

УДК 539.2

## ПРОХОЖДЕНИЕ ВОЛН И ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ ПОРИСТЫЕ СТРУКТУРЫ (I)

© 2019 г. Г. М. Филиппов<sup>1,3,\*</sup>, В. А. Александров<sup>2</sup>, И. В. Лысова<sup>3</sup>, А. В. Степанов<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup>Чебоксарский институт Московского политехнического университета,  
428000 Чебоксары, Россия

<sup>2</sup>Чувашский государственный университет им. И.Н. Ульянова,  
428015 Чебоксары, Россия

<sup>3</sup>Чувашский государственный педагогический университет им. И.Я. Яковлева,  
428000 Чебоксары, Россия

<sup>4</sup>Чувашская государственная сельскохозяйственная академия,  
428003 Чебоксары, Россия

\*E-mail: [filippov38-gm@yandex.ru](mailto:filippov38-gm@yandex.ru)

Поступила в редакцию 26.07.2018 г.

После доработки 26.09.2018 г.

Принята к публикации 30.09.2018 г.

Исследуются процессы прохождения квантовых и классических заряженных частиц через пористые пленки. Анализ прохождения квантовых частиц производится посредством численного решения уравнения Шредингера. В рамках классической электродинамики производится расчет поляризационной силы, действующей на заряд. В задаче прохождения ионов с большими значениями зарядов через ультратонкие углеродные пленки анализируется возможность образования пор в пленках. В целях более ясного понимания процесса производится математическое моделирование пленки, сопровождающееся выяснением наиболее важных поляризационных свойств. Расчеты показали возможность перфорирования пленки вследствие воздействия пондеромоторных сил, генерируемых сильным поляризационным полем волнового пакета проходящего иона.

**Ключевые слова:** тонкие пленки, пористые структуры, волновой пакет, поляризационные поля и силы.

**DOI:** 10.1134/S0207352819070060

### ВВЕДЕНИЕ

Создание мембран различного назначения является в настоящее время одной из интенсивно развивающихся отраслей современной технологии. Это порождает большое количество новых задач, которые в силу их специфичности, не были рассмотрены во все предшествовавшие годы развития академической науки. Специфика новых задач объясняется, прежде всего, тем, что речь идет о мембранах столь малой толщины (иногда толщиной всего лишь в один атом), что ранее казалось практически невыполнимым. Примеров тому очень много, поэтому отметим здесь только те, которые непосредственно относятся к теме данной работы. Исследователи из университета Билефельда [1] систематически работают над технологиями преобразования ультратонких пленок в наномембраны. Создавая поры в графене, авторы работы [2] исследовали селективность получаемых таким образом мембран по отношению к прохождению различных молекулярных и атом-

ных ионов. В [3] мембраны применяли в проблеме опреснения морской воды. К этому же направлению исследований относятся работы [4–13].

Целью работы является проверка и уточнение модели перфорирования тонких углеродных пленок при помощи многозарядных ионов. В работе применены как микроскопический подход с использованием квантовой механики, так и расчет, основанный на применении законов классической электродинамики. Второй подход является естественным продолжением первого, в котором используются уравнения квантовой механики в форме Эренфеста, усредненные по текущему квантово-механическому состоянию движущегося волнового пакета. Фактически он представляет собой первое классическое приближение более сложной квантово-механической задачи.

### КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ

Приводим квантово-механический расчет прохождения волнового пакета электрона через

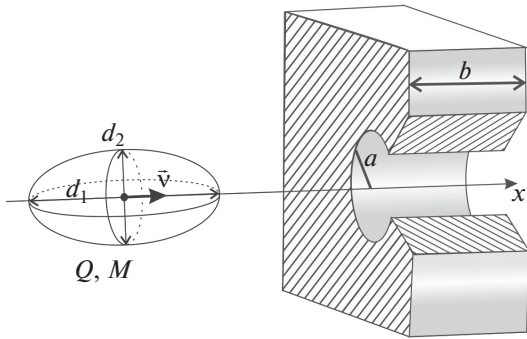


Рис. 1. Изображение гауссова волнового пакета частицы, проходящего через нанопору.

пору, диаметр которой меньше среднеквадратичной ширины пакета.

