

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени М.В. ЛОМОНОСОВА
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ имени Д.В. СКОБЕЛЬЦЫНА

На правах рукописи

Воронина Екатерина Николаевна

ВОЗДЕЙСТВИЕ БЫСТРЫХ АТОМОВ
НА НАНОСТРУКТУРЫ И ПОЛИМЕРНЫЕ КОМПОЗИТЫ

01.04.08 – физика плазмы

01.04.16 – физика атомного ядра и элементарных частиц

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва 2012

Работа выполнена в Отделе ядерных и космических исследований Научно-исследовательского института ядерной физики имени Д.В. Скобельцына Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор,
Новиков Лев Симонович

Официальные оппоненты: Грум-Гржимайло Алексей Николаевич,
доктор физико-математических наук,
Научно-исследовательский институт ядерной
физики имени Д.В. Скобельцына МГУ имени
М.В. Ломоносова, заведующий отделом

Малов Леонард Александрович,
доктор физико-математических наук,
Объединенный институт ядерных исследований,
ведущий научный сотрудник

Ведущая организация: Научно-исследовательский физико-химический
институт имени Л.Я. Карпова

Защита состоится 28 марта 2012 г. в 15.00 на заседании совета по защите докторских и кандидатских диссертаций Д.501.001.45 при Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, Россия, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 5 (19-й корпус Научно-исследовательского института ядерной физики имени Д.В. Скобельцына МГУ имени М. В. Ломоносова), аудитория 2-15.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Научно-исследовательского института ядерной физики имени Д.В. Скобельцына МГУ имени М.В. Ломоносова.

Автореферат разослан 20 февраля 2012 г.

Ученый секретарь
совета по защите докторских и кандидатских диссертаций Д.501.001.45

кандидат физико-математических наук

О. М. Вохник

Общая характеристика работы

Актуальность темы

Наноматериалы и нанотехнологии найдут в ближайшем будущем широкое применение в космической технике. Работы по созданию наноматериалов космического назначения включены в программы развития нанотехнологий, реализуемые в настоящее время многими государствами, а в ряде стран выделены в самостоятельные программы.

Различные наноструктуры: нанотрубки из углерода и нитрида бора, графен, графеновые наноленты и др. – рассматриваются при проектировании перспективных космических аппаратов (КА) как в качестве самостоятельных материалов для изготовления элементов конструкции и оборудования КА, так и в качестве наполнителей композиционных материалов, которые будут играть весьма важную роль в дальнейшем совершенствовании космической техники.

Одним из главных требований, предъявляемых к материалам КА, является их высокая стойкость к различным по физической природе воздействиям окружающей среды, которые могут приводить к значительным изменениям свойств материалов. В наибольшей степени подвержены воздействию космической среды материалы, элементы конструкции и оборудования, располагаемые на внешней поверхности КА. Для них серьезную опасность представляет воздействие холодной плазмы ионосферы Земли с энергией частиц $\sim 0,1$ эВ и горячей магнитосферной плазмы, энергия частиц которой лежит в диапазоне $\sim 10^2$ – 10^5 эВ. При воздействии холодной плазмы основным механизмом повреждения и даже разрушения материалов является их химическое распыление атомарным кислородом – доминирующим компонентом ионосферы в интервале высот ~ 200 – 800 км, где осуществляются, в частности, полеты пилотируемых космических кораблей и орбитальных станций (350–400 км).

Атомарный кислород, обладающий высокой химической активностью, образует при взаимодействии с материалами поверхности КА летучие соединения, покидающие поверхность. Эффективность этого процесса возрастает за счет обусловленной орбитальной скоростью КА дополнительной энергии столкновения атомов кислорода с поверхностью, составляющей около 5 эВ. В результате толщина слоя материала, уносимого с поверхности, может достигать 10–100 мкм после пребывания на орбите в течение года. Наименее стойки к химическому распылению полимерные материалы, которые широко используются в составе конструкции современных КА.

