*01;02*

# Деканалирование ионов на атомах, внедренных в углеродные нанотрубки

© *С.И. Матюхин*

Орловский государственный технический университет
E-mail: sim1@mail.ru

*Поступило в Редакцию 15 февраля 2008 г.*

Рассмотрен вопрос о деканалировании ионов на атомах, внедренных во внутренние полости углеродных нанотрубок. Построено и решено кинетическое уравнение Чепмена–Колмогорова, описывающее такое деканалирование, получены аналитические выражения для длин деканалирования ионов на внедренных атомах. Показано, что эти длины существенно зависят от положения атомов внутри нанотрубок и, в отличие от длин деканалирования ионов на электронах, растут, как $\sqrt{E}$, вместе с энергией $E$ ионов.

PACS: 61.46.Fg, 78.70.-g, 61.85.+p, 41.85.-p

В настоящее время явление каналирования частиц в углеродных нанотрубках предлагается использовать при разработке новых источников монохроматичного рентгеновского излучения [1], для получения и управления пучками нанометровых сечений [2–4], а также для анализа и модификации свойств и структуры нанострубок методом ионной имплантации [3,4]. Кинетика каналирования ионов в идеализированных „пустых“ нанотрубках была изучена в работах [3,4]. В настоящей работе рассмотрен вопрос о деканалировании ионов на атомах, внедренных во внутренние полости углеродных нанотрубок.

Кинетика каналирования ионов в нанотрубках, содержащих внедренные атомы, описывается уравнением Чепмена–Колмогорова:

$$\frac{\partial \Phi(\mathbf{x}, z)}{\partial z} = -\hat{L}_{ch}\{\Phi(\mathbf{x}, z)\} - I(\mathbf{x}, z), \qquad (1)$$

которое помимо слагаемого $\hat{L}_{ch}\{\Phi(\mathbf{x}, z)\}$, учитывающего диффузионный механизм деканалирования включает в себя интеграл столкновений $I(\mathbf{x}, z)$, учитывающий возможность деканалирования в результате редких драматических событий, связанный с однократным рассеянием частиц на большой угол.

Функция $\Phi(\mathbf{x}, z)$ в уравнении (1) — это функция распределения каналированных частиц по поперечным переменным $\mathbf{x}$ на глубине $z$ проникновения в нанотрубки, $\hat{L}_{ch}$ — оператор Фоккера–Планка, описывающий многократное рассеяние ионов [3,4].

Интеграл столкновений $I(\mathbf{x}, z)$ связан с вероятностью $W(\mathbf{x}, z)dz$ того, что на интервале глубин $dz$ произойдет рассеяние частиц на „опасный" угол $(\mathbf{x} \to \mathbf{x}')$, и может быть выражен через дифференциальное сечение рассеяния $d\sigma_A(\mathbf{x} \to \mathbf{x}')$ на атомах сорта $A$:

$$I(\mathbf{x}, z) + \Phi(\mathbf{x}, z)W(\mathbf{x}, z) = \Phi(\mathbf{x}, z) \int\limits_{V'} d\mathbf{x}' \sum_A n_A(\mathbf{x}, z) \frac{d\sigma_A(\mathbf{x} \to \mathbf{x}')}{d\mathbf{x}}, \quad (2)$$

где $n_A(\mathbf{x}, z)$ — концентрация внедренных атомов сорта $A$, $V'$ — фазовый объем, который отвечает неканалированным состояниям частиц $\{\mathbf{x}'\}$.

