

**О.Е. Глухова<sup>1</sup>, А.С. Колесникова<sup>1</sup>, М.М. Слепченков<sup>1</sup>,  
Г.В. Торгашов<sup>2</sup>, Н.И. Сеницын<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>ФГБОУ ВПО Саратовский государственный университет  
им. Н.Г. Чернышевского

<sup>2</sup>Саратовский филиал Института радиотехники и электроники  
им. В.А. Котельникова РАН

## **Влияние плазмы на углеродную нанотрубку: мультимасштабное моделирование**

*Исследован процесс взаимодействия плазмы и углеродной нанотрубки диаметром 1,2 нм и длиной 2,3 нм. Исследования проводились с помощью оригинального гибридного метода QM/MM, сочетающего квантовый (QM) и молекулярно-механический (MM) подходы, хорошо зарекомендовавшие себя при изучении нестационарных процессов в многоатомных системах. Установлено, что в процессе взаимодействия плазмы и углеродной нанотрубки происходит деформация трубки.*

**Ключевые слова:** углеродная нанотрубка, плазма, мультимасштабное моделирование, квантовый метод, молекулярно-механистический метод.

Актуальной проблемой в создании элементной базы эмиссионной электроники является поиск материалов для надежного и долговечного автоэлектронного катода. Сложность выбора материала обусловлена необходимостью сочетания высокой прочности материала с предельно низкой работой выхода электронов и высокой плотностью тока эмиссии катода. На практике было показано, что решение этой проблемы возможно путем использования материалов, основу которых составляют углеродные наноструктуры. В частности, перспективным материалом для долговечных автоэмиссионных катодов являются углеродные нанотрубки. Было показано, что эмиссионный ток с поверхности углеродной нанотрубки может достигать  $\sim 300 \text{ A/cm}^2$  [1]. Аномально высокую плотность тока обеспечивает взрывная электронная эмиссия, проходящая в импульсном режиме с образованием плазмы [2-4].

Моделирование режима работы катода на основе углеродной нанотрубки в процессе эмиссии электронов с образованием плазмы является комплексной задачей, требующей учета как изменения атомной структуры исследуемой системы, так и перераспределения её электронной плотности под действием однородного электрического поля. Для успешного решения данной задачи необходимо сочетать методы молекулярной механики (MM) с квантово-механическими методами (QM), то есть проводить мультимасштабное моделирование QM/MM.

Целью данной работы является теоретическое исследование взаимодействия ионов плазмы и углеродной нанотрубки во внешнем однородном электрическом поле. Объектом исследования является углеродная нанотрубка диаметром 1,2 нм и длиной 2,3 нм, взаимодействующая с пятью положительными ионами углерода (рис.1). Процесс взаимодействия нанотрубки и плазмы во внешнем электрическом поле моделируются следующим образом: вдоль оси симметрии трубки задается внешнее однородное

электрическое поле, а вблизи поверхности трубки произвольным образом располагаются положительные ионы углерода с зарядом  $+1e$ . В представленной модели нанотрубка размещалась на жестко закрепленной подложке, в качестве которой использовался графеновый лист. Положительные ионы располагались на разном расстоянии от подложки: 0,49 нм, 1,89 нм, 1,99 нм, 2,09 нм и 2,29 нм. Напряженность внешнего электрического поля составляла  $1 \cdot 10^6$  В/см.

С помощью квантово-химического метода сильной связи рассчитывается распределение электронной плотности заряда по Малликену [5] в углеродной нанотрубке. Далее, с помощью метода молекулярной механики исследуется процесс взаимодействия нанотрубки и плазмы в электрическом поле. Координаты и скорости атомов исследуемой системы находились в результате решения уравнения Ньютона

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = \vec{F}, \quad (1)$$

где  $m$  – масса каждого атома,  $r$  – радиус – вектор каждого атома,  $F$  – результирующая сила, действующая на каждый атом исследуемой системы.