Воздействие горячей плазмы реализуется через механизмы физического распыления материалов налетающими атомами и образования ими структурных радиационных дефектов. Отметим, что аналогичное воздействие на материалы при полете КА за пределами магнитосферы Земли оказывает плазма солнечного ветра, энергия протонов которой, определяемая направленной скоростью потока солнечного ветра, составляет около 10^3 эВ.

Указанные механизмы воздействия космической плазмы на материалы достаточно хорошо изучены по отношению к традиционным объемным материалам космической техники. Однако для наноструктурированных материалов их теоретическое и экспериментальное изучение только начинается. Диссертационная работа, посвященная рассмотрению различных аспектов проблемы воздействия космической плазмы на наноструктуры и наноматериалы, является одним из первых исследований в данной области.

Цель и задачи работы

Целью диссертационной работы являлось исследование методами математического моделирования процессов деструкции нанотрубок и нанолент из углерода и нитрида бора, графена и гексагонального нитрида бора, а также композитов на основе полимерных матриц с наноразмерными наполнителями под действием атомов O, H, He и др. с энергиями $\sim 1-10^5$ эВ.

В работе решены следующие задачи:

- анализ и оптимизация имеющихся расчетных методов и программных комплексов применительно к моделированию процессов воздействия частиц холодной и горячей космической плазмы на наноструктуры и полимерные композиты с наноразмерными наполнителями;
- моделирование методом теории функционала плотности (DFT) процессов адсорбции атомов кислорода на поверхности наноструктур, расчет энергии адсорбции для различных наноструктур, определение влияния таких процессов на строение и электронную структуру исследуемых объектов при воздействии на них одиночных атомов и при коллективном воздействии;
- моделирование методом DFT в схеме сильной связи с самосогласованными зарядами (SCC DFTB) процессов образования дефектов в наноструктурах в результате воздействия атомов H, C, O с энергиями $\sim 1-200$ эВ;
- исследование диспергирования наноразмерных частиц в полимерной матрице методом диссипативной динамики частиц (DPD), моделирование методом Монте-Карло эрозии полимерных нанокомпозитов под действием атомарного кислорода и процессов взаимодействия атомов H, He, O при энергии $1-100$ кэВ с многослойными наноструктурами.

Научная новизна результатов и выводов

1. Методом DFT исследованы изменения структурных параметров нанотрубок и нанолент из углерода и нитрида бора, графена и гексагонального нитрида бора (*h*-BN) при адсорбции на их поверхности атомов кислорода. Установлено, что присоединение атомов к поверхности рассматриваемых наноструктур вызывает удлинение и смещение межатомных связей, приводящее к общей деформации наноструктур. Исследована специфика коллективного воздействия нескольких

атомов кислорода на наноструктуры, усиливающего указанные выше эффекты. Впервые получены зависимости изменений структурных параметров углеродных нанотрубок (УНТ) и величины энергии адсорбции от их диаметра.

2. Выполнено математическое моделирование процесса «расстегивания» (*unzipping*) нанотрубок при присоединении к их поверхности пар атомов кислорода. Установлено, что с увеличением диаметра УНТ растет пороговое число присоединенных пар атомов, соответствующее началу процесса «расстегивания». Впервые показано, что нанотрубки из нитрида бора (BN-НТ) более устойчивы к возникновению данного эффекта за счет химического взаимодействия между адсорбированными атомами кислорода, которое отсутствует в случае УНТ.
3. Методом SCC DFTB исследовано образование вакансий в УНТ и BN-НТ, графене и листах *h*-BN под действием атомов O и H с энергиями до 200 эВ. Определены пороговые энергии образования вакансий в графене и *h*-BN. Установлено, что пороговая энергия выбивания атома зависит от величины заряда, переданного ему налетающей частицей.
4. Методами молекулярной динамики и DPD исследованы процессы диспергирования наноразмерных частиц наполнителя (УНТ, полиоргансилоксана, Al_2O_3 , TiO_2 , WC) в полимерной матрице. Установлено, что равномерное распределение частиц наполнителя достигается в узком диапазоне параметров, характеризующих взаимодействие частиц между собой и с полимером. В рамках DPD-модели показано, что функционализация частиц наполнителя путем присоединения к их поверхности молекулярных групп может обеспечить равномерное распределение частиц в полимерной матрице.
5. Методом Монте–Карло произведено моделирование процессов торможения атомов H, He и O с энергиями 1–100 кэВ в многослойных наноразмерных структурах «полимер–металл». Установлено, что последовательность расположения слоев оказывает существенное влияние на величину переданной энергии и количество образующихся структурных дефектов в каждом слое, обусловленное особенностями обратного рассеяния частиц в таких структурах.

