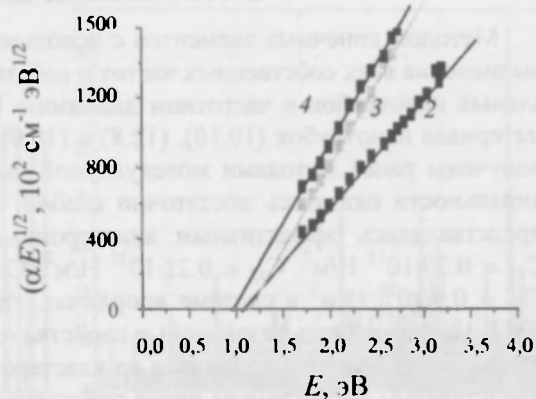


что, возможно, свидетельствует о росте сопряжения связей с ростом дозовой нагрузки. Обнаруженное увеличение отражения (до 50 %) и поглощения (до 30 %) модифицированного полимера с ростом дозы имплантации связано с ростом концентрации и размеров углеродных кластеров, образующихся в модифицированном слое, а также формированием нанокластеров никеля. Произведена оценка размеров формирующихся в ходе имплантации нанокластеров углерода в зависимости от дозы имплантации по модели Тауца – в исследуемом интервале доз максимальный диаметр нанокластеров достигал 2,2 нм.



ЛИТЕРАТУРА

1. Оджаев В. Б., Козлов И. П., Попок В. Н., Свиридов Д. В. // Ионная имплантация полимеров. Минск: БГУ, 1998. – 197 с.
2. Степанов А.Л. Оптические свойства металлических наночастиц, синтезированных в полимере методом ионной имплантации // Журнал технической физики. 2004. № 2. 11 с.
3. Robertson J., O'Reilly E. P. // Phys. Rev. B. 1987. 35. 2946.
4. Фаизрахманов И. А., Базаров В. В., Степанов А. Л., Хайбуллин И. Б. Влияние бомбардировки ионами углерода на наноструктуру алмазоподобных пленок // ФТП. 2001. Т. 35. В. 5. 7 с.
5. Фаизрахманов И. А., Базаров В. В., Степанов А. Л., Хайбуллин И. Б. Влияние имплантации ионов меди на оптические свойства и низкотемпературную проводимость углеродных плёнок // ФТП. 2006. Т. 40. В. 4. 12 с.

РЕЗОНАНСНЫЕ СВОЙСТВА ОРИЕНТИРОВАННЫХ МАССИВОВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

В. В. Баркалин, П. А. Жучек

Белорусский национальный технический университет, barkaline@bntu.by

1. ВВЕДЕНИЕ

Упорядоченные массивы углеродных нанотрубок (УНТ) представляются весьма перспективными элементами для различных применений нанотехнологий, таких как химические и биосенсоры [1], СВЧ-устройства. Благодаря малым размерам нанотрубок частоты их механических резонансов также попадают в СВЧ-диапазон, поэтому описание таких резонансных свойств весьма актуально. В настоящее время вычисление резонансных характеристик массивов УНТ возможно лишь при использовании континуального приближения, т. к. даже молекулярно-динамические расчеты для систем из миллионов атомов на суперкомпьютерных конфигурациях чрезвычайно ресурсоемки.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Методом конечных элементов с использованием пакета LS-DYNA [2] проведено вычисление всех собственных частот и собственных функций целого ряда индивидуальных нанотрубок в частотном диапазоне 100 МГц – 70 ГГц. Упругие константы материала нанотрубок (10.10), (12.8) и (18.0) приблизительно одинакового диаметра получены ранее методами молекулярной динамики [3], причем их зависимость от хиральности оказалась достаточно слабой. В пакете LS-DYNA все УНТ поэтому представлялись эффективным анизотропным материалом с модулями упругости $C_{11} = 0.39 \cdot 10^{11}$ Н/м², $C_{12} = 0.21 \cdot 10^{11}$ Н/м², $C_{13} = 0.31 \cdot 10^{11}$ Н/м², $C_{33} = 1.21 \cdot 10^{12}$ Н/м², $C_{44} = 0.9 \cdot 10^{10}$ Н/м² в системе координат, где ось z совпадает с центральной осью УНТ. Исследовались резонансные свойства одиночных нанотрубок, закрепленных на одном конце. Расчет проводился на кластере СКИФ К-1000 ОИПИ НАНБ. На рис. 1 представлены гистограммы числа собственных частот нанотрубок длиной 200 нм с различными диаметрами и толщинами стенок. Очевидно, с ростом массы нанотрубок при фиксированной длине число собственных мод быстро растет. Следует отметить нерегулярность распределения частот, что должно сказываться в особенностях спектров поглощения нанотрубных материалов в СВЧ-диапазоне и может быть использовано в различных СВЧ-устройствах на их основе. На рис. 2 представлена аналогичная гистограмма для УНТ длиной 100 мкм.

