

**МОДЕЛИРОВАНИЕ КАНАЛИРОВАНИЯ ИОНОВ НИЗКИХ ЭНЕРГИЙ В УГЛЕРОДНЫХ  
НАНОТРУБКАХ**А.В. Степанов

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н., Г.М. Филиппов

Чувашская государственная сельскохозяйственная академия,

Россия, г. Чебоксары, ул. К. Маркса, 29, 428000

E-mail: for.antonstep@gmail.com

**SIMULATION OF LOW ENERGY ION LAYERING IN CARBON NANOTUBES**A.V. Stepanov

Scientific Supervisor: Prof., Dr., G.M. Filippov

Chuvash State Agriculture Academy, Russia, Cheboksary, K. Marx str., 29, 428000

E-mail: for.antonstep@gmail.com

***Abstract.** This study simulates the passage of low-energy ions through carbon nanotubes in channeling mode. It is shown that taking into account the deformation of the wall of a carbon nanotube when calculating the interaction of ions with the nanotube wall leads to a decrease in ion energy losses in the case when the longitudinal velocity of the ion motion and perturbations of the nanotube wall are close in magnitude.*

**Введение.** Ионная имплантация через наношаблоны или маски является альтернативой использованию технологий литографии с применением фоторезиста при ионном травлении [1, 2]. Технология создания пористой или островковой пленки при помощи ионного пучка и наношаблонов широко используется в последнее десятилетие для техники локального осаждения металлов [3], сложных оксидов [4] и магнитных сплавов [5]. Кроме того, возможно осаждение на полимерные подложки, органические и самосборные монослойные пленки. Эта техника применяется для селективного осаждения материалов и для направленного травления полупроводников и диэлектриков, например, арсенида галлия [6], кремния, оксида кремния, нитрида кремния [7], и как масочная ионная литография [2].

Использование жгутов углеродных нанотрубок (УНТ) вместо масок обладает тем преимуществом, что позволяет управлять ионным пучком в трех измерениях при помощи манипулирования нанотрубками. Благодаря этому, появляется возможность направлять пучок ионов в труднодоступные места, например, при изготовлении микроэлектромеханических систем (МЭМС) или наноэлектромеханических систем (НЭМС), а также при создании полупроводниковых приборов со сложной пространственной архитектурой.

Целью данного исследования являлось исследование прохождения ионов низких энергий через углеродные нанотрубки в режиме каналирования. Задачи которые решались: 1. Изучение упругих возмущений стенки УНТ при каналировании в них частиц низких энергий. 2. Учет влияния возмущений стенки на движение частиц в УНТ

**Методы исследования.** При решении поставленных задач применялся метод молекулярной динамики, апробированный и широко применяемый для моделирования процессов взаимодействия

атомных частиц с твердым телом, а также применялись известные подходы к релаксации и термостатированию моделируемых атомных систем, методы анализа траекторий каналируемых частиц и способы описания систем в целом. Для расчетов использовался пакет LAMMPS [8], взаимодействие между атомами углерода в углеродной нанотрубке описывалось при помощи потенциала AIREBO [9-10], а между ионом и атомами углерода при помощи потенциала Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL) [11]. Расчеты производились с использованием суперкомпьютерного центра Ломоносов МГУ им. М.В. Ломоносова [12].

**Результаты.** На основе расчета столкновения иона  $Ag^+$  со стенкой УНТ (11,9) рассчитана деформация стенки. Поскольку при столкновении иона со стенкой происходит одновременное смещение сразу нескольких атомов углерода, возникают многочастичные эффекты. Показано, что учет дискретности стенки и движения атомов нанотрубки является более последовательным подходом по сравнению с методом непрерывного потенциала и методами, основанными на решении кинетических уравнений.

На примере ионов  $Ag^+$  с энергией 100 эВ показано, что при движении иона с углами, близкими к критическим, после столкновения его со стенкой УНТ (10,10) возникают возмущения стенки – волны деформации (рис. 1), влияющие на движение каналируемой частицы. Движение каналируемой частицы после первого столкновения приводит к обмену энергией между возмущением стенки и частицей. В том случае, когда близки скорости их продольного движения, это приводит к уменьшению потерь энергии движущейся частицей при каждом столкновении со стенкой по сравнению со случаем движения без учета возмущений стенки нанотрубки [13].