Практическая значимость результатов работы определяется тем, что они могут быть непосредственно использованы при оценке стойкости наноструктурированных материалов к воздействию космической плазмы, определении предельных сроков их эксплуатации в различных областях околоземного пространства, создании технологий изготовления наноматериалов космической техники, в первую очередь полимерных композитов, разработке методов повышения стойкости материалов к воздействию космической среды.

На защиту выносятся следующие положения

1. Рассчитанные значения энергии адсорбции атомов кислорода на поверхности кресельных и зигзагообразных УНТ и BN-НТ, графена и *h*-BN при присоединении к поверхности указанных наноструктур одиночных атомов кислорода и их коллективном воздействии. Зависимости энергии адсорбции и относительного удлинения межатомных связей от диаметра УНТ, демонстрирующие, что кресельные нанотрубки сильнее подвержены воздействию атомов кислорода, чем зигзагообразные.
2. Результаты моделирования процесса «расстегивания» (*unzipping*) нанотрубок из углерода и нитрида бора под воздействием пар атомов кислорода, показывающие, что с ростом диаметра УНТ проявляют большую устойчивость к такому воздействию, а в BN-НТ, в отличие от УНТ, между адсорбированными атомами кислорода образуется дополнительное химическое взаимодействие, препятствующее их деструкции.
3. Результаты исследования формирования на поверхности УНТ кислородсодержащих групп при различных флюенсах воздействующих атомов кислорода.
4. Расчетные и экспериментальные данные, характеризующие процесс диспергирования наноразмерных частиц наполнителя в полимерной матрице.
5. Полученные распределения переданной энергии по толщине многослойных наноразмерных структур «полимер–металл» при различной последовательности расположения слоев, демонстрирующие влияние процессов обратного рассеяния на энерговыделение в каждом слое.

Достоверность результатов определяется использованием хорошо апробированных расчетных методов и программных комплексов, согласием результатов математического моделирования с результатами расчетов, выполненных другими авторами, и с экспериментальными данными.

Личный вклад автора в работы, вошедшие в диссертацию, является определяющим при разработке теоретических моделей, выборе методов расчетов, выполнении моделирования исследуемых структур и интерпретации полученных результатов.

Апробация работы

Основные результаты исследований докладывались на следующих международных и всероссийских конференциях: 9th International Conference on Protection of Materials and Structures From Space Environment, ICPMSE-9, Toronto, 2008; XI Российско-китайском симпозиуме «Новые материалы и технологии», Санкт-Петербург, 2011; 9-й Международной конференции «Взаимодействие излучений с твердым телом», Минск, 2011; XVIII, XX и XXI Международных конференциях «Радиационная физика твердого

тела», Севастополь, 2008, 2010, 2011; XVII и XVIII Международных конференциях по электростатическим ускорителям и пучковым технологиям, Обнинск, 2008, 2010; Всероссийской научно-технической конференции «Актуальные проблемы ракетно-космического приборостроения и информационных технологий», Москва, 2008; 2-й Всероссийской научной школе для молодежи «Концентрированные потоки энергии в индустрии наносистем, материалов и живых систем», Москва, 2009; X, XI и XII Межвузовских научных школах молодых специалистов «Концентрированные потоки энергии в космической технике, электронике, экологии и медицине», Москва, 2009–2011; 1-й и 2-й Всероссийских школах-семинарах студентов, аспирантов и молодых ученых «Функциональные наноматериалы для космической техники», Москва, 2010, 2011; IX Курчатовской молодежной научной школе, Москва, 2011.