Исследование собственных колебаний массивов УНТ проводилось в диапазоне от 0 до 3 ГГц. Изучались две модели массивов. Первая состояла из кремниевой подложки (001)-среза размером 285×285×30 нм и массива нанотрубок размерностью 10×10 трубок. Нанотрубки представлены в виде полых цилиндров с наружным диаметром 20 нм, внутренним диаметром 14 нм и длиной трубки, распределенной по нормальному закону со средним значением 400 нм и стандартным отклонением 20 нм. Между каждой трубкой и подложкой имеется никелевая прослойка в виде цилиндра с диаметром 20 нм и высотой цилиндра 5 нм. Вторая модель отличалась только геометрическими размерами подложки (660×660×40 нм), а также наружным и внутренним диаметрами цилиндров (40 и 39.4 нм) и диаметром никелевой прослойки (40 нм).

Подложка характеризовалась независимыми модулями упругости $C_{11} = 1.66 \cdot 10^{11}$ Н/м², $C_{12} = 0.639 \cdot 10^{11}$ Н/м², $C_{44} = 0.796 \cdot 10^{11}$ Н/м² и плотностью 2330 кг/м³; для материала массива УНТ использовались указанные выше параметры, никелевая прослойка представлялась изотропным материалом с коэффициентом Пуассона 0.291, модулем Юнга $2.00 \cdot 10^{11}$ Н/м² и плотностью 8900 кг/м³.

На рисунке 3 представлены формы некоторых собственных колебаний для первой модели. Следует отметить наличие как регулярных движений массива (рис. 3, а, б, д), так и квазистохастических (рис. 3, в, е), в которых движение УНТ в массиве слабо коррелировано. Кроме того, обнаружены «дышащие моды» УНТ с радиальными колебаниями нанотрубок, одна из которых представлена на рис. 3, г.

На рис. 4 представлены гистограммы числа собственных частот массива с интервалом разбиения 10 МГц для первой и второй модели, соответственно. Следует отметить, что уширение спектра собственных колебаний массива объясняется не только разбросом длин УНТ в массивах, но и механическим взаимодействием нанотрубок через подложку. Наличие такого взаимодействия подтверждается исследованием резонансного возбуждения массива внешней силой, приложенной к подложке.

