

01;02;06

## **Эффективность отклонения ионов изогнутыми нанотрубками**

© С.И. Матюхин

Орловский государственный технический университет

E-mail: matyukhin@ostu.ru

*В окончательной редакции 5 сентября 2008 г.*

Представлены результаты исследования каналирования ионов в изогнутых углеродных нанотрубках. Получены простые аналитические выражения для критических параметров каналирования, длины деканалирования и эффективности отклонения ионных пучков изогнутыми нанотрубками. Показано, что эти образования могут с успехом использоваться для управления хорошо сфокусированными ионными пучками нанометровых сечений.

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

Уже в первых теоретических работах [1,2], посвященных исследованию эффекта каналирования частиц в углеродных нанотрубках, было показано, что каналированные ионы могут эффективно отклоняться нанотрубками от своего прямолинейного движения. Более того, дальнейшее изучение каналирования ионов в нанотрубках [3] позволило выявить ряд преимуществ, которые дают нанотрубки по сравнению с обычными кристаллами, а именно: 1) более широкие, чем у кристаллов, каналы и слабое деканалирование приводят к тому, что в режиме каналирования частицы проходят в нанотрубках намного большее расстояние, чем в кристаллах, что важно, например, с точки зрения транспортировки пучков при помощи нанотрубок; 2) используя жгуты нанотрубок, можно транспортировать более широкие ионные пучки; 3) большие значения критических углов каналирования в нанотрубках (до 1 rad [4]) приводят к меньшим потерям частиц при транспортировке ионных пучков, что сочетается с низкими потерями их энергии; 4) в отличие от кристаллов углеродные нанотрубки позволяют реализовать полное трехмерное управление ионными пучками путем соответствующего изгиба нанотрубок, осуществляемого в режиме реального времени.

Эти преимущества позволяют использовать эффект каналирования в нанотрубках не только для ионного легирования самих нанотрубок [5–8], что оказывается важным с точки зрения их применения в прикладной химии, материаловедении и нанoeлектронике, но и для получения и управления хорошо сфокусированными пучками нанометровых сечений. В свою очередь такие пучки в сочетании с методикой каналирования можно использовать для анализа и модификации структуры и свойств как традиционных (кристаллические твердые тела), так и нетрадиционных материалов (фуллериты, жгуты нанотрубок и т.д.) в весьма ограниченной области пространства — порядка нескольких десятков нанометров, а также в таких областях, как целенаправленное введение лекарственных средств и лучевая терапия на клеточном уровне в медицине; управление пучками высоких энергий в ускорительной технике; манипулирование ионными пучками низких энергий в плазменных технологиях; управление перемещением молекул в биологических исследованиях и т.д.

Динамика и кинетика каналирования ионов в идеализированных прямых нанотрубках были изучены нами в работах [6–8]. В настоящей работе представлены результаты исследования этого эффекта в изогнутых углеродных нанотрубках.

С теоретической точки зрения каналирование в изогнутых нанотрубках во многом аналогично каналированию в изогнутых кристаллах [9,10]: оно может быть легко описано во вращающейся вместе с каналированными частицами системе координат, центр вращения которой связан с центром кривизны нанотрубок. При этом кривизна нанотрубок приводит к появлению в уравнениях движения частиц с энергией  $E$  центробежной силы  $2E/R$ , что можно трактовать как изменение эффективного значения потенциала  $U(\mathbf{r})$  нанотрубок в направлении  $y$ , совпадающем с радиусом  $R$  их кривизны:  $U(\mathbf{r}) \rightarrow U_{eff}(\mathbf{r})$ , где

$$U_{eff}(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) - \frac{2E}{R} y, \quad (1)$$

$\mathbf{r} \equiv (x, y)$  — радиус-вектор, характеризующий положение частиц в поперечной плоскости внутри нанотрубок.