Публикации

Материалы диссертационной работы опубликованы в 27 печатных работах, в том числе в 8 статьях в рецензируемых журналах, включенных в перечень ВАК, в 19 докладах в сборниках трудов конференций.

Структура и объем диссертации

Диссертационная работа состоит из Введения, 5 разделов и Заключения, изложена на 149 страницах и содержит 86 рисунков, 10 таблиц и 134 библиографические ссылки.

Содержание работы

Во **Введении** дано обоснование актуальности темы диссертационной работы, сформулированы ее основные задачи, показаны научная новизна и практическая значимость результатов, представлена структура диссертации.

В **Разделе 1** описаны отличительные особенности наноструктур и композитов на их основе, условия эксплуатации материалов в космическом пространстве и физические свойства холодной и горячей космической плазмы, проанализированы механизмы ее воздействия на наноматериалы и обсуждены перспективы применения наноструктур и наноматериалов в космической технике.

Отмечается, что в интервале высот 200–800 км плотность набегающего потока атомарного кислорода, воздействующего на КА, составляет $\sim 10^{13} - 10^{15} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$, а годовой флюенс лежит в диапазоне $10^{18} - 10^{23} \text{ см}^{-2}$. Энергетические спектры изотропной по отношению к движущемуся КА горячей магнитосферной плазмы описываются суперпозицией двух максвелловских распределений с характерными энергиями 0,2–0,4 кэВ и 5–10 кэВ при концентрации частиц $0,1 - 1 \text{ см}^{-3}$. Основным ионным компонентом в составе горячей плазмы являются протоны, однако в ней могут присутствовать в значительном количестве ионы O^+ , He^{2+} , O^{2+} ионосферного происхождения.

В Разделе 2 описаны основные принципы и методы многомасштабного моделирования наноструктур и наноматериалов. На основании их анализа для решения задач диссертации выбраны следующие методы: метод теории функционала плотности (DFT), метод DFT в схеме сильной связи с самосогласованными зарядами (SCC DFTB), метод молекулярной динамики, метод диссипативной динамики частиц (DPD).

Метод DFT является одним из наиболее часто используемых и универсальных методов расчетов в ядерной и атомной физике, физике твердого тела, квантовой химии. В настоящей работе он применялся для моделирования процессов адсорбции атомов О на поверхности наноструктур из углерода и нитрида бора. В методе DFT энергия системы взаимодействующих электронов представляется в виде функционала от электронной плотности $n(\mathbf{r})$, причем минимальному значению такого функционала соответствует основное состояние системы. С учетом приближения Борна–Оппенгеймера, в рамках которого тяжелые и медленно движущиеся ядра и легкие быстрые электроны рассматриваются как две различные подсистемы, энергию $E_{KS}[n]$ электронной системы можно записать в виде:

$$E_{KS}[n] = T_s[n] + E_H[n] + \int d\mathbf{r} \mathbf{V}_{\text{ext}} n(\mathbf{r}) + E_{NN} + E_{XC}[n], \quad (1)$$

где $T_s[n]$, $E_H[n]$ – кинетическая энергия невзаимодействующих электронов и классическая энергия их электростатического взаимодействия друг с другом, также рассматриваемые как функционалы от $n(\mathbf{r})$; \mathbf{V}_{ext} – создаваемый ядрами потенциал, в котором движутся электроны; E_{NN} – энергия электростатического взаимодействия ядер; $E_{XC}[n]$ – обменно-корреляционный функционал. Минимизация функционала $E_{KS}[n]$ в (1) при условии сохранения числа частиц приводит к системе уравнений Кона–Шэма:

$$\mathbf{H}_{KS} \Psi_i = \varepsilon_i \Psi_i, \quad (2)$$

с эффективным потенциалом \mathbf{V}_{KS} :

$$\mathbf{V}_{KS} = \mathbf{V}_{\text{ext}} + \mathbf{V}_H + \mathbf{V}_{XC} = \mathbf{V}_{\text{ext}} + \int d\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{\delta E_{XC}[n]}{\delta n}. \quad (3)$$

Поскольку обменно-корреляционный функционал $E_{XC}[n]$ в уравнениях Кона–Шэма (2)–(3) явно не определен, при решении конкретных задач используются различные приближения, среди которых наиболее часто применяются приближение локальной плотности (LDA, *local density approximation*) и обобщенное градиентное приближение (GGA, *generalized gradient approximation*). Использование GGA-приближения во многих случаях позволяет повысить точность результатов по сравнению с LDA-приближением.