Решение уравнения (1) должно удовлетворять заданному начальному условию $\Phi(\mathbf{x}, 0) = \Phi_0(\mathbf{x})$ и граничному условию вида:

$$\Phi(\mathbf{x}, z)\big|_{\mathbf{x} \in S} = 0, \quad (3)$$

где $S$ — замкнутая поверхность в фазовом пространстве $\{\mathbf{x}\}$, определяемая критическими параметрами каналирования [5]. Это решение может быть получено методом разложения интеграла столкновений (2) по собственным функциям оператора Фоккера–Планка $\hat{L}_{ch}$ и имеет тот же вид, что и в „пустых" нанотрубках [3,4], с той разницей, однако, что полные длины деканалирования ионов $\tilde{R}_{ch}$ будут определяться теперь как их многократным рассеянием, так и однократным рассеянием частиц на внедренных в нанотрубки атомах (заметим, что эти атомы могут быть объединены в молекулы!):

$$\tilde{R}_{ch}^{-1} = R_{ch}^{-1} + (R_{ch}^{*})^{-1}. \quad (4)$$

Парциальные длины деканалирования $R_{ch}$ в формуле (4) обусловлены, главным образом, многократным рассеянием ионов на электродах. Для углеродных нанотрубок с различной хиральностью эти длины деканалирования получены нами в работах [3,4]. Длины деканалирования на внедренных атомах $R_{ch}^{*}$ связаны с появлением в кинетическом уравнении (1) интеграла столкновений (2) и могут быть представлены в общем виде:

$$R^*_{ch}(z) = \left[\sum_A \frac{1}{z}\int_0^z dz' \int_V d\mathbf{x} n_A(\mathbf{x}, z')\varphi_1^2(\mathbf{x}) \int_{V'} d\mathbf{x}' \frac{d\sigma_A(\mathbf{x} \to \mathbf{x}')}{d\mathbf{x}}\right]^{-1}, \quad (5)$$

где $\varphi_1(\mathbf{x})$ — собственная функция оператора Фоккера–Планка $\hat{L}_{ch}$, отвечающая его минимальному собственному значению $\lambda_1$, $V$ — фазовый объем, отвечающий каналированным состояниям частиц $\{\mathbf{x}\}_V$.

В случае нехиральных нанотрубок зигзаг- или кресло-конфигурации [4], для которых $\mathbf{x} \equiv (\mathbf{r}, E_\perp)$, где $\mathbf{r}$ — радиус-вектор, характеризующий положение ионов в поперечной по отношению к оси нанотрубок плоскости, а $E_\perp$ — энергия их поперечного движения, для ионов с энергией $E > 0.5A_1(m_p/m_e)E_{\perp c}$, где $A_1$ — атомная масса иона (в а.е.м.), $m_e$ — масса электрона, $m_p$ — масса протона, $E_{\perp c}$ — критическая поперечная энегия каналирования [5], выражение (5) приобретает вид (здесь $\varepsilon = E_\perp/E_{\perp c}$):

$$R^*_{ch}(z) = \left[\sum_A \frac{3}{z}\int_0^z dz' \int_0^1 d\varepsilon\, n'_A(\varepsilon; z')(1-\varepsilon)^2 \int_{\theta_0(\varepsilon)}^{\pi} d\theta\, \frac{d\sigma_A(\theta)}{d\theta}\right]^{-1}, \quad (6)$$

где $\theta_0(E_\perp)$ — минимальный угол рассеяния, начиная с которого ионы деканалируют:

$$\theta_0(E_\perp) \approx \sqrt{\frac{E_{\perp c} - E_\perp}{E}}, \quad (7)$$

$n'_A(E_\perp; z)$ — концентрация атомов сорта $A$, усредненная по доступной области $R(E_\perp)$ [4]:

$$n'_A(E_\perp; z) = \frac{1}{S(E_\perp)} \int_{R(E_\perp)} n_A(\mathbf{r}; z)d\mathbf{r}, \quad (8)$$

$S(E_\perp)$ — площадь области $R(E_\perp)$.

Аналогичное выражение, записанное для ионов с энергией $E < 0.5A_1(m_p/m_e)E_{\perp c}$, для которых $R_{ch} \to \infty$, а распределение по поперечным энергиям принимает форму распределения Больцмана [4] с низкой поперечной температурой $T_\perp \approx (2m_e/A_1 m_p)E$, имеет вид:

$$R^*_{ch}(z) = \left[\sum_A \frac{a}{z}\int_0^z dz' \int_0^\infty d\varepsilon\, n'_A(\varepsilon; z')e^{-\alpha\varepsilon} \int_{\theta_0(\varepsilon)}^d d\theta\, \frac{d\sigma_A(\theta)}{d\theta}\right]^{-1}, \quad (9)$$

где $\alpha = E_{\perp c}/T_\perp$.