Предположим, что волновой пакет частицы массой  $M$ , зарядом  $Q$ , движется вдоль оси  $x$  со скоростью  $v$  (рис. 1). Волновая функция (ВФ) в начальный момент времени  $t = 0$  имеет вид:

$$\Psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\pi^{3/4} \sqrt{d_1 d_2}} \exp \left\{ ipx - \frac{1}{2} \left[ \frac{x^2}{d_1^2} + \frac{y^2 + z^2}{d_2^2} \right] \right\},$$

где импульс частицы  $p = Mv$ . Волновой пакет частицы проникает через круглое отверстие радиусом  $a$  в полупрозрачной перегородке толщиной  $b$ , потенциал в которой постоянен и равен  $U(\mathbf{r}) = U_0$ . Центр пакета движется по оси поры, так что задача является аксиально-симметричной.

Решая нестационарное уравнение Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta \Psi + QU(\mathbf{r})\Psi,$$

можно найти динамику волнового пакета и определить вероятности прохождения и отражения квантовой частицы от поры, а также распределение плотности вероятности обнаружения частицы в различных точках пространства. Поскольку масса частицы  $M \gg 1$  (порядка  $10^5$  ат. ед.), вводим

“медленное” время  $\tau = \frac{t}{M}$ . В результате получаем уравнение Шредингера для частицы с массой, равной массе электрона (1 ат. ед.) в “медленном” времени и “сильном” потенциале  $MU$ ,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta \Psi + MQU(\mathbf{r})\Psi, \\ \Psi|_{\tau=0} = \Psi_0(\mathbf{r}).$$

Решаем двумерное (с учетом аксиальной симметрии) нестационарное уравнение Шредингера на сетке с помощью разностной схемы второго порядка типа Кранка–Николсона и получаем эволюцию состояния во времени. Результаты расчетов для электрона ( $M = 1$  ат. ед.,  $|Q| = 1$  ат. ед.),

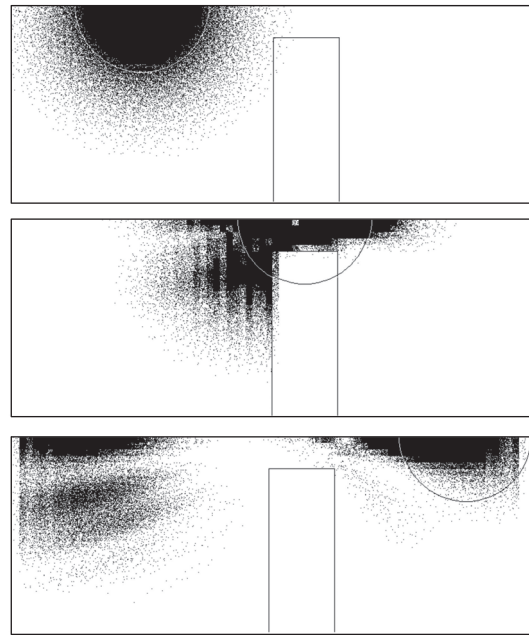
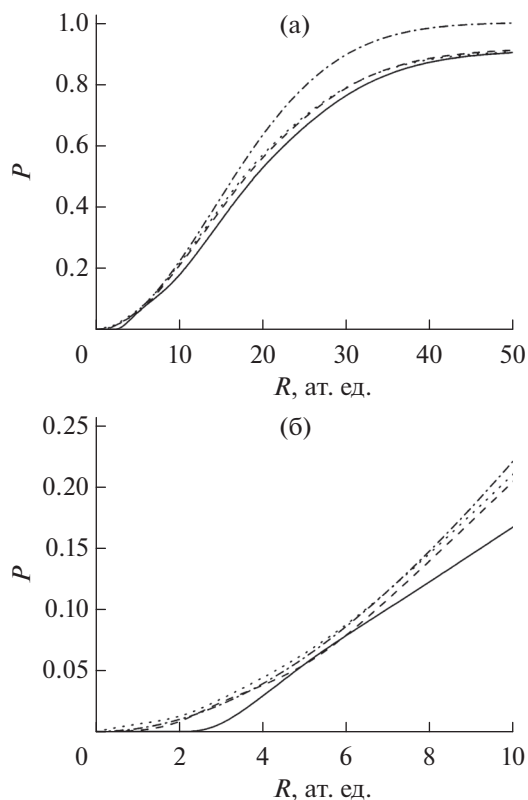


Рис. 2. Эволюция волновой функции электрона, проходящего со скоростью  $v = 1$  ат. ед. через пору радиуса  $a = 10$  ат. ед.