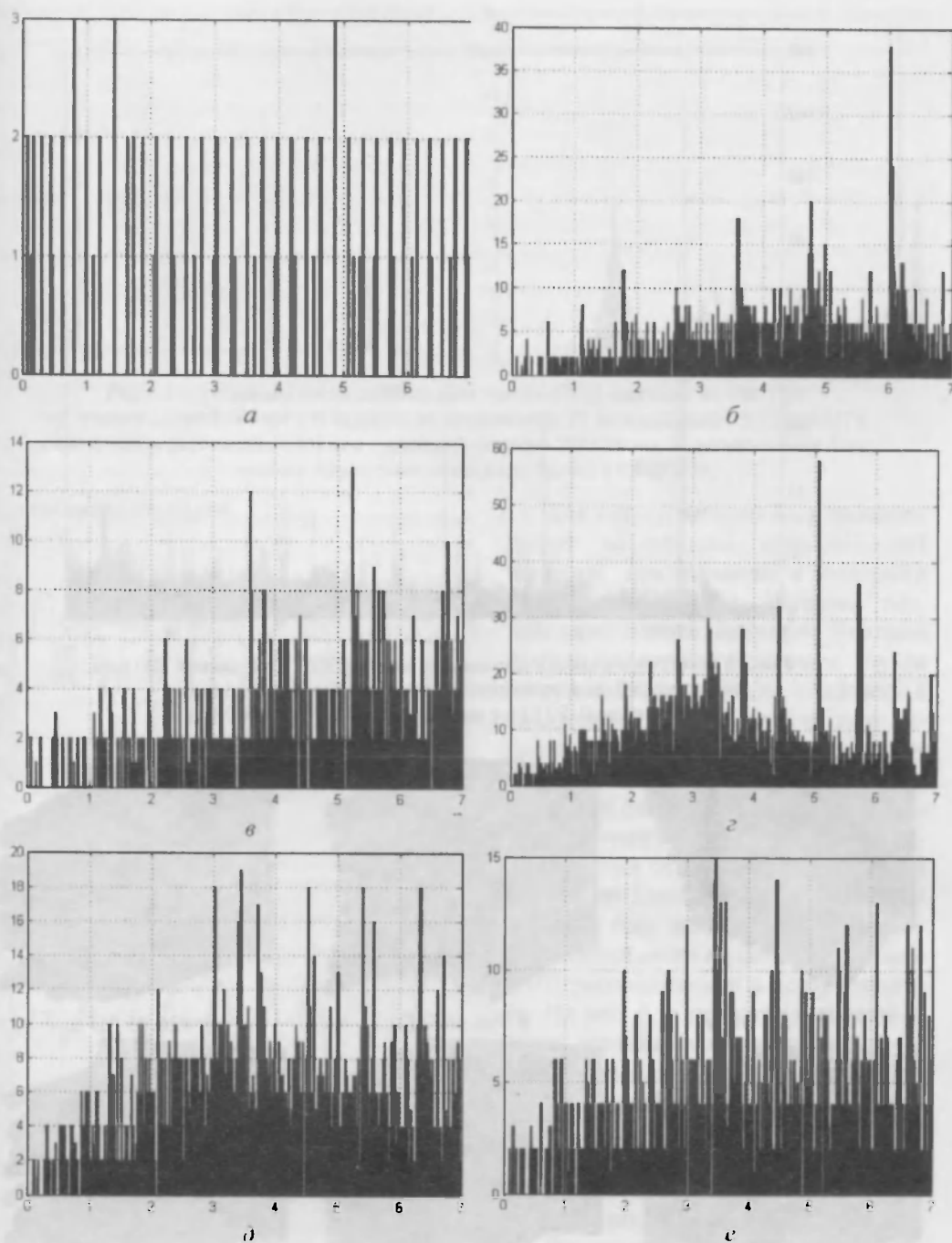


Рис. 1. Гистограммы числа собственных частот (ГГц) УНТ длиной 200 нм с закрепленным концом в диапазоне до 70 ГГц с интервалом разбиения 200 МГц: а) УНТ диаметром 2 нм, толщиной стенки 0.3 нм; б) диаметром 20 нм, толщиной 0.3 нм; в) диаметром 20 нм, толщиной 0.6 нм; г) диаметром 40 нм, толщиной 0.3 нм; д) диаметром 40 нм, толщиной 0.6 нм; е) диаметром 40 нм, толщиной 0.9 нм

