

УДК 530.136

ОСОБЕННОСТИ ОТРАЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ СЛОЕМ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

© 2024 г. Н. В. Новиков^а, *, Н. Г. Чеченин^а, А. А. Широкова^а

^аМосковский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына, Москва, 119991 Россия
*e-mail: nvnovikov65@mail.ru

Поступила в редакцию 31.07.2023 г.

После доработки 26.10.2023 г.

Принята к публикации 26.10.2023 г.

Исследованы анизотропные свойства слоя из углеродных нанотрубок при отражении электронов. Установлено, что только небольшая часть падающих электронов отражается от мишени с поверхностным слоем из ориентированных углеродных нанотрубок. Отражение происходит только от слоя горизонтально ориентированных нанотрубок при угле падения больше 80° и вертикально ориентированных нанотрубок при угле падения меньше 10°. Эффект объясняется особенностями формирования потока электронов в поверхностных слоях мишени.

Ключевые слова: слой из углеродных нанотрубок, коэффициент отражения электронов, метод Монте-Карло.

DOI: 10.31857/S1028096024030043, **EDN:** HFXNZV

ВВЕДЕНИЕ

Углеродная нанотрубка (УНТ) — это аллотропная модификация углерода, представляющая собой полую многослойную цилиндрическую структуру диаметром от десятых до нескольких десятков нанометров и длиной до нескольких сантиметров. Композиционные материалы с УНТ и полимерной матрицей в качестве наполнителя обладают уникальными механическими (прочность, ползучесть, ударная вязкость), электрофизическими (электропроводность, диэлектрическая проницаемость, радиационная стойкость) и тепловыми свойствами [1]. В нормальных условиях УНТ, алмаз и графен обладают самой высокой из всех известных материалов теплопроводностью. УНТ с полимерной матрицей экранируют электромагнитное излучение, а за счет высокой тепло- и электропроводности способны снимать тепловую нагрузку и заряды статического электричества. Композиционные материалы с УНТ обладают малой массой при аномально высоком значении модуля Юнга и повышенной прочностью [2, 3], высокой износостойкостью, значительной термостойкостью, стойкостью к воздействию внешних агрессивных сред, приводящих к окислению и химическому разрушению материалов, а также хорошей совме-

стимостью с биологическими тканями [4]. Кроме того, УНТ обладают уникальными анизотропными свойствами — механические, тепловые и электрофизические параметры различаются на порядки в направлениях вдоль и поперек оси трубки. Например, УНТ с металлическим типом проводимости могут пропускать вдоль оси ток в 1000 раз больше по сравнению с традиционными проводниками [2]. УНТ являются материалом, в котором длина свободного пробега частиц может намного превышать характерный размер их пробега в однородной среде [3]. Такие материалы, в которых возможен бесстолкновительный режим движения, называют баллистическими проводниками.

Однослойную УНТ можно рассматривать как лист графена, свернутый в форме цилиндра диаметром около 1 нм и длиной до 100 мкм [1]. В жгуты (bundles) УНТ располагаются приблизительно параллельно друг другу при небольшой вариации расстояния между ними. Среднее расстояние между трубками в этом случае, как правило, не превышает 0.34 нм.

Неупругое рассеяние быстрых электронов поверхностью является составной частью вторичной электронной эмиссии [5] и играет важную

роль в решении проблем физической электроники. Обратно рассеянные и вторичные электроны формируют изображение рельефа поверхности в растровой электронной микроскопии и используются для рентгеноспектрального микроанализа [6, 7]. Кроме того, отражение электронов от поверхности материала представляет интерес в задачах радиационной стойкости и дефектоскопии [8]. Спектры обратно рассеянных от бесструктурной мишени электронов имеют форму асимметричного купола, который достигает максимума при энергии, близкой к начальной энергии электрона [8, 9], а функция углового распределения отраженных электронов близка к зависимости в виде косинуса от угла падения [9].

В настоящей работе исследованы анизотропные свойства слоя из УНТ при отражении электронов. Рассмотрена модель, в которой материал мишени состоит из УНТ без полимерной матрицы, все трубки одинаковые, однослойные и ориентированы в одном направлении. Проанализирована зависимость коэффициента отражения электронов от мишени, состоящей из вертикально и горизонтально ориентированных по отношению к поверхности УНТ, от угла падения α и энергии электронов $E_e > 1$ кэВ. Расчеты методом Монте-Карло выполнены с помощью программы PENELOPE [10, 11].

ОТРАЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ОДНОРОДНОЙ УГЛЕРОДНОЙ МИШЕНЬЮ

Рассмотрим сначала закономерности отражения электронов от бесструктурной мишени. Мишень состоит из углерода плотностью $\rho = 2$ г/см³ и считается однородной. Коэффициент отражения электронов $F(E, \alpha)$ определяется как отношение количества частиц, отраженных и падающих под углом α к нормали поверхности. Толщина мишени превышает 1 мкм, и все падающие электроны либо отражаются, либо поглощаются в ней, сумма коэффициента отражения $F(E, \alpha)$ и поглощения $F_{\text{abs}}(E, \alpha)$ равна единице:

$$F(E, \alpha) + F_{\text{abs}}(E, \alpha) = 1.$$

Во всем диапазоне углов падения коэффициент отражения $F(E, \alpha)$ превышает несколько процентов. При увеличении угла падения α коэффициент отражения $F(E, \alpha)$ монотонно возрастает и стремится к единице при скользких углах падения $\alpha \rightarrow 90^\circ$. Уменьшение коэффициента $F(E, \alpha)$ с увеличением энергии E в области небольших α объясняется уменьшением потока электронов в поверхностных слоях мишени. Коэффициент отражения при падении электронов вдоль нормали

к поверхности $F(E, \alpha = 0)$ уменьшается при увеличении энергии электрона (рис. 1). Эта особенность характерна для всех материалов от бериллия до урана [7]. Количество электронов, отраженных углеродной мишенью с энергией $E < 50$ кэВ, превышает 5% во всем диапазоне углов падения.

МОДЕЛЬ СЛОЯ ИЗ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Однослойную УНТ задают в виде полого цилиндра с внутренним $r = 0.35$ нм и внешним $R = 0.45$ нм радиусами. Такой подход приближенный, так как в нем пренебрегают упорядоченным расположением атомов углерода. За плотность материала УНТ была взята максимальная плотность углерода в нормальных условиях $\rho = 2.27$ г/см³ [12]. Наиболее плотную упаковку цилиндров в кластере обеспечивает размещение УНТ в узлах решетки в виде правильных шестигранников, когда расстояние d между центрами любых двух соседних цилиндров одинаковое. Этот параметр называется шагом решетки и определяет величину зазора Δd между соседними цилиндрами. При значении Δd в один атомный слой ($\Delta d = 0.1$ нм) шаг решетки в кластере УНТ с $R = 0.45$ нм составляет $d = 1$ нм. Шаг решетки расчетной ячейки определяется количеством УНТ в кластере N_{CNT} (CNT – carbon nanotubes). Это количество может принимать несколько значений ($N_{\text{CNT}} = 7, 19, 37, 61, 91, 127, 169, \dots$). В настоящей работе расчеты коэффициента отражения электрона проводили для $N_{\text{CNT}} = 61$ и $N_{\text{CNT}} = 91$, так чтобы из разницы полученных значений определить точность вычисления в исполь-

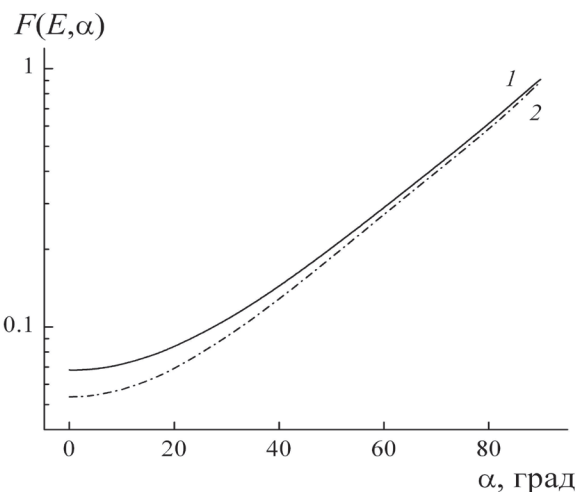


Рис. 1. Зависимость коэффициента отражения $F(E, \alpha = 0)$ от угла падения при отражении от однородной мишени из углерода электронов с энергией: 1) 11; 2) 50 кэВ.

зуемой геометрической модели для слоя из УНТ. Коэффициент отражения определяется потоком в поверхностных слоях мишени в области вблизи точки падения пучка электронов, поэтому длина УНТ L_{CNT} не является определяющим параметром. В расчетах $L_{\text{CNT}} = 1$ мкм.