Для моделирования процессов образования дефектов в наноструктурах под действием налетающих атомов использован метод DFT в схеме сильной связи (DFTB). В методе SCC DFTB реализован учет влияния флуктуаций электронной плотности δn на полную энергию системы E_{KS} , что позволяет использовать данный метод для моделирования систем с гетерогенными ковалентными и ионными связями.

Для расчета энергии взаимодействия нанотрубок с полимерными звеньями применялся метод молекулярной динамики, который основан на уравнениях классической физики и использует эмпирические потенциалы, параметризуемые с помощью экспериментальных данных или квантовомеханических расчетов. Данный метод позволяет исследовать эволюцию системы во времени с учетом термодинамических условий и рассчитать ее некоторые макроскопические свойства. Алгоритмы метода молекулярной динамики также часто используются для проведения квантовомеханических расчетов в рамках приближения Борна–Оппенгеймера.

При моделировании процессов диспергирования наноразмерных частиц наполнителя в полимерной матрице использовался метод DPD, относящийся к мезомасштабному пространственно-временному диапазону. В данном методе производится «огрубление» моделируемой системы, когда отдельные фрагменты молекул, сами молекулы или группы молекул объединяются в так называемые «бусинки», движение которых подчиняется законам классической механики. Метод DPD обеспечивает возможность при интегрировании уравнений движения выбирать в качестве временного шага более длинные промежутки времени, что позволяет производить моделирование системы на значительных временных интервалах.

В Разделе 3 представлены результаты исследования методом DFT процессов адсорбции атомов O на поверхности УНТ, BN-НТ, графена, *h*-BN, а также нанолент из углерода и нитрида бора. С целью исследования влияния на такие процессы хиральности нанотрубок, т.е. ориентации гексагональных ячеек по отношению к их продольной оси, рассматривались два вида нанотрубок различной хиральности: кресельные и зигзагообразные. Модели УНТ с диаметрами 0,5–1,4 нм и длиной ~1,7 нм содержали от 112 до 280 атомов, графена и *h*-BN имели размеры 1,7 × 1,7 нм (98 атомов), нанолент – 0,9 × 1,7 нм (до 70 атомов). Расчеты производились в рамках GGA-приближения с широко известным функционалом PBE.

В результате моделирования для системы, состоящей из атомов O и исходного нанообъекта, определялась оптимальная конфигурация, соответствующая минимальному значению полной энергии этой системы. Для нее вычислялись структурные параметры и энергия адсорбции E_{ads} , которая рассчитывалась как разность между энергией системы $E_{\text{O+HC}}$ и суммы энергий исходных объектов E_{HC} и E_{O} до их взаимодействия:

$$E_{\text{ads}} = E_{\text{O+HC}} - (E_{\text{O}} + E_{\text{HC}}). \quad (4)$$

Было установлено, что предпочтительным вариантом адсорбции атома O на поверхности наноструктур является присоединение атома кислорода к C–C или B–N-связям, причем в случае нанотрубок и нанолент энергия адсорбции в существенной степени зависит от ориентации связей по отношению к продольной оси указанных

наноструктур. В результате адсорбции происходят удлинение связей (вплоть до разрыва) и их смещение по отношению к поверхности структуры, что вызывает ее деформацию, а также заметные изменения в ее электронном строении: пространственное перераспределение электронной плотности, перетекание частичных зарядов к атому О и перестройку электронных состояний. В качестве иллюстрации изменений исследуемых структур на рис. 1 показаны фрагмент листа графена (а) и кресельной УНТ (б) с адсорбированным атомом О.