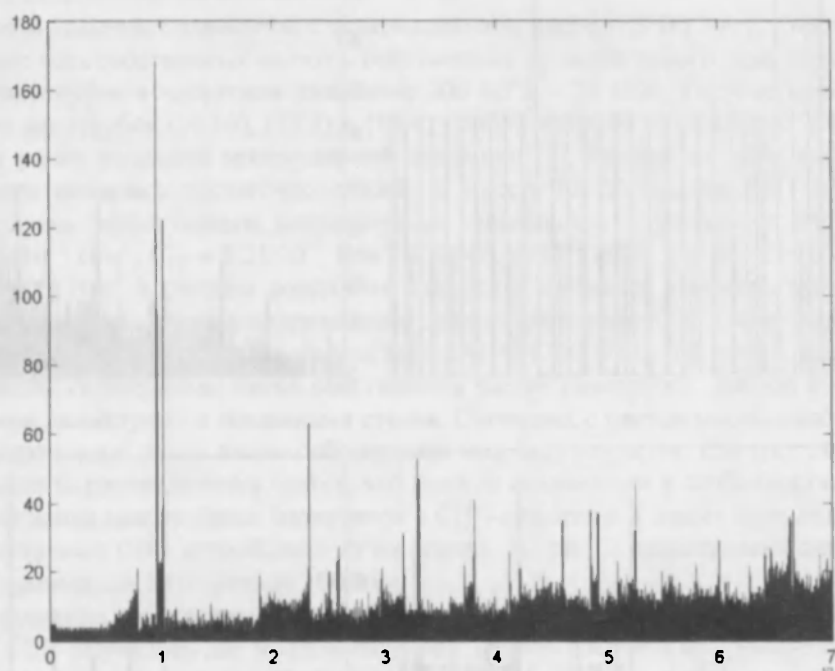


Рис. 2. Гистограммы числа собственных частот (ГГц) УНТ длиной 100 мкм, диаметром 40 нм и толщиной 0.9 нм с закрепленным концом в диапазоне до 0-70 ГГц с интервалом разбиения 200 МГц

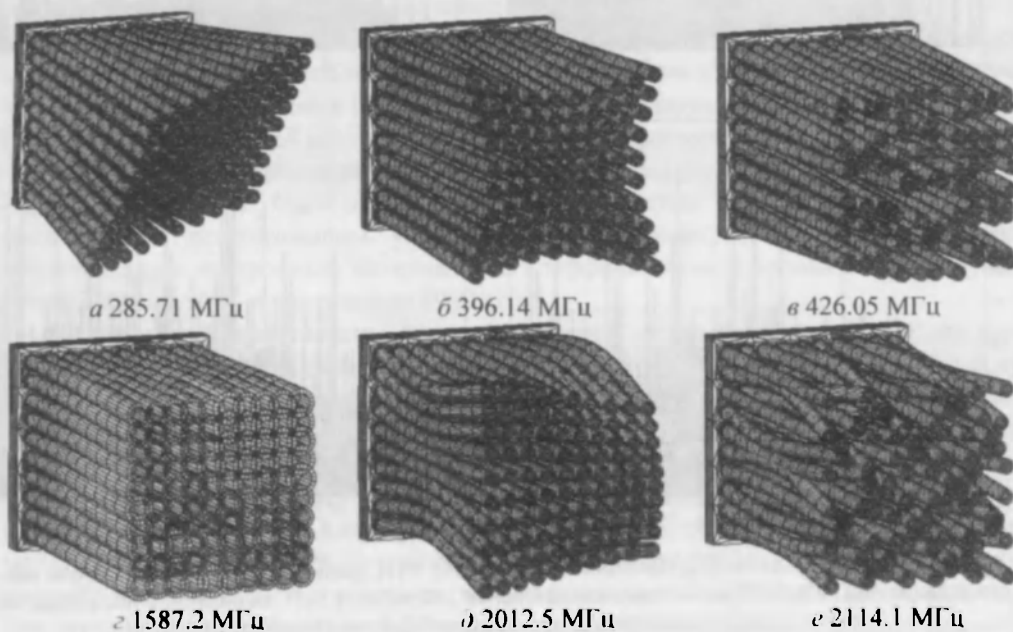


Рис. 3. Форма некоторых собственных мод массива УНТ по первой модели с регулярным (а, б, д) и квазистохастическим (в, е) движениями УНТ; г) – первая низколежащая «дышащая мода»