движущегося с  $v = 1$  ат. ед. через круглое отверстие радиусом  $a = 10$  ат. ед., приведены на рис. 2. Начальные ширины гауссова пакета частицы  $d_1 = d_2 = 20$  ат. ед. На скриншотах по горизонтали отложена продольная координата в рабочей цилиндрической области, ограниченной бесконечно высокими стенками (нулевые граничные условия), а по вертикали – поперечная. Приведены рельефы плотности вероятности в плоскости  $(x, y)$ , отображенные методом градаций яркости. Верхний край рисунка – ось цилиндра, вниз отложена поперечная координата. В виде прямоугольников показана рабочая цилиндрическая область и барьер, а в виде эллипса – положение пакета (на множестве точек, где плотность вероятности равна половине максимального значения) в случае свободного движения. Вероятность прохождения волнового пакета через пору равна 0.2255. Процесс туннелирования через перегородку в нашем случае несущественен (менее 0.002), поскольку выбраны параметры потенциального барьера  $b = 20$  ат. ед.,  $U_0 = 1$  ат. ед. После прохождения волновой пакет частицы локализуется в окрестности оси симметрии системы.

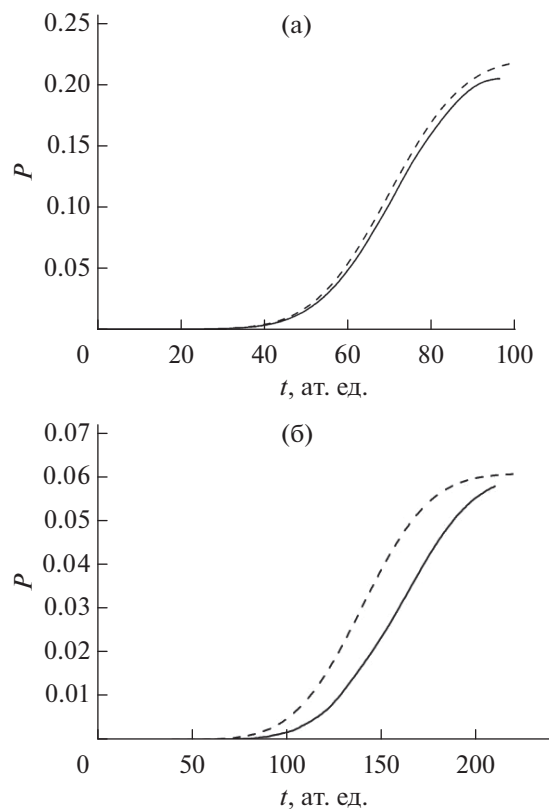
На рис. 3а, 3б показана вероятность прохождения электрона сквозь круглую пору в зависимости от ее радиуса  $R$ . Сплошная кривая для  $v = 0.5$  ат. ед., штрихи – для  $v = 1$  ат. ед., точки – для  $v = 2$  ат. ед. Штрихпунктирная кривая – для прохождения классических частиц, когда проходит вся фракция волнового пакета, попадаю-



**Рис. 3.** Вероятность прохождения волнового пакета электрона ( $d_1 = d_2 = 20$  ат. ед.) через круглую пору в зависимости от ее радиуса  $R$ : а – сплошная кривая для  $v = 0.5$ , штрихи для  $v = 1$ , точки для  $v = 2$ , штрихпунктир – для прохождения “классических” частиц, б – более подробно показана область малых  $R$ .

шая в сечение поры. Данная вероятность не зависит от скорости, и равна  $P = 1 - \exp\{-(R/d_2)^2\}$ . На рис. 3б более подробно показана область малых  $R$ . Видно, что с увеличением скорости возрастает вероятность прохождения, но незначительно, особенно в случае достаточно большой скорости. Только в области малых  $R$  наблюдается значительная зависимость вероятности прохождения от скорости – при малых скоростях прохождения вообще нет. Вероятность классического прохождения заметно превышает квантовую при больших радиусах поры. Отметим, что для очень малых пор и достаточно больших скоростей квантовая вероятность заметно превышает классическую (точечная кривая идет выше штрихпунктирной вплоть до  $R = 7$  ат. ед.).