Коэффициент отражения электронов от слоя вертикально расположенных относительно поверхности УНТ (рис. 2а) обозначим $F_Z(E_e, \alpha)$. В случае горизонтально ориентированных УНТ (рис. 2б) кроме угла падения α коэффициент отражения электронов зависит также от угла φ между плоскостью падения и направлением оси УНТ. Выберем ось X в направлении оси УНТ, а коэффициент отражения обозначим в виде $F_X(E_e, \alpha, \varphi)$, где φ — угол между плоскостью рассеяния и осью УНТ. Структура мишени из УНТ обуславливает анизотропные свойства материала — различие коэффициентов отражения электронов $F_Z(E_e, \alpha)$ и $F_X(E_e, \alpha, \varphi)$ от $F(E, \alpha)$.

ОТРАЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ СЛОЕМ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Коэффициент отражения электронов слоем горизонтально ориентированных УНТ зависит от углов α и φ (рис. 3). Немонотонность этой зависимости в виде нескольких максимумов в области углов $\varphi < 15^\circ$ объясняется чувствительностью результатов расчета к рельефу поверхности при отклонении плоскости рассеяния от выделенного направления УНТ. Самое большое

количество отраженных электронов приходится на область $\varphi = 2^\circ - 3^\circ$. Уменьшение коэффициента $F_X(E, \alpha, \varphi)$ при $\varphi \rightarrow 0$ объясняется уменьшением эффективной толщины стенки УНТ при первом неупругом столкновении с ней падающего электрона. Это приводит к увеличению вероятности проникновения электрона во внутреннюю часть УНТ и, как следствие, уменьшению коэффициента отражения $F_X(E, \alpha, \varphi)$. Другие максимумы в распределении на рис. 3 можно интерпретировать как “отклик” на перераспределение потоков электронов в поверхностном слое мишени вследствие присутствия соседних УНТ. При уменьшении угла падения α количество таких дополнительных максимумов увеличивается, а отличие амплитуд соседних пиков становится меньше.

При углах падения $\alpha < 80^\circ - 85^\circ$ количество отраженных слоем горизонтально расположенных УНТ составляет менее 1% (рис. 4). В области скользящих углов падения $\alpha > 85^\circ$ электроны попадают в режим каналирования внутри кластера из УНТ и остаются в поверхностном слое мишени. В этом режиме рассеяние электронов на стенках УНТ может привести к изменению направления их импульса, в результате которого они начнут движение в направлении поверхности. Отличие $F_X(E, \alpha, \varphi)$ на несколько порядков от $F(E, \alpha)$ при небольших углах падения $\alpha < 60^\circ$ объясняется тем, что электроны с энергией $E > 10$ кэВ в этом случае легко проходят через стенки отдельных нанотрубок и попадают в достаточно глубокие слои мишени. Вероятность выхода на поверхность мишени таких электронов быстро уменьшается при

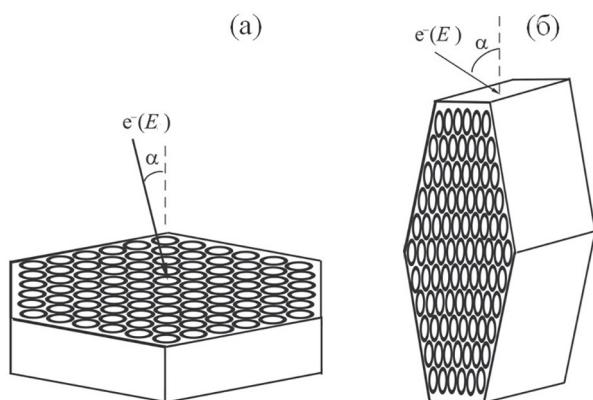


Рис. 2. Варианты расположения кластера из $N_{\text{CNT}} = 91$ однослойных УНТ по отношению к пучку электронов, падающих на мишень под углом α к нормали, которая ориентирована: а — вдоль оси трубок; б — перпендикулярно оси трубок при угле между плоскостью рассеяния и направлением УНТ $\varphi = 0^\circ$.