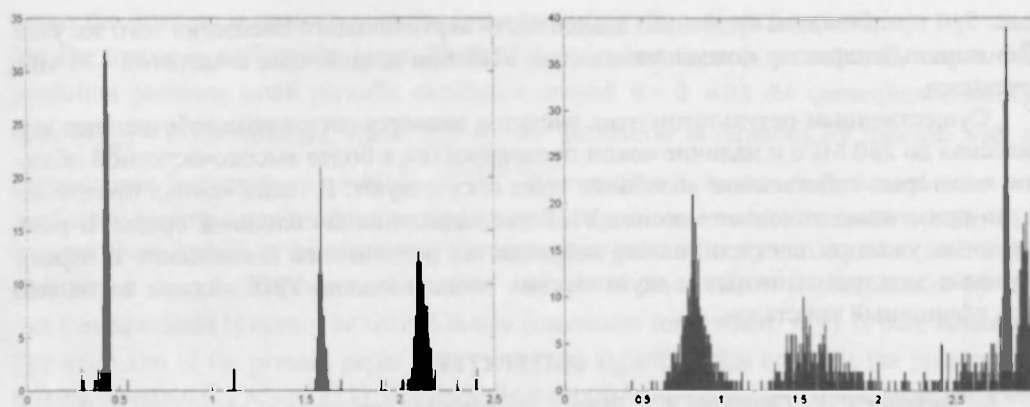


Рис. 4 Гистограммы числа собственных частот (ГГц) массивов из 100 УНТ со средней длиной 400 нм и стандартным отклонением 20 нм в диапазоне 0 – 3000 МГц с интервалом разбиения 10 МГц: а – внешний диаметр УНТ 20 нм, толщина стенки 3 нм; б – диаметр 40 нм, толщина 0.3 нм. Расчет в LS-DYNA

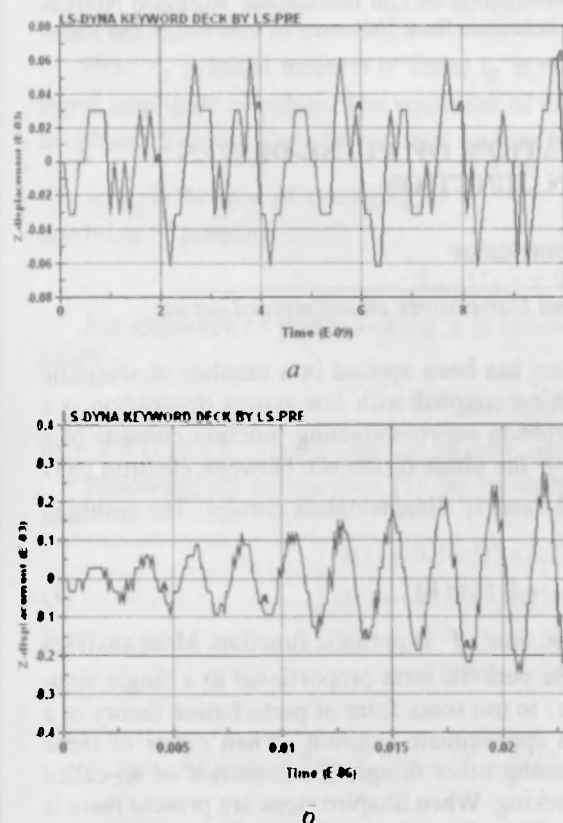


Рис. 5. Зависимость Z-компоненты смещения узла на свободном конце УНТ от времени при периодическом внешнем воздействии: а) частотой 1000 МГц; б) частотой 430 МГц