При изгибе нанотрубок минимум эффективного потенциала (1) смещается к их внешним стенкам, что приводит к соответствующему смещению траекторий каналированных частиц. Одновременно уменьшается величина потенциального барьера, запирающего частицы внутри

нанотрубок, и, как следствие, уменьшается критическая поперечная энергия каналирования  $E_{\perp c}$ :

$$E_{\perp c} = U_{eff}(R_0 - r_c) \approx U_0 \left\{ 1 - \frac{(R_0 - r_c)E}{RU_0} \right\}^2. \quad (2)$$

В формуле (2)  $R_0$  — это радиус нанотрубок,  $r_c$  — расстояние наибольшего сближения частиц с их стенками [4], а через  $U_0$  мы обозначили критическую поперечную энергию каналирования в прямых нанотрубках [4]:  $U_0 = U(R_0 - r_c)$ . Из-за роста центробежной силы в изогнутых нанотрубках эта энергия уменьшается с ростом энергии частиц и с увеличением кривизны  $1/R$  нанотрубок. Соответствующим образом изменяется и критический угол каналирования  $\psi_c$ :

$$\psi_c = \psi_{0c} \left\{ 1 - \frac{(R_0 - r_c)E}{RU_0} \right\}, \quad (3)$$

где  $\psi_{0c} = \sqrt{U_0/E}$  — величина критического угла каналирования в прямых нанотрубках [4].

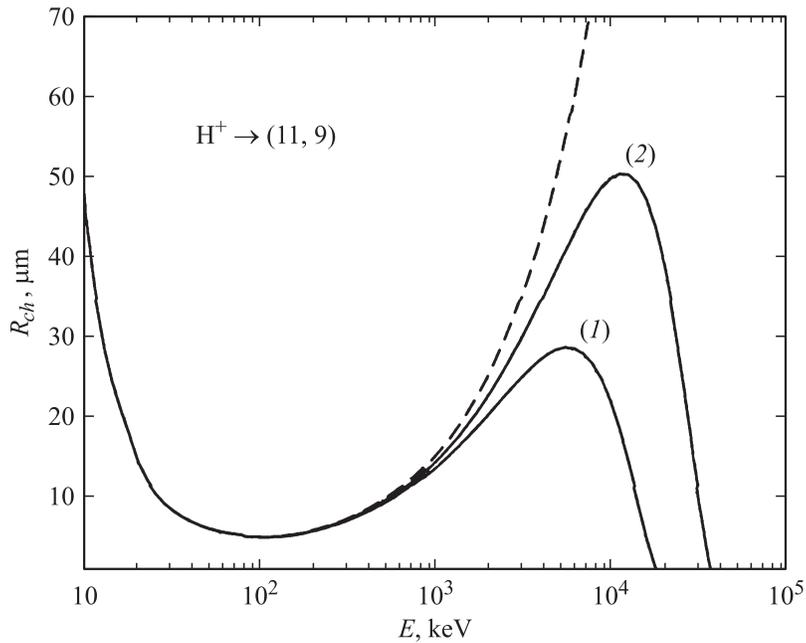
Критический радиус изгиба нанотрубок  $R_c$  можно определить как радиус, при котором значения  $E_{\perp c}$  и  $\psi_c$  становятся равными нулю. При этом минимум эффективного потенциала (1) достигает границы  $R_0 - r_c$  области стабильности. Отсюда, с учетом (2) и (3),

$$R_c = \frac{(R_0 - r_c)E}{U_0}. \quad (4)$$

Наряду с критическим радиусом изгиба  $R_c$  существует критическая энергия  $E_c$ , такая, что каналирование частиц с энергией  $E > E_c$  в нанотрубках с заданным радиусом изгиба  $R$  оказывается невозможным:

$$E_c = U_0 \frac{R}{R_0 - r_c}. \quad (5)$$

В результате смещения траекторий частиц к внешним стенкам нанотрубок частицы с той же поперечной энергией, двигаясь через области с более высокой плотностью электронов и ядер, испытывают более сильное рассеяние, чем в прямых нанотрубках. Это приводит к изменению длины деканалирования ионов  $R_{ch}$ . Однако при изгибе нанотрубок, далеко от критического, увеличением эффективной электронной плотности и вероятности ядерного рассеяния при



**Рис. 1.** Зависимость длины деканализации протонов в хиральных нанотрубках (11, 9) от энергии частиц  $E$  в прямых (пунктир) и изогнутых нанотрубках (сплошные кривые) с радиусами кривизны  $R = 0.5 \cdot 10^6 R_0$  (1) и  $R = 10^6 R_0$  (2).