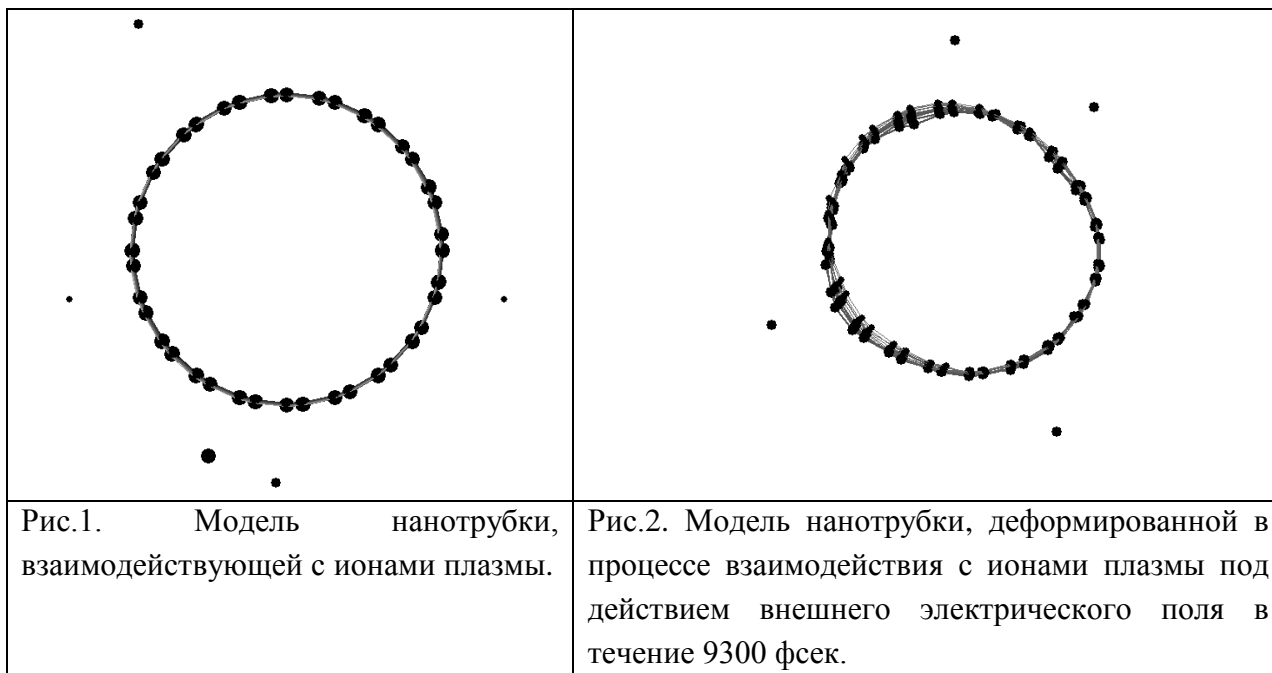
Выражение для результирующей силы имеет вид:

$$\vec{F}_i = -gradW + \vec{E} \cdot q_i + \sum_k \frac{q_i q_k}{4\pi\epsilon_0 r_{ik}^3} \vec{r}, \quad (2)$$

где первое слагаемое в выражении (2) характеризует силу взаимодействия соседних атомов нанотрубки.  $W$ - полная энергия системы. Второе слагаемое описывает силу, обусловленную действием внешнего однородного электрического поля напряженностью  $\vec{E}$ . Третье - силу, действующую на  $i$ -й атом с зарядом  $q_i$  со стороны положительно заряженного иона плазмы с номером  $k$  и зарядом  $q_k$ , равным  $+1e$ .  $r$ - расстояние между атомами трубки и ионами плазмами.

В ходе исследования выявлено, что под действием электрического поля ионы плазмы сначала ускоряются при движении вдоль трубки, а затем, достигнув подложки, отталкиваются от нее и движутся в противоположном внешнему электрическому полю направлении. В таблицах 1-5 представлены значения скоростей и координаты  $Z$  (относительно положения подложки) ионов плазмы в различные моменты времени. Из табличных данных видно, что ион плазмы, находящийся первоначально ближе всего к подложке, в процессе своего движения уходит на бесконечность вследствие сильного отталкивательного барьера, вызванного взаимодействием иона и нанотрубки.

Установлено, что в процессе взаимодействия ионов плазмы и углеродной нанотрубки происходит деформация трубки (рис.1, 2). Результаты расчетов распределения электронной плотности системы показали, что в областях атомной сетки нанотрубки, где



произошла деформация структуры, вызванная столкновением ионов плазмы с атомами трубки, наблюдается сгусток электронной плотности. Можно предположить, что именно с этих участков следует ожидать массовый выход электронов в процессе автоэлектронной эмиссии.

Таблица 1.