Для первой модели был проведен расчет воздействия периодической нагрузки, приложенной к подложке массива нанотрубок. Нагрузка воздействует перпендикулярно боковым граням подложки. В первом случае нагрузка действовала на подложку с частотой 1000 МГц. Эта частота попадает в интервал, где отсутствуют частоты собственных колебаний исследуемой системы (рис. 4). На рис. 5, а показан график зависимости величины нагрузки от времени. Для анализа временной зависимости смещений от времени был выбран узел конечно-элементной сетки на свободном конце УНТ, расположенной в центре массива. На рис. 5, а представлена зависимость вертикального смещения этого узла от времени. Величина смещения на графиках дана в нанометрах. По представленным данным можно сделать вывод, что при частоте нагрузки, равной 1000 МГц, система не проявляет резонансных свойств.

Во втором случае нагрузка воздействовала на подложку с частотой 430 МГц. Эта частота попадает в интервал скопления частот собственных колебаний исследуемой системы. На

рис. 5, б представлена временная зависимость вертикального смещения того же узла. Резонансный характер поведения массива УНТ при воздействии с частотой 430 МГц очевиден.

Существенным результатом этих расчетов является отсутствие собственных мод массива до 280 МГц и наличие «окон прозрачности» в более высокочастотной области, в которых собственные колебания тоже отсутствуют. В таких «окнах прозрачности» применимо описание массива УНТ как эффективной сплошной среды. В резонансных участках спектра должно наблюдаться резонансное поглощение и переизлучение электромагнитных и акустических волн, и массив УНТ должен вести себя как «фононный кристалл».

ЛИТЕРАТУРА

1. Barkaline V. V., Chashynski A. S. Physics, chemistry and application of nanostructures: Proceedings of the International Conference Nanomeeting-2007, Minsk, 22-25 May 2007. Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2007. P. 589-592.
2. LS-Dyna Keyword User's Manual. Livermore Software Technology Corporation, 2003. 400 p.
3. Barkaline V. V., Chashynski A. S., Chizhik S. A., Babicheva V. M. New Approaches to High-Tech: Nano-Design, Technology, Computer Simulation/ Proceedings of 12th International Workshop NDTCS-2008, June 23-27, 2008, Minsk, Belarus, - Minsk: Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 2008. P. 7-11.

MATHEMATICAL SIMULATION OF PULSE-DRIVEN JOSEPHSON JUNCTION

V. A. Churicalov

Kyiv research T. Shevchenko national University, chva@mycard.net.ua

Since its inception, the Josephson junction has been applied in a number of scientific and technological areas in which fast switching coupled with low power dissipation is a desideratum [1]. The standard model of a Josephson superconducting junction consists of a junction shunted by a resistance. We denote ϕ the phase difference between electron pairs across the junction, τ dimensionless time, i_0 and i_1 dimensionless current. The resulting equation is

$$d\phi/d\tau + \sin \phi = i_0 + i_1 f(\tau/b), \quad (1)$$

where parameter b has a dimension of inverse time, f is periodic function. Most analyses of equation (1) are based on the choice of the periodic term proportional to a single sinusoid $\sin \omega t$. In such a case one is forced either to use some form of perturbation theory or a numerical solution of equation to derive an approximate solution. When either of these procedures is used, one can demonstrate, among other things, the existence of so-called Shapiro steps, which is equivalent to phase locking. When Shapiro steps are present there is a net average voltage across the junction which is proportional to mean value ϕ , ϕ_{mv} , where the average is over a complete cycle. An explanation of the phenomenon of Shapiro steps can be given in mechanical terms in terms of an overdamped pendulum driven by the sum of a constant torque i_0 and a time-dependent torque $i_1 f(\tau)$. The average voltage