

10

Критические параметры каналирования в нанотрубках

© С.И. Матюхин, К.Ю. Фроленков

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

Поступило в Редакцию 6 апреля 2006 г.
В окончательной редакции 29 июня 2006 г.

Рассмотрен вопрос о критических параметрах каналирования, которые играют определяющую роль в проблеме деканалирования ионов из углеродных нанотрубок. Получены аналитические выражения для пороговой энергии каналирования, критической поперечной энергии, для расстояния наибольшего сближения частиц со стенками нанотрубок и критических углов каналирования в хиральных и нехиральных нанотрубках.

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

В настоящее время явление каналирования частиц в углеродных нанотрубках, которое впервые обсуждалось в работах [1,2], предлагается использовать при разработке новых источников монохроматического излучения [3,4], для получения и управления пучками нанометровых сечений [5–10], а также для анализа свойств и структуры нанотрубок [10]. Особого внимания заслуживает возможность применения этого эффекта для модификации свойств нанотрубок методом ионного легирования [8–10].

В настоящей работе рассмотрен вопрос о критических параметрах каналирования, которые играют определяющую роль в проблеме деканалирования ионов из нанотрубок. Получены аналитические выражения для пороговой энергии каналирования, критической поперечной энергии частиц, для расстояния их наибольшего сближения со стенками нанотрубок и критических углов каналирования в хиральных и нехиральных нанотрубках.

Как известно [11], наличие критических параметров каналирования определяется существованием двух механизмов деканалирования при сближении частиц со стенками канала: потери корреляций при столкно-

вениях с образующими канал атомами [12] и потери устойчивости движения вследствие возникновения параметрической неустойчивости [13]. В приближении стандартного межатомного потенциала Линдхарда критерий потери корреляций приводит к следующей неявной зависимости от полной энергии E расстояния $r_c(E)$ наибольшего сближения частиц со стенками хиральных нанотрубок:

$$E = \frac{3\pi Z_1 Z_2 e^2 a_{TF}^2}{4} \cdot \left[\frac{1}{\sqrt{[(2R - r_c)^2 + 3a_{TF}^2]^3}} + \frac{1}{\sqrt{[r_c^2 + 3a_{TF}^2]^3}} \right]. \quad (1)$$

При этом критический угол каналирования $\psi_c(E)$ равен

$$\psi_c = \arctg \left(\sqrt{\frac{8N_{pl} \sqrt{[(2R - r_c)^2 + 3a_{TF}^2](r_c^2 + 3a_{TF}^2)]^3}}{3a_{TF}^2} \times \frac{\sqrt{r_c^2 + 3a_{TF}^2} + \sqrt{(2R - r_c)^2 + 3a_{TF}^2} - 2\sqrt{R^2 + 3a_{TF}^2}}{\sqrt{[r_c^2 + 3a_{TF}^2]^3} + \sqrt{[(2R - r_c)^2 + 3a_{TF}^2]^3}}} \right), \quad (2)$$

критическая поперечная энергия $E_{\perp c}(E)$ определяется выражением

$$E_{\perp c} = 2\pi Z_1 Z_2 e^2 N_{pl} \left[\sqrt{r_c^2 + 3a_{TF}^2} + \sqrt{(2R - r_c)^2 + 3a_{TF}^2} - 2\sqrt{R^2 + 3a_{TF}^2} \right], \quad (3)$$

а пороговая энергия каналирования E_c равна

$$E_c \approx \frac{3\pi Z_1 Z_2 e^2 a_{TF}^2}{2R^3}. \quad (4)$$

Аналогичные выражения, полученные для хиральных нанотрубок, исходя из критерия потери устойчивости движения, имеют вид

$$E = \frac{\pi Z_1 Z_2 e^2}{2 \left[\sqrt{r_s^2 + 3a_{TF}^2} + \sqrt{(2R - r_s)^2 + 3a_{TF}^2} - 2\sqrt{R^2 + 3a_{TF}^2} \right]} \times \left[\frac{2R - r_s}{\sqrt{(2R - r_s)^2 + 3a_{TF}^2}} - \frac{r_s}{\sqrt{r_s^2 + 3a_{TF}^2}} \right]^2, \quad (5)$$

