотрубки с промежуточными индексами хиральности (11, 9). По осям абсцисс и ординат отложены (в а.е.) декартовы координаты x и y ; ось z направлена вдоль оси нанотрубок. Видны образующие zigzag- и armchair-нанотрубки атомные цепочки, которые перпендикулярны плоскости рисунка.

где $S(E_{\perp})$ — площадь доступной для движения частиц области $R(E_{\perp})$, определяемой неравенством $E_{\perp} \geq U(r, \varphi)$:

$$S(E_{\perp}) = \int_{R(E_{\perp})} r dr \cdot d\varphi. \quad (2)$$

Функция $\Phi(E_{\perp}; t)$ в выражении (1) — это функция распределения частиц по медленно изменяющейся переменной E_{\perp} . Временная эволюция этого распределения определяется действием на каналированные частицы случайных сил, обусловленных дискретностью стенок нанотрубок, тепловыми колебаниями их атомов, рассеянием частиц на атомных электронах, и описывается следующим уравнением Фоккера–Планка:

$$\frac{\partial \Phi(E_{\perp}; t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial E_{\perp}} \left[A_0 E_{\perp} \Phi(E_{\perp}; t) + D_0 E_{\perp} \frac{\partial \Phi(E_{\perp}; t)}{\partial E_{\perp}} \right]. \quad (3)$$

Уравнение (3) получено стандартными методами теории случайных процессов [13–15], на основе стохастических уравнений движения частиц внутри нанотрубок, в приближении прямоугольной потенциальной ямы, которое является наиболее реалистичным вследствие хаотичности поперечного движения частиц и малости радиуса экранирования потенциала $U(r, \varphi)$. Коэффициенты сноса (A_0) и диффузии (D_0) этого уравнения целиком определяются свойствами случайных сил, действующих на каналированные частицы. При этом на движение положительных ионов наибольшее воздействие оказывают случайные силы, обусловленные рассеянием на электронах, поэтому

$$A_0 \approx \frac{2}{Mv} \left(\frac{dE}{dz} \right)_e, \quad D_0 \approx \frac{2m_e v}{M} \left(\frac{dE}{dz} \right)_e, \quad (4)$$

где $(dE/dz)_e$ — средние потери энергии ионов за счет рассеяния на электронах, v — их скорость, m_e — масса электрона, M — масса ионов: $M \approx Am_p$, где m_p — масса протона, A — масса иона в и.

Решение уравнения (3) должно удовлетворять заданному начальному условию $\Phi(E_{\perp}; 0) = \Phi_0(E_{\perp})$ и граничным условиям вида

$$\Phi(0; t) < +\infty, \quad \Phi(E_{\perp c}; t) = 0, \quad (5)$$

которые соответствуют ограниченности потока частиц при $E_{\perp} = 0$ и де-каналированию частиц с критической поперечной энергией $E_{\perp c} = E\psi_c^2$,

где E — полная энергия частиц. Указанное решение может быть получено методом разделения переменных и для ионов с энергией $E > 0.5A(m_p/m_e)E_{\perp c}$ на достаточно большой глубине z проникновения в нанотрубку (при $z > 0.2R_{ch}$) имеет вид

$$\Phi(E_{\perp}; z) \approx C_1 \cdot \left(1 - \frac{E_{\perp}}{E_{\perp c}}\right) \cdot \exp\left(-\frac{z}{R_{ch}}\right), \quad (6)$$

где C_1 — нормировочный множитель, определяемый начальным распределением $\Phi_0(E_{\perp})$:

$$C_1 \approx \frac{3}{E_{\perp c}} \cdot \int_0^{E_{\perp c}} \Phi_0(E_{\perp}) \cdot \left(1 - \frac{E_{\perp}}{E_{\perp c}}\right) \cdot dE_{\perp}, \quad (7)$$

R_{ch} — длина деканалирования ионов:

$$R_{ch} \approx \frac{A_{m_p}/m_e}{2.9 \cdot (dE/dz)_e} \cdot E_{\perp c}. \quad (8)$$

Радиально-осевое распределение таких ионов может быть получено путем интегрирования выражения (1) совместно с функцией (6) по поперечным энергиям E_{\perp} . В приближении осцилляторной потенциальной ямы, когда $S(E_{\perp}) \sim E_{\perp}$, оно имеет вид

$$\Phi(r, \varphi; z) \approx C_1^* \cdot \left\{ \frac{U(r, \varphi)}{E_{\perp c}} - \ln \frac{U(r, \varphi)}{E_{\perp c}} - 1 \right\} \cdot \exp\left(-\frac{z}{R_{ch}}\right), \quad (9)$$

где C_1^* определяется из условия нормировки распределения (9) на величину C_1 при $z = 0$.

