

02;10

Динамика ориентированного взаимодействия ускоренных частиц с нехиральными углеродными 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

Поступило в Редакцию 17 февраля 2004 г.

В окончательной редакции 21 мая 2004 г.

Представлены результаты исследования динамики ориентированного взаимодействия ускоренных частиц с нехиральными углеродными нанотрубками. Для описания этого взаимодействия используется известное из теории каналирования понятие непрерывного потенциала. Рассмотрены условия применимости сделанного приближения, с учетом сил электронного торможения получены и проанализированы численные решения уравнений движения тяжелых частиц внутри нанотрубок.

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. Однако существующие способы допирования фуллеренов и нанотрубок [1–3], которые в большинстве своем основаны на внедрении примесей из парогазовой фазы в процессе синтеза наночастиц, характеризуются низкой производительностью и непригодны для быстрого перестраивания режимов, особенно в мультстадийных комбинациях. Вследствие этого задача внедрения в углеродные наноструктуры атомов, ионов или молекул является на сегодняшний день центральной проблемой наноразмерных технологий.

Решением этой проблемы, на наш взгляд [4–6], может стать известный и хорошо изученный метод модификации структуры и свойств твердых тел — метод легирования материалов пучками ускоренных частиц.

Этот метод внедрения примесных атомов (метод ионной имплантации) давно стал традиционным и высокоэффективным способом управления свойствами полупроводников, что, в свою очередь, обеспечило быстрый прогресс полупроводниковой электроники и микроэлектроники. К его преимуществам относятся высокая воспроизводимость, локальность и точность имплантации, а также возможность введения в заданных количествах практически любой примеси. При всем при том ему уделяется слишком мало внимания со стороны исследователей, работающих в области нанотехнологий.

В настоящей работе представлены результаты исследования [4–8] динамики ориентированного взаимодействия ускоренных частиц с нехиральными (т. е. отличными от „armchair“ и „zigzag“) углеродными нанотрубками. Для описания этого взаимодействия используется известное из теории каналирования понятие непрерывного потенциала [9,10]. Рассмотрены условия применимости сделанного приближения, с учетом сил электронного торможения получены и проанализированы численные решения уравнений движения тяжелых частиц внутри нанотрубок.

Ориентированное взаимодействие ускоренных частиц с углеродными нанотрубками характеризуется тем, что угол ψ между направлением их скорости и осью нанотрубок меньше некоторого критического угла ψ_c , который в случае нехиральных нанотрубок для частиц с энергией $E > 2\pi Z_1 Z_2 e^2 / a_{TF}$ определяется выражением

$$\psi_c \approx \sqrt{\frac{8\pi Z_1 Z_2 e^2 a_{TF}}{3\sqrt{3} a^2 E}}, \quad (1)$$

где $Z_1 e$ — заряд атомных ядер частиц, $Z_2 e$ — заряд ядер углерода ($Z_2 = 6$), a — длина углерод-углеродных связей в нанотрубке ($a \approx 0.142$ nm), a_{TF} — радиус экранирования межатомного взаимодействия [10,11]:

$$a_{TF} \approx 0.885 a_B (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3}, \quad (2)$$

где a_B — боровский радиус. (Для протонов с энергией 5 keV $\psi_c \approx 5^\circ$.)

При $\psi < \psi_c$ атомные частицы будут испытывать коллективные коррелированные столкновения с углеродными атомами стенок нанотрубки, поэтому взаимодействие частиц с этими стенками может быть описано непрерывным потенциалом, который для частиц, внедренных в

нехиральную нанотрубку, имеет вид

$$U(r, z) = \frac{4R}{3\sqrt{3}a^2} \int_0^{2\pi} \int_0^L V\left(\sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \varphi + (z - z')^2}\right) \cdot d\varphi \cdot dz', \quad (3)$$

где z — глубина проникновения частиц в нанотрубку, r — расстояние, отсчитываемое от ее оси, R — радиус нанотрубки, L — ее длина, $V(x)$ — межатомный потенциал взаимодействия.