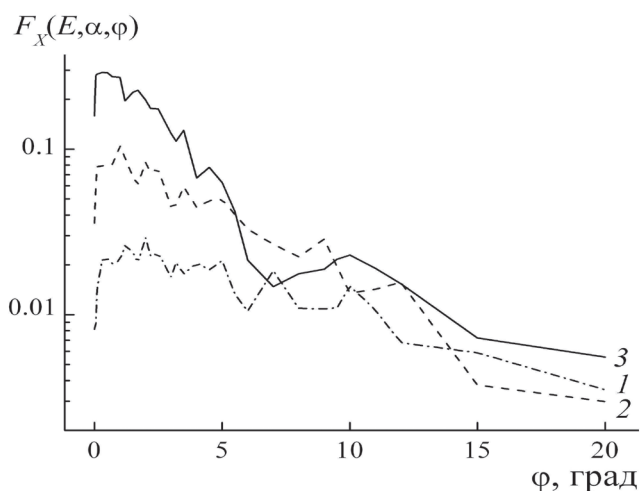


Рис. 3. Зависимость от азимутального угла коэффициента отражения слоем горизонтально ориентированных УНТ. Электроны с энергией $E = 20$ кэВ падают на поверхность под углом α : 1 — 80° ; 2 — 85° ; 3 — 88° .

увеличении глубины проникновения в слой и угла падения.

Зависимость от угла падения коэффициента отражения электронов слоем вертикально ориентированных УНТ качественно отличается от закономерностей, характерных для отражения бесструктурным материалом (рис. 1). Количество отраженных электронов уменьшается с увеличением угла падения (рис. 5). При углах падения $\alpha > 40^\circ$ от слоя вертикально ориентированных УНТ отражается менее 1% падающих на него электронов с $E > 10$ кэВ. Такую, на первый взгляд, парадоксальную зависимость можно объяснить тем, что электроны, которые прошли через стенку УНТ и попали в область между трубками, имеют маленькую вероятность изменить направление своего импульса на противоположное и начать движение в сторону поверхности. В режиме баллистического каналирования с отражением от стенок вертикальных УНТ только несколько первых столкновений могут изменить направление импульса электрона на противоположное. Этим и объясняется увеличение коэффициента отражения электронов от слоя вертикально расположенных УНТ $F_z(E, \alpha)$ при уменьшении угла падения в области $\alpha < 5^\circ$ на рис. 5.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Особенностью отражения бесструктурной мишенью является достаточно большой коэффициент отражения во всем диапазоне углов падения, когда $F(E, \alpha)$ превышает несколько процентов. Количество отраженных мишенью электронов увеличивается при возрастании их потока в поверхностных слоях мишени. Это происходит при уменьшении угла падения на бесструктурную мишень во всем диапазоне углов падения. В структурной мишени потоки в поверхностных слоях зависят от особенностей рассеяния на разной глубине мишени. Мишень с поверхностным слоем из ориентированных УНТ обладает уникальными отражательными свойствами для пучка падающих электронов. Только небольшая часть падающих электронов может отразиться от такой мишени, да и то только в небольшом интервале углов $\alpha > 80^\circ$, $\varphi < 15^\circ$ в случае горизонтально ориентированных УНТ и $\alpha < 10^\circ$ в случае вертикально ориентированных УНТ. Такой эффект объясняется особенностями формирования потоков электронов в поверхностных слоях мишени из ориентированных УНТ. Большая часть электронов с энергией $E > 10$ кэВ легко проходит через стенку одной УНТ и в результате баллистического каналирования попадает в достаточно глубокие

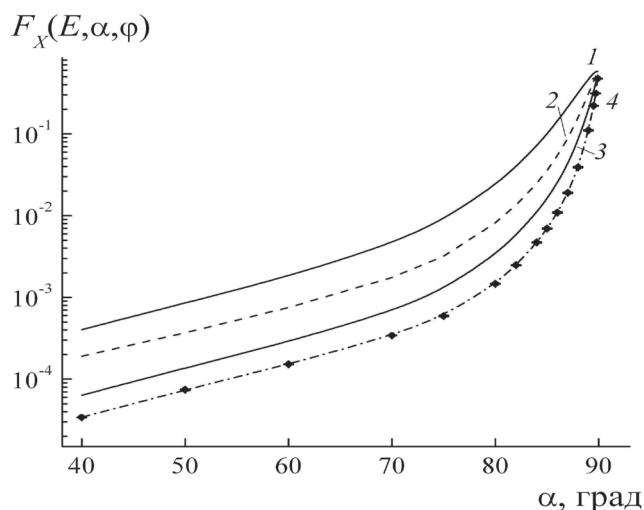


Рис. 4. Зависимость от угла падения коэффициента отражения от мишени из горизонтально ориентированных УНТ при $\varphi = 0^\circ$ электронов с энергией: 11 (1); 20 (2); 30 (3); 50 кэВ (4). Погрешности расчетов соответствуют размеру символов на кривой 4.