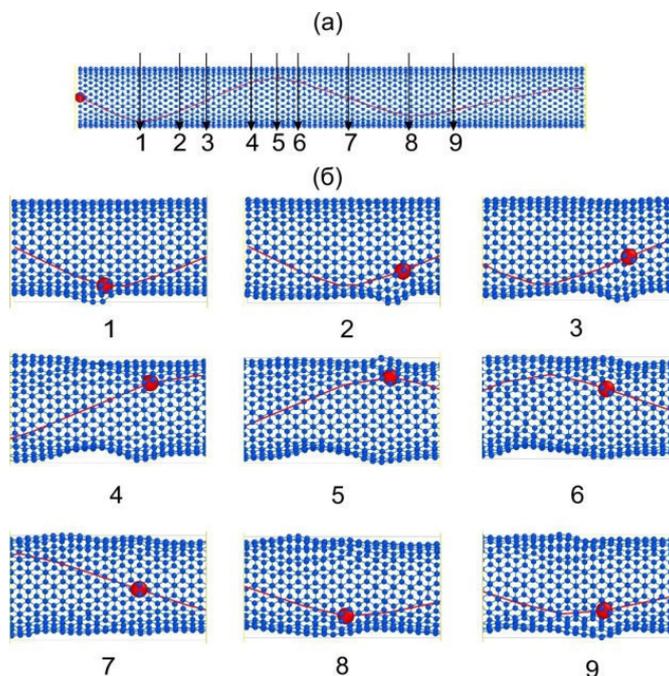


Рис. 1. (а) Траектория  $Ag^+$  в фрагменте УНТ (10,10) длиной 14.3 нм с отмеченными на ней моментами времени. (б) Мгновенные «снимки» в моменты времени, указанные на рисунке 3 (а) фрагментов УНТ с изображениями участков траектории в соответствующие моменты времени. Текущее положение частицы указано кружком

**Заключение.** При подлете к стенке УНТ каналируемые частицы испытывают эффективное взаимодействие одновременно с несколькими атомами, при этом происходит упругая деформация стенки. Отсюда следуют неполная адекватность приближения непрерывного потенциала, модели бинарных столкновений и необходимость использования метода молекулярной динамики при моделировании процесса каналирования. Упругое возмущение стенки нанотрубки под действием каналируемой частицы оказывает влияние на движение этой частицы в том случае, если ее скорость близка к скорости распространения возмущения. При этом частица теряет меньше энергии, чем в случае движения в невозмущенной трубке.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Villanueva, L.G., et al., Localized Ion Implantation Through Micro // Nanostencil Masks. IEEE Transactions on Nanotechnology. – 2011. – Vol. 10, No.5– P. 940-946.
2. Pang, S.W., et al., Masked ion beam lithography for submicrometer gate length transistors. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics Processing and Phenomena, 1987. 5(1): p. 215-218.
3. Brugger, J., et al., Quick & Clean: Advances in High Resolution Stencil Lithography // E nano newsletter. – 2007.– Vol. 8. – P. 22-28.
4. Villanueva, G.L., et al., Resistless Fabrication of Nanoimprint Lithography (NIL) Stamps Using Nano-Stencil Lithography // Micromachines. – 2013. – Vol. 4, No.4. – P.370-377.
5. Rodriguez, A.F., et al., Permalloy thin films exchange coupled to arrays of cobalt islands // Applied Physics Letters. – 2006. – Vol. 89, No.14. – P. 142508.
6. Pang, S.W., et al., Pattern transfer by dry etching through stencil masks // Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics Processing and Phenomena. – 1988. – Vol. 6, No.1 – P. 249-252.
7. Villanueva, G., et al., Etching of sub-micrometer structures through Stencil // Microelectronic Engineering. – 2008.Vol. 85, No. 5–6. – P. 1010-1014.
8. Plimpton, S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics / S. Plimpton // Journal of Computational Physics. – 1995. – Vol. 117, № 1. – P. 1-19.
9. Stuart, S. J. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions / S. J. Stuart, A. B. Tutein, J. A. Harrison // The Journal of Chemical Physics. – 2000. – Vol. 112, No 14. – P. 6472-6486.
10. A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons / D. W. Brenner, O. A. Shenderova, J. A. Harrison., S. J. Stuart, B. Ni, S. B. Sinnott // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2002. – Vol. 14, No 4. – P. 783.
11. Ziegler, J. F. The Stopping and Range of Ions in Matter. / J. F. Ziegler, J. P. Biersack, U. Littmark; Vol. 1, ed. by J.P. Ziegler. – New York: Pergamon, 1985. – 321 p.
12. Sadvnichy V., Tikhonravov A., Voevodin VI., et al., Contemporary High Performance Computing: From Petascale toward Exascale. – Boca Raton: CRC Press, 2013. – 283 p.
13. Степанов, А. В. Влияние упругих возмущений стенки углеродной нанотрубки на каналирование в ней медленных атомных частиц / А. В. Степанов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2015. – №8. – С. 34-43.