$$\psi_S = \arctg \left(2N_{pl}^{1/2} \left[\sqrt{r_S^2 + 3a_{TF}^2} + \sqrt{(2R - r_S)^2 + 3a_{TF}^2} - 2\sqrt{R^2 + 3a_{TF}^2} \right] \left[\frac{2R - r_S}{\sqrt{(2R - r_S)^2 + 3a_{TF}^2}} - \frac{r_S}{\sqrt{r_S^2 + 3a_{TF}^2}} \right]^{-1} \right), \quad (6)$$

$$E_{\perp S} = 2\pi Z_1 Z_2 e^2 N_{pl} \left[\sqrt{r_S^2 + 3a_{TF}^2} + \sqrt{(2R - r_S)^2 + 3a_{TF}^2} - 2\sqrt{R^2 + 3a_{TF}^2} \right], \quad (7)$$

$$E_S \approx 4E_c \approx \frac{6\pi Z_1 Z_2 e^2 a_{TF}^2}{R^3}. \quad (8)$$

Формулы (1)–(8) учитывают тот факт [8], что непрерывный потенциал взаимодействия частиц со стенками хиральных нанотрубок может быть представлен в виде суммы потенциалов двух изолированных атомных плоскостей, расположенных на расстоянии $2R$ друг от друга. В этих формулах R — это радиус нанотрубки, $N_{pl} = 4/(3\sqrt{3}a^2)$ — поверхностная плотность ее атомов ($a \approx 0.142$ nm — длина углерод-углеродных связей), $Z_1 e$ и $Z_2 e$ — заряды атомных ядер частицы и мишени соответственно ($Z_2 = 6$), a_{TF} — радиус экранирования межатомного взаимодействия: $a_{TF} \approx 0.885 a_B (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3}$, где a_B — боровский радиус. Индекс c относится к критическим параметрам, определяемым критерием потери корреляций; индекс S — критерием потери устойчивости.

В отличие от хиральных нехиральные armchair- и zigzag-нанотрубки можно представить как совокупность небольшого числа плотноупакованных цепочек атомов, параллельных оси нанотрубок и расположенных определенным образом по периметру цилиндра [4,10]. Поэтому непрерывный потенциал взаимодействия частиц со стенками таких нанотрубок может быть представлен в виде суммы потенциалов изолированных атомных цепочек. При этом расстояние наибольшего сближения $r_c(E)$, рассчитанное по критерию потери корреляций, в приближении межатомного потенциала Линдхарда определяется неявным уравнением

$$E = \frac{3Z_1 Z_2 e^2 d}{4a_{TF}^2} S_1(r_c), \quad (9)$$

где

$$S_1(r_c) = \sum_{i=1}^{N_s} \left[\frac{2a_{TF}^4 [4R(R-r_c)(1-\cos\varphi_i) + 2r_c^2 + 3a_{TF}^2] [R(1-\cos\varphi_i) - r_c]^2}{[2R(R-r_c)(1-\cos\varphi_i) + r_c^2 + 3a_{TF}^2]^2 [2R(R-r_c)(1-\cos\varphi_i) + r_c^2]^2} - \frac{a_{TF}^4}{[2R(R-r_c)(1-\cos\varphi_i) + r_c^2 + 3a_{TF}^2][2R(R-r_c)(1-\cos\varphi_i) + r_c^2]} \right], \quad (10)$$

критический угол каналирования $\psi_c(E)$ равен

$$\psi_c = \arctg \left(\sqrt{\frac{\frac{4a_{TF}^2}{3d^2 S_1(r_c)} \left[\sum_{i=1}^{N_s} \ln \left[1 + \frac{3a_{TF}^2}{2R(R-r_c)(1-\cos\varphi_i) + r_c^2} \right] - N_s \ln \left(1 + \frac{3a_{TF}^2}{R^2} \right) \right]}{1}} \right), \quad (11)$$