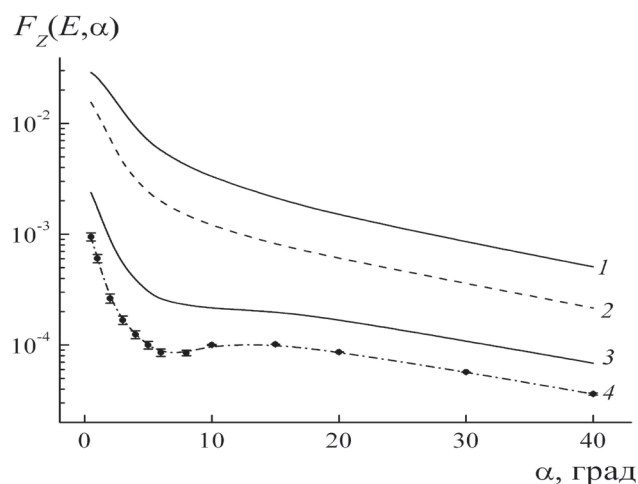


Рис. 5. Зависимость коэффициента отражения от угла падения при рассеянии электронов мишенью вертикально ориентированных УНТ. Обозначения как на рис. 4.

слои мишени, вероятность выхода из которых быстро уменьшается при увеличении глубины слоя.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Данная работа выполнена в рамках научной программы Национального центра физики и математики (проект “Ядерная и радиационная физика”).

Конфликт интересов. Авторы данной статьи заявляют, что у них нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Макунин А.В., Чеченин Н.Г. Полимер-нанополупроводниковые композиты для космических технологий. Ч. 1. М.: Университетская книга, 2011. 150 с.
2. Елецкий А.В. // УФН. 2006. Т. 177. № 3. С. 233.
3. Новиков Л.С., Воронина Е.Н. Взаимодействие космических аппаратов с окружающей средой. М: КДУ, Университетская книга, 2021. 560 с.
4. Salleh N., Ghazali N., Yhaya M.F., Fridaus M. // Int. J. Polymeric Mater. 2009. V. 58. № 7. P. 384.
5. Бронштейн И.М., Фрайман Б.С. Вторичная электронная эмиссия. М.: Наука, 1969. 407 с.
6. Рид С.Дж.Б. Электронно-зондовый микроанализ и растровая электронная микроскопия в геологии. М.: Техносфера, 2008. 229 с.
7. Vos M., Chatzidimitriou-Dreismann C.A., Abdul-Redah T., Mayers J. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2005. V. 227. P. 233.
8. Калашников Н.П., Ремизович В.С., Рязанов М.И. Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах. М.: Атомиздат, 1980. 272 с.
9. Тилинин И.С. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. Вып. 4. С. 1291.
10. Baro J., Sempau J., Fernandez-Varea J.M., Salvat F. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1995. V. 100. P. 31.
11. Sempau J., Fernandez-Varea J.M., Acosta E., Salvat F. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2003. V. 207. P. 107.
[https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(03\)00453-1](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(03)00453-1)
12. Seral-Ascaso A., Garriga R., Sanjuán M. L., Razal J.M., Lahoz R., Laguna M., Fuente G.F., Muñoz E. // Nanoscale Res. Lett. 2013. V. eight. P. 233.

Features of Electron Reflection by Layer of Carbon Nanotubes

N. V. Novikov^{1, *}, N. G. Chechenin¹, A. A. Shirokova¹¹Lomonosov Moscow State University, Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Moscow, 119991 Russia

*e-mail: nvnovikov65@mail.ru

The anisotropic properties of a layer of carbon nanotubes upon electron reflection have been studied. Only a small part of the incident electrons is found to reflect from a target with a surface layer of oriented carbon nanotubes. Reflection occurs only from a layer of horizontally oriented nanotubes at an angle of incidence greater than 80° and vertically oriented nanotubes at an angle of incidence less than 10°. The effect is explained by peculiarities of the formation of an electron flux in the surface layers of the target.

Keywords: carbon nanotube layer, reflection coefficient of electrons, Monte Carlo method.