На рис. 4 показана вероятность прохождения волнового пакета электрона через круглую пору в зависимости от времени движения. Сплошная кривая для квантового случая, штрихи для прохождения классических частиц, когда проходит вся фракция волнового пакета, попадающего в сечение поры. На рис. 4а – для радиуса поры



**Рис. 4.** Вероятность прохождения волнового пакета электрона (ат. ед.) через круглую пору в зависимости от времени движения. Сплошная кривая – в квантовом случае, штрихи – для прохождения “классических” частиц: а – для радиуса поры 10 ат. ед. и скорости движения электрона 1 ат. ед., б – для радиуса поры 5 ат. ед. и скорости движения электрона 0.5 ат. ед.

$R = 10$  ат. ед. и скорости движения электрона  $v = 1$  ат. ед. На рис. 4б – для радиуса поры  $R = 5$  ат. ед. и  $v = 0.5$  ат. ед. соответственно. Видно, что в случае малых скоростей и малых радиусов поры наблюдается заметное отставание прохождения квантового пакета от соответствующего классического пакета.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ УГЛЕРОДНОЙ ПЛЕНКИ

Расчет величины силы для разрыва углеродной пленки нанометровой толщины (CarbonNanoMembrane – CNM) путем приложения напряжения сдвига производился при помощи молекулярно-динамического моделирования. Для расчета был использован код LAMMPS [15]. Структура пленки была определена на основе экспериментальных данных из работ [17, 18], и, как указано, представляла собой “сшитые” электронным пучком молекулы бифенил-4-тиола. Для конструирования молекулярной структуры был создан массив ориентированных молекул бифенил-4-тиола, затем молекулы были объедине-

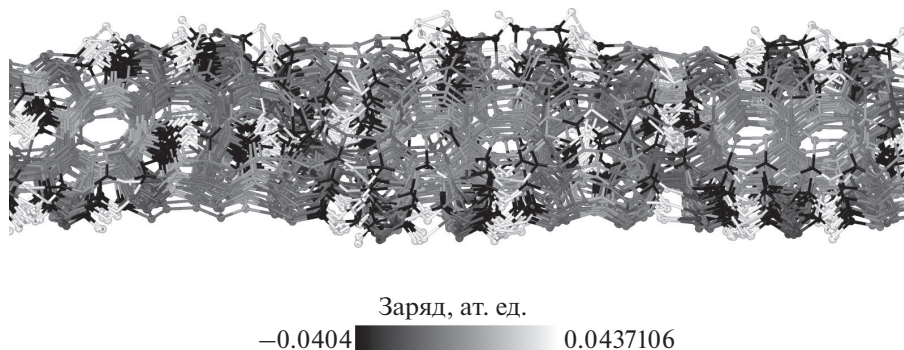


Рис. 5. Углеродная наномембрана.

ны с соседями в своем слое и с другими слоями случайными ковалентными связями с соблюдением валентности, что имитировало облучение электронным пучком пленки, полученной методом Ленгмюра–Блоджетт (рис. 5). Для расчета равновесной структуры с минимумом энергии в данной конфигурации было применено силовое поле CHARMM [19]. Полученные после минимизации структуры подготавливались к расчету в пакете LAMMPS при помощи процедуры минимизации энергии в силовом поле ReaxFF [20] с применением процедуры уравнивания заряда [21]. После минимизации энергии пленка приводилась в равновесное состояние при помощи термостата в Berendsen [22], а затем Nose-Hoover [23] для достижения статистического равновесия с каноническим ансамблем NVT в течение 10 пс (времени моделирования). После установления равновесной температуры термостат отключался и для расчета применялся микроканонический ансамбль NVE. Для оценки значения силы сдвига при разрыве пленки проводился расчет с исполь-

зованием различных сил. По полученным данным была определена минимальная сила, необходимая для разрыва пленки при поперечном сдвиге, которая составила  $0.38 \times 10^{-4}$  ат. ед.