В дальнейшем мы будет считать, что функция $n_A(\mathbf{r}; z)$ факторизуется и определяется соотношением:

$$n_A(\mathbf{r}; z) = n_{zA}(z)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A), \quad (10)$$

где $\mathbf{r}_A$ — вектор, характеризующий положение внедренных атомов относительно оси нанотрубок, а $n_{zA}(z)$ — „профиль залегания“ внедренных атомов.

Кроме того, будем считать, что $S(E_\perp) \sim E_\perp$ (гармоническое приближение), а для дифференциального сечения рассеяния ионов $d\sigma_A(\theta)$ будем использовать выражение [6]

$$d\sigma_A(\theta) = \frac{0.9\pi^3 Z_1 Z_2^{(A)} e^2 a_{TF}^{(A)}}{E}\, \frac{(\pi - \theta)}{\theta^2(2\pi - \theta)^2}\, d\theta, \quad (11)$$

которое соответствует обратноквадратичному потенциалу взаимодействия ионов с внедренными атомами и дает удовлетворительную точность при рассеянии ионов на большие углы $\theta$ (в формуле (11) $Z_1 e$ и $Z_2^{(A)} e$ — заряды атомных ядер ионов и внедренных в нанотрубки атомов соответственно, а $a_{TF}^{(A)}$ — длина экранирования потенциала их взаимодействия: $a_{TF}^{(A)} \approx 0.885 a_B(\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2^{(A)}})^{-2/3}$, где $a_B$ — боровский радиус).

В этом случае для ионов высоких энергий, каналированных в нехиральных нанотрубках, из (6)–(8) получаем:

$$R^*_{ch}(z) \approx \left[\sum_A \frac{2.7\pi Z_1 Z_2^{(A)} e^2 a_{TF}^{(A)} \bar{n}_{zA}(z)}{2(R_0 - r_c)^2\sqrt{EE_{\perp c}}} \right.$$
$$\left. \times \left\{ \operatorname{arcth}\sqrt{1 - \frac{U(\mathbf{r}_A)}{E_{\perp c}}} - \frac{1}{3}\left(4 - \frac{U(\mathbf{r}_A)}{E_{\perp c}}\right)\sqrt{1 - \frac{U(\mathbf{r}_A)}{E_{\perp c}}} \right\}\right]^{-1}, \quad (12)$$

где $R_0$ — радиус нанотрубок, $r_c$ — расстояние наибольшего сближения ионов с их стенками [5], $U(\mathbf{r}_A)$ — значение потениала нанотрубок в месте расположения внедренных атомов, а $\bar{n}_{zA}(z)$ — среднее число внедренных атомов (на единицу длины), встреченных каналированными ионами, которые оказались на глубине $z$:

$$\bar{n}_{zA}(z) = \frac{1}{z}\int\limits_0^z n_{zA}(z')dz'. \tag{13}$$

Аналогично для ионов низких энергий из (7)–(11) находим:

$$R^*_{ch}(z) \approx \left[\sum_A \frac{0.9\pi Z_1 Z_2^{(A)} e^2 a_{TF}^{(A)} \bar{n}_{zA}(z)}{4(R_0 - r_c)^2 T_\perp} \sqrt{\frac{E_{\perp c}}{E}}\, \tilde{E}i\left(\frac{U(\mathbf{r}_A)}{T_\perp}\right)\right]^{-1}, \tag{14}$$

где $\tilde{E}i(y)$ — модифицированная интегральная показательная функция.

Забегая вперед, отметим, что последнее выражение оказывается справедливым в области низких энергий ионов, каналированных не только в нехиральных, но и в хиральных углеродных нанотрубках, что является следствием независимости распределения таких ионов по поперечным энергиям от хиральности нанотрубок [3,4].