Учитывая тот факт [10,11], что радиус экранирования межатомного потенциала $a_{TF} \ll L$, крайними эффектами в выражении (3) можно пренебречь. Кроме того, так как $a_{TF} < a \ll R$, при рассмотрении взаимодействия частиц со стенками нанотрубки можно пренебречь кривизной их поверхности. Тогда движение частиц в полости нанотрубки можно рассматривать [7,8] как движение между двумя параллельными атомными плоскостями, расположенными на расстоянии $r = R$ от оси нанотрубки. При этом потенциал (3) взаимодействия частиц со стенками нанотрубки будет совпадать с потенциалом атомной плоскости

$$U(r) \approx \frac{4}{3\sqrt{3}a^2} \int_0^\infty V\left(\sqrt{(R-r)^2 + \rho^2}\right) \cdot \rho \cdot d\rho. \quad (4)$$

В частности, в случае межатомного потенциала Линдхарда [9–11]

$$U(r) \approx \frac{8\pi Z_1 Z_2 e^2}{3\sqrt{3}a^2} \cdot \left(\sqrt{(R-r)^2 + 3a_{TF}^2} - (R-r)\right). \quad (5)$$

Ориентированное движение частиц в потенциальном поле (4) вполне уместно назвать режимом каналирования [9,10]. Такое движение характеризуется тем, что близкие столкновения частиц с атомами углерода будут сильно подавлены, а следовательно, будут подавлены и процессы разрушения нанотрубок.

Для внедрения во внутренние полости нанотрубок атомные частицы должны преодолеть потенциальный барьер, высота которого [7,8] не превышает 100 eV (для протонов — порядка 16 eV). Поскольку при таких энергиях дебройлевская длина волны частиц с массой $m \gg m_e$ (здесь m_e — масса электрона) много меньше размеров нанотрубки (для протонов эта величина порядка 10^{-2} nm), для описания их ориенти-

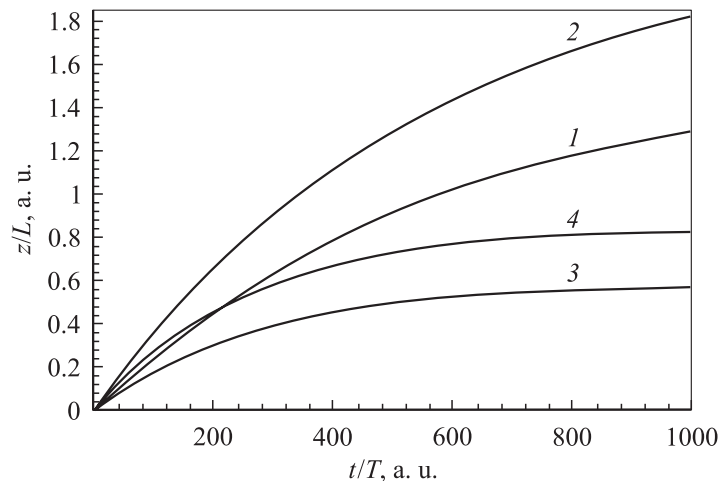


Рис. 1. Графики зависимости от времени глубины z проникновения в нанотрубку с индексами хиральности (11,9) имплантированных протонов с энергией 5 keV (1,3) и 10 keV (2,4). Кривые 1 и 2 соответствуют $r_0 = 0.3R$, кривые 3 и 4 — значению $r_0 = 0.7R$.

рованного движения применимы законы классической механики. При этом заранее очевидно, что, двигаясь внутри нанотрубки, частицы будут совершать затухающие радиальные колебания с периодом

$$T \approx \sqrt{2m} \cdot \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \left[E_0 \psi_0^2 + U(r_0) - U(r) - \frac{M_0^2}{2mr^2} \right]^{-1/2} dr, \quad (6)$$

где E_0 — начальная энергия частицы, ψ_0 — ее начальный угол влета по отношению к оси нанотрубки, M_0 — начальный момент импульса частицы относительно этой оси, r_0 — радиальная координата начальной точки влета частицы в нанотрубку, а r_{\min} и r_{\max} — корни уравнения

$$E_0 \psi_0^2 + U(r_0) - U(r) - \frac{M_0^2}{2mr^2} = 0, \quad (7)$$

которые соответственно имеют смысл минимального и максимального отклонения частицы от оси нанотрубки. В случае $M_0 = 0$ минимальное отклонение $r_{\min} = 0$.

