

# ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ПРИ САМОСБОРКЕ ЛИНЕЙНО-ЦЕПОЧЕЧНОГО УГЛЕРОДА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Александров В.А., Михайлов Ф.Н.<sup>1</sup>

Чувашский государственный университет им. И.Н. Ульянова,  
Россия, 428000, Чебоксары, Университетская улица, 38,  
E-mail: aleks0v0a@yandex.ru

<sup>1</sup> Чувашский государственный педагогический университет им. И.Я. Яковлева,  
каф. ОиТФ, Россия, 428000, Чебоксары, ул. К. Маркса, 38, Тел.: 89373767198,  
E-mail: fedormihailov@yandex.ru

Одной из задач нанотехнологий, имеющей огромное прикладное значение, является создание покрытий, состоящих из упорядоченных цепочек линейно-цепочечного углерода (ЛЦУ). Планируется широкое применение таких покрытий во многих сферах деятельности и перспективных устройствах (например, в высокоэффективных холодных катодах с очень низкой работой выхода – до 0.5 эВ [1]). В работе исследуется процесс выращивания ЛЦУ на подложке из газопаровой фазы

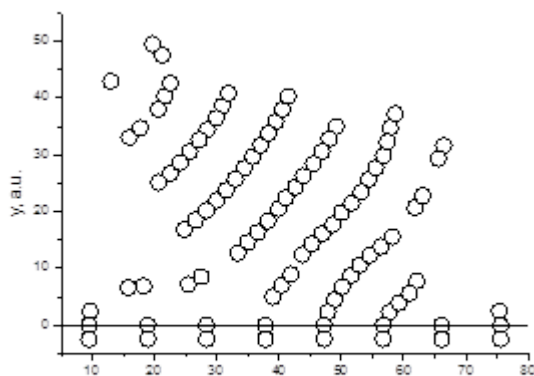


Рис. 1. Самосборка ЛЦУ.

атомов углерода методом молекулярной динамики. В рабочей области, имеющей периодические граничные условия на боковых стенках, имеются атомы углерода, медленно оседающие на подложку, состоящую из двух слоев аналогичных атомов, создающих центры конденсации. При образовании С-С связи возможно снятие возбуждения посредством излучения кванта света с энергией, равной энергии связи. Имеются, по крайней мере, следующие физически-обоснованные потенциалы: отталкивание по Борю, потенциал С-С связи, Ван-дер-Ваальсовское притяжение на больших расстояниях, потенциал изгиба связи. Производится оптимизация параметров процесса выращивания ЛЦУ на подложке, таких как наличие бомбардировки сторонними атомами, выбор профиля температуры по координатам и времени для обеспечения наилучших условий выращивания и заданного качества цепочек ЛЦУ.

## Литература.

1. Праздников Ю.Е., Божко А.Д., Гусева М.Б., Новиков Н.Д., «Эмиссионные свойства линейно-цепочечного углерода» // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия, 5, 2004. 37-41.