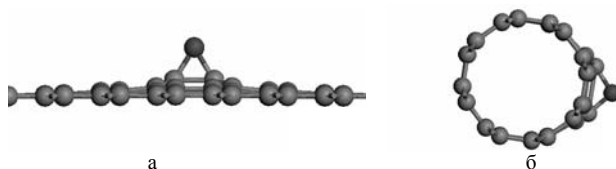


Рис. 1. Фрагмент листа графена (а) и кресельной УНТ (б) с адсорбированным атомом О (вид сбоку)

Для графена при адсорбции происходит незначительное растяжение С–С-связей и ее смещение по отношению к плоскости листа. При этом угол между образовавшимися С–О-связями составляет 60–65°, что свидетельствует об образовании эпоксидной (*epoxide*) структуры. В случае УНТ параметры, характеризующие деформацию нанотрубки при адсорбции, зависят от ориентации связей по отношению к ее оси. При присоединении атома О к «ортогональной» связи (такие связи составляют угол 90° по отношению к продольной оси для кресельных нанотрубок и 60° – для зигзагообразных) наблюдается существенное (около 50%) удлинение С–С-связи (рис. 1б), что можно рассматривать как ее ослабление или разрыв, а угол между образовавшимися С–О-связями превышает 90°, что характерно для так называемой эфирной (*ether*) структуры. При адсорбции на «продольных» связях, которые ориентированы под углами 30° и 0° к оси кресельных и зигзагообразных нанотрубок соответственно, формируются эпоксидные структуры, как и в случае графена.

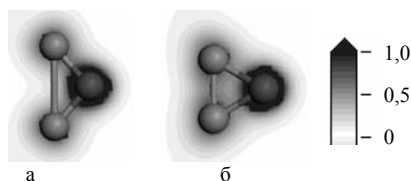


Рис. 2. Пространственное распределение электронной плотности вблизи ортогональной (а) и продольной (б) С–С-связей (отн. ед.)

На рис. 2 с помощью цветового кода представлены рассчитанные пространственные распределения электронной плотности для ортогональной (а) и продольной (б) связей для кресельной УНТ в плоскости, проходящей через атом О и два атома С. Хорошо

видно, что ортогональная С–С-связь оказалась сильно растянутой, а значения электронной плотности вблизи нее существенно ниже, чем вблизи продольной.

Взаимодействие атомов О с наноструктурами из BN приводит к аналогичным результатам, однако в этом случае возникают некоторые особенности из-за неравномерного распределения заряда на их поверхности. В результате происходит более заметное искажение геометрической структуры по сравнению с УНТ и графеном, причем атомы В и N смещаются на разные расстояния от поверхности. Для нанолент (в особенности кресельных) общая деформация структуры выражена значительно сильнее.

Расчет энергии адсорбции показал, что на ее величину оказывает существенное влияние хиральность нанотрубки: если для кресельной УНТ диаметром 0,54 нм абсолютное значение E_{ads} составило 4,3 и 2,9 эВ для ортогональной и продольной связей соответственно, то для зигзагообразной УНТ примерно такого же диаметра – 3,6 и 3,2 эВ. Для BN-НТ такого же диаметра абсолютные значения E_{ads} оказались меньше: 3,4 и 3,0 эВ для ортогональных связей в кресельных и зигзагообразных нанотрубках.

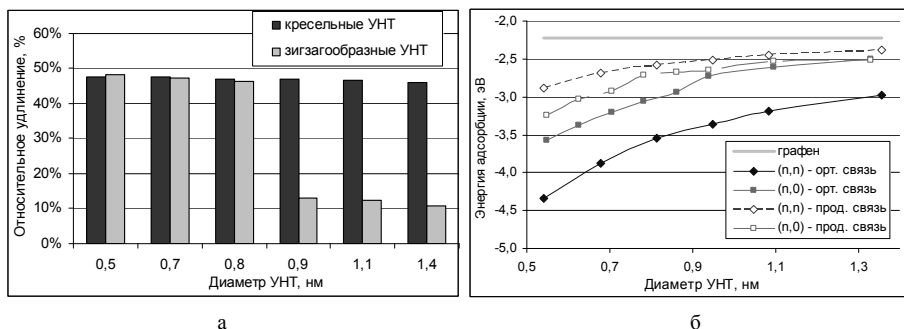


Рис. 3. Относительное удлинение ортогональных С–С связей для УНТ разного диаметра (а) и зависимость энергии адсорбции от диаметра УНТ (б)