Приведенная модель была использована для оценок возможности образования поры при пролете многозарядного иона  $\text{Xe}^{+35}$  через углеродную наномембрану в эксперименте [16].

На рис. 6 представлены зависимости электрической силы, отнесенной к единице длины окружности поры, образующейся в углеродной наномембране, при воздействии на нее гауссова пакета  $\text{Xe}^{+35}$ , центр которого располагается на расстоянии  $z_0$  от поверхности мембраны. Сила стремится “вытянуть” часть пленки навстречу движущемуся заряду. Данные показаны для трех значений радиуса поры. Гауссова ширина пакета равна 20 ат. ед. Прямая с надписью “порог” определяет пороговое абсолютное значение силы для мембраны, полученной нами посредством численного моделирования. При превышении силой ее порогового значения в пленке образуется пора.

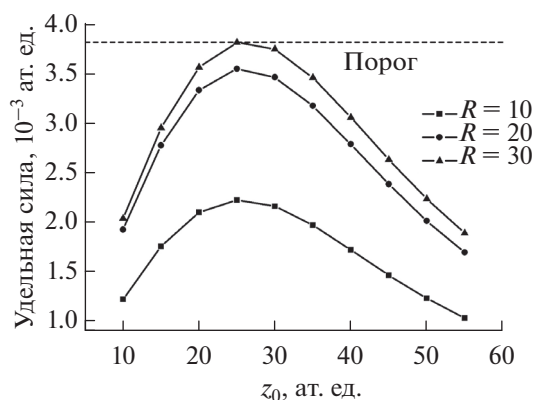


Рис. 6. Зависимость электрической силы, отнесенной к единице длины окружности поры, образующейся в углеродной наномембране при воздействии на нее волнового пакета иона  $\text{Xe}^{+35}$  от расстояния  $z_0$  между центром пакета и поверхностью мембраны.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрено прохождение классических и квантовых заряженных частиц через пористые пленки. Было показано, что в области больших длин волн квантовых частиц наблюдается превышение вероятности прохождения волны по отношению к прохождению потока классических частиц. В области коротких волн имеет место пониженная вероятность прохождения квантовых частиц по сравнению с классическими. Расчеты показали наличие временной задержки при прохождении квантовой частицы по отношению к потоку классических частиц.

Проведено математическое моделирование углеродной пленки. Данный подход является важным дополнением к стандартным теоретическим методам исследования, незаменимым в случае трудностей проведения непосредственных изме-