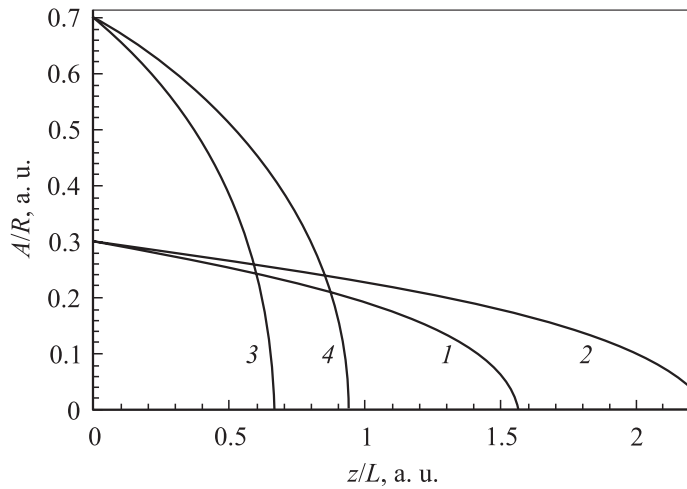


Рис. 2. Графики зависимости амплитуды A радиальных колебаний протонов с энергией 5 кэВ (1, 3) и 10 кэВ (2, 4) от глубины z проникновения в углеродную нанотрубку с индексами хиральности (11, 9). Кривые 1 и 2 соответствуют $r_0 = 0.3R$, кривые 3 и 4 — значению $r_0 = 0.7R$.

Торможение частиц обусловлено их рассеянием на электронах углеродных атомов нанотрубки. Его интенсивность определяется локальной плотностью электронов в месте пребывания частиц и в зависимости от энергии частиц может быть рассчитана [10] по теории Бете–Блоха или Линдхарда. При этом поперечная по отношению к оси нанотрубки энергия частиц и их момент импульса относительно этой оси при движении в нехиральных нанотрубках являются адиабатическими инвариантами.

Численное решение уравнений движения частиц, полученное для протонов различных энергий с учетом их энергетических потерь при рассеянии на электронах нанотрубки, представлено на рис. 1, 2. Расчеты производились для нехиральных нанотрубок длиной $L = 50 \mu\text{m}$ с радиусом $R = 0.679 \text{ nm}$. Рисунки соответствуют случаю, когда начальный угол между направлением скорости частицы и осью нанотрубок $\psi_0 = 0$, а радиальная координата r_0 начальной точки влета частицы в нанотрубку равна $0.3R$ (кривые 1 и 2) или $0.7R$ (кривые 3 и 4). Период колебаний (6) таких частиц в полости нанотрубки порядка 10^{-4} ns и примерно в 400 раз меньше характерного пролетного времени L/v_0 ,

где v_0 — начальная скорость частиц. В качестве потенциала взаимодействия частиц со стенками нанотрубки использовался непрерывный потенциал атомной плоскости, определяемый выражениями (5) и (2).

Расчеты показывают (рис. 1, 2), что при каналировании положительных атомных частиц, скорости которых $v < v_B Z_{1,2}^{2/3}$ (keV-ные пучки; здесь v_B — боровская скорость), может быть реализован такой режим движения, когда частицы, рассеиваясь на электронах, теряют энергию быстрее, нежели вылетают из нанотрубки (каналирование со „стопом“). Таким образом, варьируя энергию пучка, можно создавать [4–6] оптимальные условия для ионной имплантации частиц в углеродные наноструктуры, что открывает широкие перспективы использования ионных пучков для промышленного производства допированных фуллеренов и нанотрубок.

Реализация режима каналирования со „стопом“ зависит от соотношения между такими параметрами, как начальная энергия частиц E_0 , начальный момент импульса частиц M_0 относительно оси нанотрубки, координата r_0 точки влета частиц в нанотрубку, длина L нанотрубки. При заданной энергии пучка доля частиц, пролетающих через нанотрубку без остановки, будет увеличиваться с уменьшением ее длины (рис. 1). При этом уменьшение амплитуды поперечных колебаний таких частиц (рис. 2) можно интерпретировать как фокусировку пучка частиц нанотрубками.

Явление фокусировки ионных пучков короткими нанотрубками может найти самый широкий круг технических приложений.

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. // Материалы I Всерос. конф. „Физико-химические процессы в конденсированном состоянии и на межфазных границах“. Воронеж, 2002. С. 217.

- [6] *Матюхин С.И.* // Тез. докл. Междунар. конф. „Химия твердого тела и современные микро- и нанотехнологии“. Ставрополь, 2002. С. 77.
- [7] *Матюхин С.И., Гришина С.Ю.* // Тез. докл. XV Всерос. симпозиума „Современная химическая физика“. М., 2003. С. 71.
- [8] *Матюхин С.И., Гришина С.Ю.* // Сб. трудов 12-й Междунар. конф. по радиационной физике и химии неорганических материалов. Томск, 2003. С. 344.
- [9] *Lindhard J.* // Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 1965. V. 34. N 14. P. 49.
- [10] *Оцуки Е.-Х.* Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. М., 1985.
- [11] *Дедков Г.В.* // УФН. 1995. Т. 165. № 8. С. 919.