расчете соответствующих парциальных длин деканализации можно пренебречь, поэтому основным фактором, определяющим изменение длины деканализации, становится изменение критической поперечной энергии (2):

$$R_{ch} \approx R_{ch}^0 \left\{ 1 - \frac{(R_0 - r_c E)}{R U_0} \right\}^2, \quad (6)$$

где  $R_{ch}^0$  — длина деканализации ионов в прямых нанотрубках [7,8].

Рассчитанные согласно (6) длины деканализации протонов в изогнутых хиральных нанотрубках (11, 9) представлены на рис. 1. Длина деканализации в таких нанотрубках в области высоких энергий растет приблизительно линейно с энергией частиц, что связано с уменьшением интенсивности их электронного рассеяния с ростом

энергии. Сильная зависимость критической поперечной энергии  $E_{\perp c}$  от энергии  $E$  в изогнутых нанотрубках радикально изменяет эту линейную зависимость: длина деканалирования ионов в изогнутых нанотрубках растет с энергией медленнее, чем в прямых (кривые 1 и 2).

Начиная с некоторой энергии  $E_m(R)$ , уменьшение электронного рассеяния частиц с ростом их энергии перестает компенсировать снижение  $E_{\perp c}$ . Вследствие этого длина деканалирования частиц в изогнутых нанотрубках имеет максимум при  $E_m(R)$ , а затем уменьшается до нуля при достижении критической энергии каналирования (5). Наличие этого максимума позволяет говорить об эффективности отклонения ионных пучков изогнутыми нанотрубками.

Как известно [9,10], эффективность  $P_d$  отклонения пучков равномерно изогнутыми кристаллами определяется как произведение вероятности  $P_{ch}^0$  захвата частиц в режим каналирования на входе в кристаллы и вероятности  $\exp(-L/R_{ch})$  того, что, двигаясь в режиме каналирования, частицы пройдут весь кристалл длиной  $L$ . Таким образом, эффективность  $P_d$  совпадает с вероятностью остаться в режиме каналирования на глубине  $z = L$  и при отклонении ионов нанотрубками может быть получена путем интегрирования соответствующей функции  $\Phi(E_{\perp}; z)$  распределения частиц по поперечным энергиям  $E_{\perp}$  [7,8] по доступной области  $0 \leq E_{\perp} \leq E_{\perp c}$ :

$$P_d = \int_0^{E_{\perp c}} \Phi(E_{\perp}; L) dE_{\perp}. \quad (7)$$

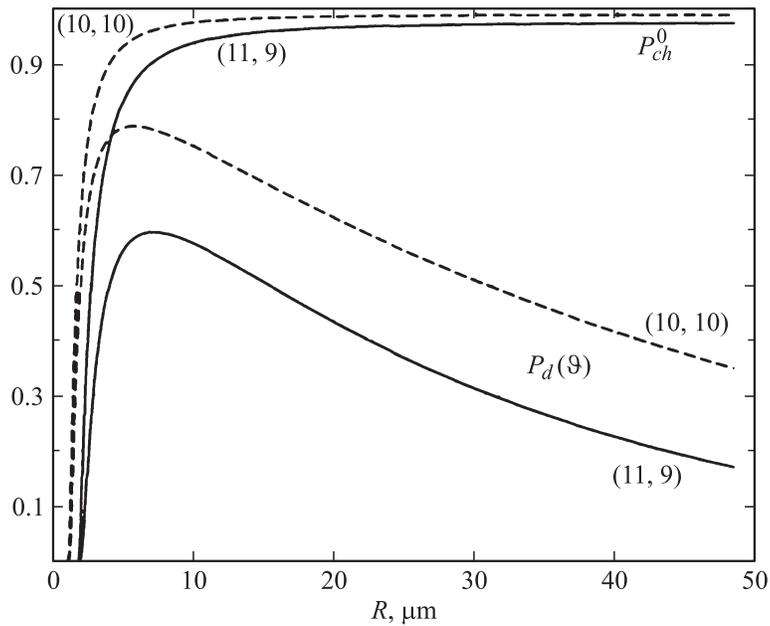
При отклонении частиц на заданный угол  $\vartheta = L/R$  эта эффективность принимает вид:

$$P_d(\vartheta) = P_{ch}^0 \exp\left(-\frac{\vartheta R}{R_{ch}}\right), \quad (8)$$