X,Y,Z - компоненты скоростей и координата Z иона плазмы, расположенного первоначально относительно подложки на расстоянии 0,49 нм

Время, фсек	X-компонента скорости иона, Å/фсек	Y -компонента скорости иона, Å/фсек	Z -компонента скорости иона, Å/фсек	Координата Z плазмы относительно подложки, Å
100	0,003	-0,006	-0,002	4,8
3300	0,003	-0,001	0,0024	2,93
5300	0,0043	-0,0017	0,0045	4,11
7300	3,34E-05	0,0007	-0,0086	1,07
8300	0,0008	0,0004	-0,048	-27,38

Таблица 2.

X,Y,Z - компоненты скоростей и координата Z иона плазмы, расположенного первоначально относительно подложки на расстоянии 1,89 нм

Время, фсек	X-компонента скорости иона, Å/фсек	Y -компонента скорости иона, Å/фсек	Z -компонента скорости иона, Å/фсек	Координата Z иона относительно подложки, Å
100	-0,0003	-0,0005	-0,0008	18,9
3300	-0,001	-0,001	0,005	15,7
5300	-0,0006	-0,0005	-0,0119	8,4
7300	0,0015	0,0021	0,0015	15,9
8300	-0,0035	0,0023	0,0277	6,1

Таблица 3.

X,Y,Z - компоненты скоростей и координата Z иона плазмы, расположенного первоначально относительно подложки на расстоянии 1,99 нм

Время, фсек	X-компонента скорости иона, Å/фсек	Y -компонента скорости иона, Å/фсек	Z -компонента скорости иона, Å/фсек	Координата Z иона относительно подложки, Å
100	0,0002	-0,0003	-0,0007	19,9
3300	0,002	0,0018	0,005	15,5
5300	0,0003	-0,0005	-0,0123	7,9
7300	-0,0034	0,00043	0,0005	14,5
8300	-0,0049	-0,0017	0,023	7,6

Таблица 4.

X,Y,Z - компоненты скоростей и координата Z иона плазмы, расположенного первоначально относительно подложки на расстоянии 2,09 нм

Время, фсек	X-компонента скорости иона, Å/фсек	Y -компонента скорости иона, Å/фсек	Z -компонента скорости иона, Å/фсек	Координата Z иона относительно подложки, Å
100	-0,004	-0,0006	-0,0006	20,9
3300	-3,00E-05	9,00E-09	0,0073	16,0
5300	-0,0005	-0,0006	-0,0086	14,9
7300	-0,00027	0,0022	0,008	15,0
8300	-0,0009	0,0029	-0,0325	3,0

Таблица 5.

X,Y,Z - компоненты скоростей и координата Z иона плазмы, расположенного первоначально относительно подложки на расстоянии 2,29 нм

Время, фсек	X-компонента скорости иона, Å/фсек	Y -компонента скорости иона, Å/фсек	Z -компонента скорости иона, Å/фсек	Координата Z иона относительно подложки, Å
100	0,005	-0,001	-0,001	22,9
3300	-0,0043	0,0002	0,007	16,1
5300	8,69E-05	0,0001	-0,007	16,6
7300	0,0009	-0,001	0,01	13,4
8300	-0,0024	0,0008	-0,03	3,7

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ (проект № 12-02-00807, проект № 13-08-00986), Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 годы, XLI очередь мероприятия 1.2.1, технические науки, номер заявки в информационной компьютеризированной системе «2012-1.2.1-12-000-2013-064», Президентской стипендии 2013-2016.

#### Библиографический список

1. Korenev S. The Study of Explosive Emission from Carbon Nanotubes // –AIP Conf. Proc. –650. –pp. 385-388.
2. Liao Q. High intensity, plasma-induced electron emission from large area carbon nanotube array cathodes/ Liao Q., Yang Y., Qi J., Zhang Y., Huang Y., Xia L., Liu L. // –App. Phys. Lett. –2010. –V.96. –pp. 073109(3).
3. Liao Q. Plasma-induced field emission and plasma expansion of carbon nanotube cathodes/ Liao Q., Zhang Y., Qi J., Huang Y., et al. // –J. Phys. D: Appl. Phys. –2007. –V.40. –pp. 3456- 3460.
4. Liao Q. High intensity, plasma-induced emission from large area ZnO nanorod array cathodes/ Liao Q., Yang Y., Xia L., Qi J., Zhang Y., Huang Y., Qin Z. // –Phys. of Plasm. –2008. –V.15. –pp. 114505-114505-4.
5. Mulliken R.S. Electronic Population Analysis on LCAO-MO Molecular Wave Functions// –J. Chem. Phys. –1955. –V. 23. –pp. 1833-1840.