В случае хиральности нанотрубок $\mathbf{x} \equiv (\mathbf{r}, \mu, E_\perp)$, где $\mu$ — момент импульса ионов относительно оси нанотрубок [3]. При этом для ионов высоких энергий $E > 0.5A_1(m_p/m_e)E_{\perp c}$ формула (5) для длины деканалирования ионов на внедренных атомах приобретает вид:

$$R^*_{ch}(z) = \left[\sum_A \frac{27}{z}\int\limits_0^z dz' \int\limits_0^1 d\varepsilon \int\limits_0^\varepsilon d\mu' n'_A(\mu', \varepsilon; z)\frac{(1-\varepsilon)^4}{(1-\mu'^2)^2}\int\limits_{\theta_0(\mu',\varepsilon)}^{\pi} d\theta\, \frac{d\sigma_A(\theta)}{d\theta}\right]^{-1}, \tag{15}$$

где

$$\theta_0(\mu, E_\perp) \approx \sqrt{\frac{E_{\perp c} - (E_\perp - \omega_0\mu)}{E}}, \tag{16}$$

$\omega_0$ — частота радиальных колебаний ионов в нанотрубках, а $n'_A(\mu, E_\perp; z)$ — концентрация внедренных атомов сорта $A$, усредненная по доступной области $R(\mu, E_\perp)$ [3]:

$$n'_A(\mu, E_\perp; z) = \frac{1}{2\pi C(\mu, E_\perp)} \int\limits_{R(\mu, E_\perp)} \frac{n_A(\mathbf{r}; z)d\mathbf{r}}{\sqrt{E_\perp - \frac{\mu^2}{2A_1 m_p r^2} - U(r)}}. \tag{17}$$

$C(\mu, E_\perp)$ в формуле (17) — это нормировочный множитель, пропорциональный периоду радиальных колебаний [3]. Считая этот период постоянным (гармоническое приближение), с учетом (10) и (11) из (15)–(17) получаем:

$$R_{ch}^*(z) \approx \left[ \sum_A \frac{0.12\pi Z_1 Z_2^{(A)} e^2 a_{TF}^{(A)} \bar{n}_{zA}(z)}{(R_0 - r_c)^2 \sqrt{E E_{\perp c}}} \left[ 1 - \frac{U_{r_A}}{E_{\perp c}} \right]^{-1/2} \right]^{-1}. \qquad (18)$$

При этом для ионов с $\mu = 0$, которые остаются каналированными на больших глубинах $z$ проникновения в хиральные нанотрубки [3],

$$R_{ch}^*(z) \approx \left[ \sum_A \frac{0.05\pi Z_1 Z_2^{(A)} e^2 a_{TF}^{(A)} \bar{n}_{zA}(z)}{(R_0 - r_c)^2 \sqrt{E E_{\perp c}}} \left[ 1 - \frac{U(r_A)}{E_{\perp c}} \right]^{-4} \right]^{-1}. \qquad (19)$$

Таким образом, в отличие от длин деканалирования на электронах [3,4] длины деканалирования ионов на атомах, внедренных во внутренние полости углеродных нанотрубок, растут, как $\sqrt{E}$, вместе с энергией $E$ ионов. Кроме того, они существенно зависят от расположения этих атомов в поперечной плоскости нанотрубок. Эта зависимость представляет собой своего рода „flux-peaking"-эффект для деканалирования на внедренных атомах и может быть использована для экспериментального определения наличия и местоположения таких атомов внутри углеродных нанострубок.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 08-07-00104).

## Список литературы


[1] *Artru X., Fomin S.P., Shulga N.F.* et al. // Phys. Rep. 2005. V. 412. P. 89–189.
[2] *Miskovic Z.L.* // Radiat. Eff. 2007. V. 162. № 3–4. P. 185–205.
[3] *Матюхин С.И., Гришина С.Ю.* // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. В. 8. С. 12–18.
[4] *Матюхин С.И., Гришина С.Ю.* // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32. В. 1. С. 27–34.
[5] *Матюхин С.И., Фроленков К.Ю.* // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33. В. 2. С. 23–30.
[6] *Готт Ю.В.* Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях. М. Атомиздат. 1978.