где  $R_{ch}$  — длина деканалирования (6), а  $P_{ch}^0$  определяется выражением:

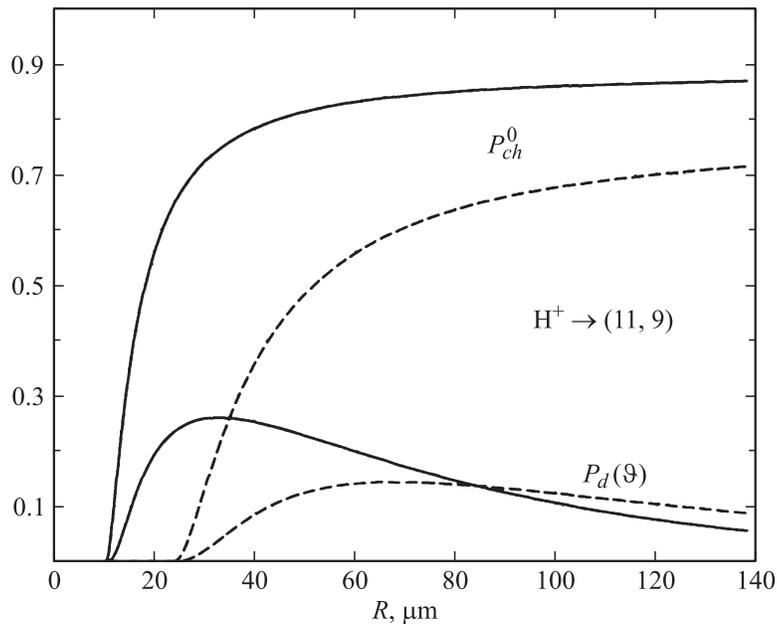
$$P_{ch}^0 \approx \left(1 - \frac{2r_c}{R_0}\right) \left\{1 - \frac{(R_0 - r_c)^2 E^2}{R^2 U_0^2}\right\} \left\{1 - \frac{\psi^2}{\psi_{0c}^2 \left\{1 - \frac{(R_0 - r_c)E}{RU_0}\right\}^2}\right\}^{\gamma}, \quad (9)$$

где  $\psi$  — начальный угол влета частиц по отношению к оси изогнутых нанотрубок на входе в нанотрубки;  $\gamma = 3$  в случае хиральных и  $\gamma = 2$  в случае нехиральных нанотрубок.



**Рис. 2.** Зависимость вероятности  $P_{ch}^0$  захвата в режим каналирования и эффективности  $P_d(\vartheta)$  отклонения на угол  $\vartheta = 10^\circ$  для протонов с энергией 100 keV от радиуса изгиба  $R$  хиральных (сплошные кривые) и нехиральных (пунктир) нанотрубок. Индексы хиральности нанотрубок указаны в круглых скобках. Начальный угол  $\psi = 0.1^\circ$ .

Графики зависимости эффективности отклонения ионных пучков изогнутыми нанотрубками от их радиуса изгиба, рассчитанные по формулам (8)–(9), представлены на рис. 2. Расчеты проводились для протонов с энергией  $E = 100$  keV, которые поворачиваются на угол  $\vartheta = 10^\circ$  при помощи изогнутых хиральных (сплошные кривые) или нехиральных нанотрубок близкого радиуса (пунктир). Считалось, что индексы хиральности этих нанотрубок равны соответственно (11,9) и (10,10), а частицы влетают в нанотрубки под углом  $\psi = 0.1^\circ$  к их оси, что составляет примерно  $0.09\psi_{0c}$  в случае хиральных и  $0.07\psi_{0c}$  в случае нехиральных нанотрубок. На этом же рисунке приведены графики зависимости от радиуса изгиба вероятности  $P_{ch}^0$  захвата протонов в режим каналирования (9).



**Рис. 3.** Зависимость от радиуса изгиба  $R$  хиральных нанотрубок (11,9) вероятности  $P_{ch}^0$  захвата в режим каналирования и эффективности  $P_d(\vartheta)$  отклонения на угол  $\vartheta = 10^\circ$  для протонов с энергией 0.5 MeV (сплошные кривые) и 1 MeV (пунктир). Начальный угол  $\psi = 0.1^\circ$ .