рений. Математическое моделирование позволило обнаружить существенное отличие пленок, использованных в экспериментах [16], от значительно более упорядоченных, таких, как графен. Показано, что электрическое поляризационное поле, производимое движущимся волновым пакетом многозарядного иона, способно создавать поры в ультратонкой углеродной пленке. Тем самым показана принципиальная возможность измерения параметров волновых пакетов частиц посредством пропускания их через специальным способом приготовленные твердотельные пленки.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Anselmetti D., Götzhäuser A.* // *Angewandte Chemie International Edition*. 2014. V. 53. № 46. P. 12300. doi 10.1002/anie.201406789
2. *Rollings R.C., Kuan A.T., Golovchenko J.A.* // *Nature Communications*. 2016. V. 7. P. 11408. doi 10.1038/ncomms11408
3. *Cohen-Tanugi D., Grossman J.C.* // *J. Chem. Phys.* 2014. V. 141. № 7. P. 074704. doi 10.1063/1.4892638
4. *Goban A., Choi K.S., Alton D.J., Ding D., Lacroûte C., Pototschnig M., Thiele T., Stern N.P., Kimble H.J.* // *Phys. Rev. Lett.* 2012. V. 109. № 3. P. 033603. doi 10.1103/PhysRevLett.109.033603
5. *Kimble H.J.* // *Nature*. 2008. V. 453. P. 1023. doi 10.1038/nature07127
6. *Sint K., Wang B., Král P.* // *J. Am. Chem. Soc.* 2008. V. 130. № 49. P. 16448. doi 10.1021/ja804409f
7. *Samin S., van Roij R.* // *Phys. Rev. Lett.* 2017. V. 118. № 1. P. 014502. doi 10.1103/PhysRevLett.118.014502
8. *Malpetti D., Roscilde T.* // *Phys. Rev. Lett.* 2016. V. 117. № 13. P. 130401. doi 10.1103/PhysRevLett.117.130401
9. *Skoulidis A.I., Ackerman D.M., Johnson J.K., Sholl D.S.* // *Phys. Rev. Lett.* 2002. V. 89. № 18. P. 185901. doi 10.1103/PhysRevLett.89.185901
10. *Zami-Pierre F., de Loubens R., Quintard M., Davit Y.* // *Phys. Rev. Lett.* 2016. V. 117. № 7. P. 074502. doi 10.1103/PhysRevLett.117.074502
11. *Rubin S., Suss M.E., Biesheuvel P.M., Bercovici M.* // *Phys. Rev. Lett.* 2016. V. 117. № 23. P. 234502. doi 10.1103/PhysRevLett.117.234502
12. *Nicholl R.J.T., Lavrik N.V., Vlassiouk I., Srijanto B.R., Bolotin K.I.* // *Phys. Rev. Lett.* 2017. V. 118. № 26. P. 266101. doi 10.1103/PhysRevLett.118.266101
13. *Kumar R.T.R., Badel X., Viktor G., Linnros J., Schuch R.* // *Nanotechnology*. 2005. V. 16. № 9. P. 1697. doi 10.1088/0957-4484/16/9/048
14. *Filippov G.M.* // *Izvestiya Rossiiskoi Akademii Nauk. Seriya Fizicheskaya*. 2012. V. 76. № 6. P. 759 [in Russian].
15. *Plimpton S.* // *J. Comput. Chem.* 1995. V. 17. № 1. P. 1. doi 10.1006/jcph.1995.1039
16. *Wilhelm R.A., Gruber E., Ritter R., Heller R., Facsko S., Aumayr F.* // *Phys. Rev. Lett.* 2014. V. 112. № 15. P. 153201. doi 10.1103/PhysRevLett.112.153201
17. *Eck W., Küller A., Grunze M., Völkel B., Götzhäuser A.* // *Adv. Mater.* 2005. V. 17. № 21. P. 2583. doi 10.1016/j.physleta.2008.08.005
18. *Matei D.G., Muzik H., Götzhäuser A., Turchanin A.* // *Langmuir*. 2012. V. 28. № 39. P. 13905. doi 10.1021/la302821w
19. *Brooks B.R., Brooks C.L., Mackerell A.D., Nilsson L., Petrella R.J., Roux B., Won Y., Archontis G., Bartels C., Boresch S., Caffisch A., Caves L., et al.* // *J. Comput. Chem.* 2009. V. 30. № 10. P. 1545. doi 10.1002/jcc.21287
20. *van Duin A.C.T., Dasgupta S., Lorant F., Goddard W.A.* // *J. Phys. Chem. A*. 2001. V. 105. № 41. P. 9396. doi 10.1021/jp004368u
21. *Rappe A.K., Goddard W.A.* // *J. Phys. Chem.-US*. 1991. V. 95. № 8. P. 3358. doi 10.1021/j100161a070
22. *Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., Gunsteren W.F.V., Di-Nola A., Haak J.R.* // *J. Chem. Phys.* 1984. V. 81. № 8. P. 3684. doi 10.1063/1.4448118
23. *Nosé S.* // *Molecular Physics*. 1984. V. 52. № 2. P. 255. doi 10.1080/00268978400101201

## Passage of Waves and Particles through Porous Structure (I)

G. M. Filippov, V. A. Aleksandrov, I. V. Lysova, A. V. Stepanov

The passage of charged projectiles through the porous structure is investigated for the goal of calculation the forced action of a wave packet (or the classical particle bunch) on the porous walls. An analysis of the passage of quantum particles is performed by numerically solving the Schrödinger equation. In the framework of classical electrodynamics, the polarization force acting on the charge is calculated. In the problem of passage of ions with large values of charges through ultrathin carbon films, the possibility of pore performing in the films is analyzed. In order to understand the process more clearly, a mathematical modeling of the film is performed, accompanied by clarification of the most important polarization properties. Calculations showed the possibility of perforating the film due to the influence of ponderomotive forces generated by the strong polarization field of the wave packet of the passing ion.

**Keywords:** thin films, porous structure, wave packet, polarization fields and forces.