критическая поперечная энергия $E_{\perp c}(E)$ определяется выражением:

$$E_{\perp c} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d} \left[\sum_{i=1}^{N_s} \ln \left[1 + \frac{3a_{TF}^2}{2R(R-r_c)(1-\cos\varphi_i) + r_c^2} \right] - N_s \ln \left(1 + \frac{3a_{TF}^2}{R^2} \right) \right], \quad (12)$$

а пороговая энергия каналирования E_c равна

$$E_c \approx \frac{3Z_1 Z_2 e^2 a_{TF}^2 d}{R^4} \left(\sum_{i=1}^{N_s} \cos^2 \varphi_i - \frac{N_s}{4} \right), \quad (13)$$

где φ_i — азимутальный угол, характеризующий положение i -й цепочки в поперечной плоскости нанотрубки, N_s — полное число цепочек.

Аналогичные выражения, полученные по критерию устойчивости, имеют вид

$$E = \frac{9Z_1 Z_2 e^2 d}{a_{TF}^2} S_2(r_s), \quad (14)$$

$$S_2(r_S) = \frac{\left[\sum_{i=1}^{N_s} \frac{a_{TF}^3 [R(1 - \cos \varphi_i) - r_S]}{[2R(R - r_S)(1 - \cos \varphi_i) + r_S^2 + 3a_{TF}^2][2R(R - r_S)(1 - \cos \varphi_i) + r_S^2]} \right]^2}{\sum_{i=1}^{N_s} \ln \left(1 + \frac{3a_{TF}^2}{2R(R - r_S)(1 - \cos \varphi_i) + r_S^2} \right) - N_s \ln \left(1 + \frac{3a_{TF}^2}{R^2} \right)}; \quad (15)$$

$$\psi_S = \arctg \left(\frac{a_{TF}}{3dS_2(r_S)} \right) \times \sum_{i=1}^{N_s} \frac{a_{TF}^3 [R(1 - \cos \varphi_i) - r_S]}{[2R(R - r_S)(1 - \cos \varphi_i) + r_S^2 + 3a_{TF}^2][2R(R - r_S)(1 - \cos \varphi_i) + r_S^2]}; \quad (16)$$

$$E_{\perp S} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d} \left[\sum_{i=1}^{N_s} \ln \left[1 + \frac{3a_{TF}^2}{2R(R - r_S)(1 - \cos \varphi_i) + r_S^2} \right] - N_s \ln \left(1 + \frac{3a_{TF}^2}{R^2} \right) \right]; \quad (17)$$

$$E_S = 4E_c \approx \frac{12Z_1 Z_2 e^2 a_{TF}^2 d}{R^4} \left(\sum_{i=1}^{N_s} \cos^2 \varphi_i - \frac{N_s}{4} \right). \quad (18)$$

Графики зависимостей $\psi_c(E)$ (сплошные кривые) и $\psi_S(E)$ (штриховые кривые), рассчитанные по полученным формулам для протонов, внедряемых в хиральные нанотрубки с индексами хиральности (11, 9) и в armchair-нанотрубки близкого радиуса с индексами (10, 10), представлены на рис. 1 и 2 соответственно. На этих же рисунках изображены графики зависимостей $\psi_c(E)$, рассчитанные по общепринятым формулам Линдхарда [12] (пунктир).

Построенные графики показывают, что в области низких энергий частиц как в хиральных, так и в нехиральных нанотрубках выполняется неравенство $\psi_c(E) > \psi_S(E)$. Это значит, что определяющим механизмом выведения таких частиц из режима каналирования является параметрическая неустойчивость их движения: по достижении значения $\psi_S(E)$ скорость увеличения угла каналирования ψ резко возрастает в результате параметрической неустойчивости, и его величина быстро