На рис. 3 представлены аналогичные кривые, рассчитанные по формулам (8)–(9) для протонов с энергией 0.5 и 1 MeV, каналированных в хиральных нанотрубках (11,9).

Как показывают построенные графики, эффективность отклонения ионных пучков углеродными нанотрубками имеет максимум при радиусе изгиба нанотрубок, близком к  $3R_c$ . Уменьшение этой эффективности при  $R < 3R_c$  происходит за счет резкого уменьшения (6) длины деканалирования ионов и снижения (9) вероятности захвата частиц в режим каналирования. При больших  $R$  эффективность уменьшается из-за увеличения требуемой для отклонения на угол  $\vartheta$  длины  $L$  нанотрубок и связанного с этим роста доли деканалировавших частиц.

Оптимальный радиус изгиба нанотрубок может быть определен из выражений (8), (9) согласно условию  $\partial P_d(\vartheta, R)/\partial R = 0$ . При исполь-

зовании в качестве переменной приведенной кривизны  $\rho = R_c/R$  это условие принимает вид:

$$\vartheta/\vartheta_{\max} = \frac{2\rho^3(1-\rho)^2}{(1-3\rho)(1+\rho)}, \quad (10)$$

где параметр  $\vartheta_{\max}$  характеризует некоторый угол отклонения нанотрубками, близкий к максимально возможному:

$$\vartheta_{\max} = \frac{R_{ch}^0}{R_c} = \frac{R_{ch}^0 U_0}{R_0 E}. \quad (11)$$

Из (10) следует ограничение:  $\rho < 1/3$ , т.е. оптимальный радиус изгиба нанотрубок всегда больше  $3R_c$ .

Естественно ожидать, что увеличение угла отклонения частиц нанотрубками должно уменьшать эффективность отклонения, так как оно требует либо увеличения длины нанотрубок, либо их изгиба. И то, и другое приводит к росту деканализирования. При этом деканализирование оказывается наименьшим для ионов с энергией  $E \ll 0.5A(m_p/m_e)U_0$  [7,8].

В заключение отметим, что эффективность отклонения ионных пучков нехиральными нанотрубками оказывается несколько выше, чем хиральными нанотрубками близкого радиуса (рис. 2). Однако не следует забывать, что в отличие от хиральных нанотрубок частицы, двигаясь в режиме каналирования, могут покидать внутренние полости нехиральных нанотрубок, проскакивая между образующими их цепочками. (В случае хиральных нанотрубок такие переходы невозможны, так как они сопряжены с пересечением ионами достаточно плотной графитовой плоскости и приводят к деканализированию в результате однократного рассеяния на одном из атомов этой плоскости.) Таким образом, для управления ионными пучками при помощи нанотрубок выгоднее всего использовать не изолированные нанотрубки, а жгуты, состоящие из нехиральных нанотрубок.

## Список литературы

- [1] Klimov V.V., Letokhov V.S. // Phys. Lett. A. 1996. V. 222. P. 424–428.
- [2] Геворкян Л.Г., Испирян К.А., Испирян Р.К. // Письма в ЖЭТФ. 1997. Т. 66. С. 304–307.

- [3] *Miskovic Z.L.* // *Radiat. Eff.* 2007. V. 162. N 3–4. P. 185–205.
- [4] *Матюхин С.И., Фроленков К.Ю.* // *Письма в ЖТФ.* 2007. Т. 33. В. 2. С. 23–30.
- [5] *Матюхин С.И., Фроленкова Л.Ю.* // *Нанотехника.* 2006. № 6. С. 21–25.
- [6] *Матюхин С.И., Гришина С.Ю.* // *Письма в ЖТФ.* 2004. Т. 30. В. 20. С. 76–82.
- [7] *Матюхин С.И., Гришина С.Ю.* // *Письма в ЖТФ.* 2005. Т. 31. В. 8. С. 12–18.
- [8] *Матюхин С.И., Гришина С.Ю.* // *Письма в ЖТФ.* 2006. Т. 32. В. 1. С. 27–34.
- [9] *Viryikov V.M., Chesnokov Yu.A., Kotov V.I.* *Crystal Channeling and Its Application at High-Energy Accelerators.* Berlin: Springer-Verlag, 1997.
- [10] *Таратин А.М.* // *ЭЧАЯ.* 1998. Т. 29. В. 5. С. 1062–1118.