Следует отметить, что критическая поперечная энергия $E_{\perp c}$ в случае armchair- и zigzag-нанотрубок оказывается больше, чем в нанотрубках с промежуточной хиральностью, поэтому длина деканалирования (8) оказывается больше соответствующей величины [6], рассчитанной для нанотрубок близкого радиуса с промежуточными индексами хиральности. Кроме того, как показывает выражение (9), в отличие от нанотрубок с промежуточной хиральностью [6], в armchair- и zigzag-нанотрубках, как и при осевом каналировании в монокристаллах [8], наблюдается концентрация каналированных частиц в центральной части канала, где $U(r, \varphi) \approx 0$ („flux peaking“). Указанное обстоятельство

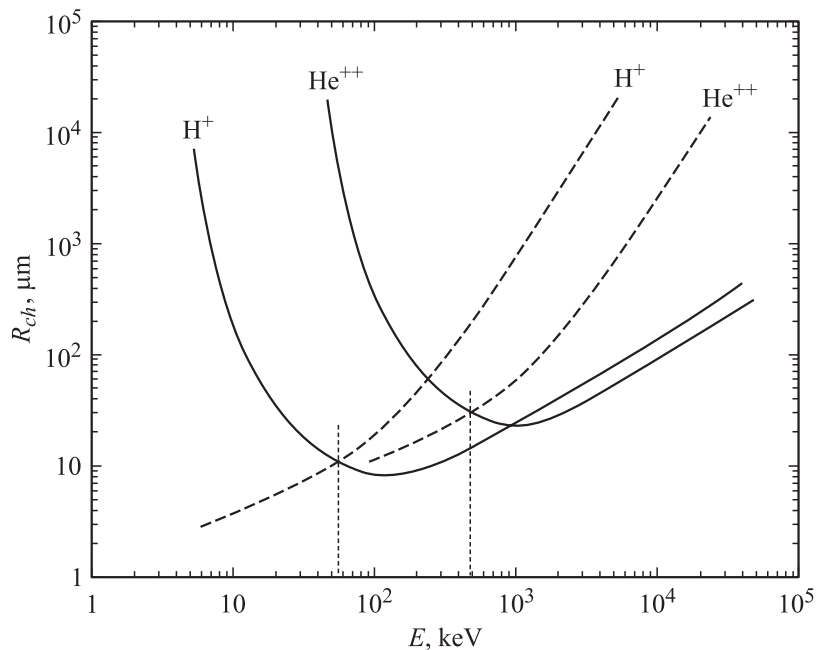


Рис. 2. Длина деканалирования R_{ch} протонов и α -частиц (сплошные кривые) из углеродных armchair-нанотрубок с индексами хиральности (10, 10) в зависимости от энергии частиц E . Пунктирными кривыми обозначена длина $L_0 = E \cdot (dE/dz)_e^{-1}$, которая соответствует пробегу частиц до остановки. Точки пересечения соответствующих друг другу сплошных и пунктирных кривых отвечают энергии $E = 0.5A(m_p/m_e)E_{\perp c}$.

может быть использовано как при ионном легировании нанотрубок, так и при разработке новых ядерно-физических методов структурного анализа, полученных на основе этих углеродных структур материалов.