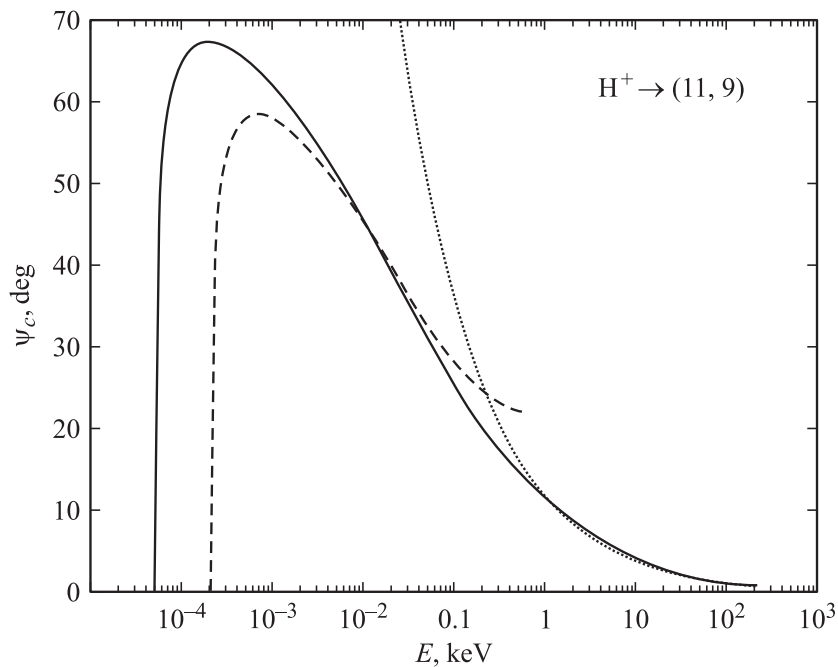


Рис. 1. Критические углы каналирования протонов в хиральных нанотрубках с индексами хиральности (11,9), рассчитанные по критерию потери корреляций (сплошная кривая), по критерию устойчивости (штриховая кривая) и по общепринятой формуле Линдхарда, справедливой для частиц высоких энергий (пунктир).

приближается к значению $\psi_c(E)$, при котором частица деканализирует в результате рассеяния на большой угол в парном столкновении с одним из атомов нанотрубки. При каналировании в нехиральных нанотрубках (рис. 2) такая ситуация сохраняется вплоть до весьма высоких энергий частиц, а в области высоких энергий оба механизма — потеря устойчивости и потеря корреляций — дают практически одинаковую величину критических углов каналирования: $\psi_S(E) \approx \psi_c(E)$. Наоборот, в хиральных нанотрубках (рис. 1) с ростом энергии частиц довольно скоро начинает преобладать механизм деканализирования, связанный с потерей корреляций: $\psi_c(E) < \psi_S(E)$.

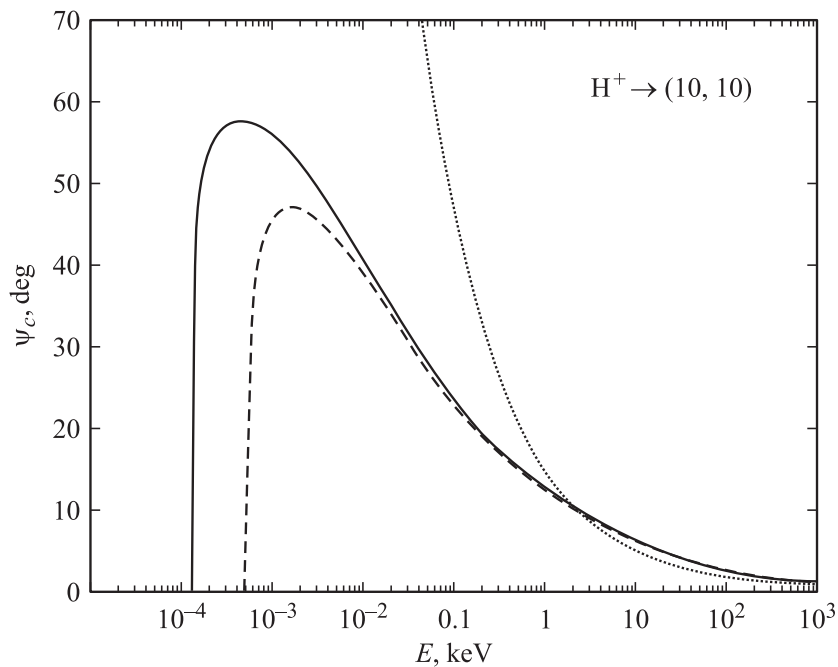


Рис. 2. Критические углы каналирования протонов в armchair-нанотрубках с индексами хиральности (10, 10), рассчитанные по критерию потери корреляций (сплошная кривая), по критерию устойчивости движения (штриховая кривая) и по общепринятой формуле Линдхарда, справедливой для частиц высоких энергий (пунктир).

Как и следовало ожидать, в области высоких энергий значения критических углов каналирования могут быть рассчитаны по приближенным формулам Линдхарда [12]. Различия в критических углах каналирования в хиральных и нехиральных нанотрубках в этом случае определяются структурными особенностями нанотрубок: испытывая близкие столкновения, частицы высоких энергий деканалируют при рассеянии на отдельных атомных цепочках, образующих нехиральные нанотрубки, или при взаимодействии с небольшими, практически плоскими участками цилиндрической поверхности, образованной атомами хиральных нанотрубок. Однако в области низких энергий частиц

поведение критических углов каналирования существенно отличается от предсказанного Линдхардом: вследствие конечной ширины нанотрубок эти углы принимают свое максимальное значение (максимум функции $\psi_c(E)$ приходится на энергию $E = 4E_c$, а $\psi_S(E)$ — на энергию $E = 4E_S = 16E_c$) и обращаются в нуль при энергиях частиц, меньших пороговой энергии каналирования.

К сожалению, в области низких энергий частиц межатомные потенциалы типа Томаса–Ферми не обеспечивают достаточной точности вычислений, поэтому при энергиях $E \leq 0.05(1 + M_1/M_2)Z_1Z_2e^2/a_{TF}$, где M_1 и M_2 — соответственно массы частиц и атомов мишени, полученные формулы отражают лишь качественное поведение критических параметров каналирования в нанотрубках. Повысить точность расчетов можно, заменив произведение Z_1Z_2 в этих формулах величиной $0.143Z_1Z_2$. Такая замена отвечает переходу к более реалистичному в этом диапазоне энергий степенному потенциалу $\sim r^{-3}$ [14,15] и приводит к сдвигу изображенных на рис. 1 и 2 графиков вниз по шкале энергий.

Список литературы

- [1] Klimov V.V., Letokhov V.S. // Phys. Lett. A. 1996. V. 222. P. 424.
- [2] Геворкян Л.Г., Испирян К.А., Испирян Р.К. // Письма в ЖЭТФ. 1997. Т. 66. С. 322.
- [3] Zhevago N.K., Glebov V.I. // Phys. Lett. A. 1998. V. 250. P. 360.
- [4] Жеваго Н.К., Глебов В.И. // ЖЭТФ. 2000. Т. 118. В. 3. С. 579.
- [5] Biryukov V.M., Bellucci S. // Phys. Lett. B. 2002. V. 542. P. 111.
- [6] Bellucci S., Biryukov V.M., Chesnokov Yu.A., Guidi V., Scandale W. // Nucl. Instr. Meth. B. 2003. V. 202. P. 236.
- [7] Bellucci S., Biryukov V.M. // CERN Courier. 2004. V. 5. P. 19.
- [8] Матюхин С.И., Гришина С.Ю. // Письма в ЖТФ. 2004. Т. 30. В. 20. С. 76.
- [9] Матюхин С.И., Гришина С.Ю. // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. В. 8. С. 12.
- [10] Матюхин С.И., Гришина С.Ю. // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32. В. 1. С. 27.
- [11] Рожков В.В., Дюльдя С.В. // Письма в ЖТФ. 1984. Т. 10. В. 19. С. 1182.
- [12] Lindhard J. // Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 1965. V. 34. N 14. P. 49.
- [13] Кумахов М.А., Муралев В.А. // Изв. АН СССР. Сер. Физ. 1973. Т. 37. С. 2585.
- [14] Lindhard J., Nielsen V., Scharff M. // Mat.-Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 1968. V. 36. N 10. P. 1.
- [15] Готт Ю.В. Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях. М.: Атомиздат, 1978.