С точки зрения ионной имплантации частиц в нанотрубки наибольший интерес вызывают каналированные ионы с энергией $E < 0.5A(m_p/m_e)E_{\perp c}$ [5,6]. Такие частицы, быстро теряя энергию при рассеянии на электронах, практически не деканалерируют, так как их длина деканалирования оказывается много больше их пробега до остановки (рис. 2). Функция распределения таких частиц по поперечным

энергиям, как показывает решение уравнения (3):

$$\Phi(E_{\perp}; z) \approx C_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_{\perp}}{T_{\perp}}\right), \quad (10)$$

и, как и в нанотрубках с промежуточной хиральностью [6], имеет вид распределения Больцмана с малой поперечной температурой

$$T_{\perp} \approx \frac{2m_e}{Am_p} \cdot E. \quad (11)$$

Нормировочный множитель C_0 в формуле (10) определяется начальным распределением частиц $\Phi_0(E_{\perp})$:

$$C_0 \approx \frac{1}{T_{\perp}} \cdot \int_0^{E_{\perp c}} \Phi_0(E_{\perp}) \cdot dE_{\perp}. \quad (12)$$

Радиально-аксиальное распределение частиц, описываемых выражением (10), в приближении осцилляторной потенциальной ямы (при $S(E_{\perp}) \sim E_{\perp}$) имеет вид

$$\Phi(r, \varphi; z) \approx C_0^* \cdot \frac{T_{\perp}}{U(r, \varphi)} \cdot \exp\left(-\frac{U(r, \varphi)}{T_{\perp}}\right), \quad (13)$$

где постоянная C_0^* определяется из условия нормировки распределения (13) на величину C_0 .

Таким образом, как и в случае нанотрубок с промежуточными индексами хиральности [5,6], для ионной имплантации частиц в armchair- и zigzag-нанотрубки выгоднее всего использовать ионные пучки с энергией $E < 0.5A(m_p/m_e)E_{\perp c}$. Захватываясь в режим каналирования, частицы таких пучков практически не деканализуют. При этом если длина нанотрубок L будет равна или окажется больше характерного значения $L_0 \approx E(dE/dz)_e^{-1}$, такие частицы, теряя энергию при рассеянии на электронах, будут „застревать“ внутри нанотрубок, образуя эндодральные структуры. Реализуется режим каналирования со „стопом“ [5,6]. В противном случае (при $L < L_0$) будет наблюдаться фокусировка ионных пучков короткими нанотрубками [5,6].

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 03–03–96488).

Список литературы

- [1] *Елецкий А.В.* // УФН. 2000. Т. 170. № 2. С. 113.
- [2] *Molecular Nanostructures* / Eds Kuzmany H. et al. Singapore, 1998.
- [3] *Science and Application of Nanotubes* // Eds D. Tomanek and R. J. Enbody. N.Y., 2000.
- [4] *Рожков В.В., Матюхин С.И.* // Труды XV Междунар. конф. по физике радиационных явлений и радиационному материаловедению. Харьков, 2002. С. 277.
- [5] *Матюхин С.И., Гришина С.Ю.* // Письма в ЖТФ. 2004. Т. 30. В. 20. С. 76; *Matyukhin S.I., Grishina S.Yu.* // Technical Physics Letters. 2004. V. 30. N 10. P. 877.
- [6] *Матюхин С.И., Гришина С.Ю.* // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. В. 8. С. 12; *Matyukhin S.I., Grishina S.Yu.* // Technical Physics Letters. 2005. V. 31. N 4. P. 319.
- [7] *Lindhard J.* // Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 1965. V. 34. N 14. P. 49.
- [8] *Кумахов М.А., Ширмер Г.* Атомные столкновения в кристаллах. М., 1980.
- [9] *Оцуки Е.-Х.* Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. М., 1985.
- [10] *Лихтенберг А., Либман М.* Регулярная и стохастическая динамика. М., 1984.
- [11] *Заславский Г.М.* Стохастичность динамических систем. М., 1984.
- [12] *Ахиезер А.И., Шульга Н.Ф., Трутень В.И., Гриненко А.А., Сыщенко В.В.* // УФН. 1995. Т. 165. № 10. С. 1165.
- [13] *Бакай А.С., Любарский Г.Я., Рожков В.В.* // ЖТФ. 1965. Т. 35. № 9. С. 1525.
- [14] *Rozhkov V.V.* // Phys. Stat. Sol. (b). 1979. V. 5. P. 463.
- [15] *Гардинер К.В.* Стохастические методы в естественных науках. М., 1986.