Различие в значениях энергии адсорбции при присоединении атома О к ортогональным и продольным связям нанотрубок может быть объяснено влиянием кривизны поверхности, от которой зависит величина напряжения, испытываемого связями. На рис. 3а приведены рассчитанные значения относительного удлинения С–С-связей при адсорбции атома О на поверхности УНТ различного диаметра. Эффект сильного (45–50%) растяжения ортогональных связей наблюдался для кресельных УНТ диаметром до 1,4 нм, а в случае зигзагообразных нанотрубок уже при диаметре ~0,9 нм относительное удлинение связи составило только 13%. На рис. 3б представлена зависимость энергии адсорбции атома О на поверхности кресельных (n,n) и зигзагообразных (n,0) УНТ для ортогональных и продольных связей от диаметра нанотрубок d . Видно, что кривые, соответствующие ортогональным связям (сплошные линии), лежат ниже кривых для продольных (штриховые линии), причем наибольшее

различие в значениях E_{ads} для разных вариантов размещения атома O достигается для кресельных УНТ. По мере увеличения диаметра УНТ кривые начинают сближаться и асимптотически стремятся к утолщенной серой линии, соответствующей графену.

В общем случае увеличение числа атомов O, последовательно воздействующих на наноструктуру, приводит к усилению эффектов удлинения и разрыва связей, причем происходящие изменения тесно связаны с расположением атомов O, адсорбированных ранее. Например, последовательная адсорбция двух атомов O на поверхности графена (рис. 4), вызывает значительное удлинение обеих связей и формирование эфирных структур, а также более заметную деформацию листа по сравнению со случаем, представленным на рис. 1а.

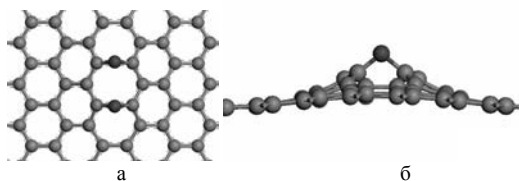


Рис. 4. Адсорбция двух атомов O на поверхности графена: вид сверху (а) и сбоку (б)

Коллективное воздействие атомов O может усиливать изменения в электронном строении нанобъектов. Расчеты показали, что адсорбция нескольких атомов O на поверхности графена вызывает расширение его запрещенной зоны, величина которого зависит не только от количества, но и от расположения адсорбированных атомов O.

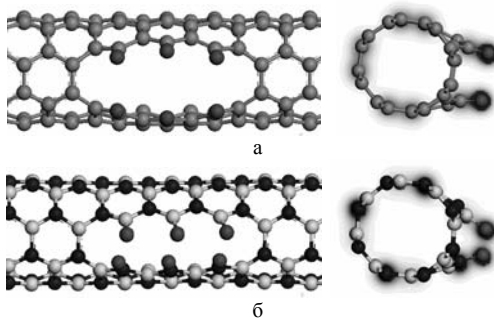


Рис. 5. Эффект «расстегивания» в УНТ (а) и BN-НТ (б)

Особый интерес применительно к условиям в космосе, где плотность потока атомарного кислорода высока, представляет исследование явления «расстегивания» (*unzipping*) нанотрубок, происходящего под воздействием нескольких пар атомов O. На рис. 5а показаны результаты моделирования присоединения трех пар атомов O к ортогональным связям кресельной УНТ диаметром 0,54 нм, вызвавшего образование разрыва стенки УНТ. Аналогичные расчеты, выполненные для BN-НТ такого же диаметра, показали, что адсорбция нескольких пар атомов O также приводит к разрыву

ортогональных В–N-связей, однако расширению зоны разрыва препятствует химическое взаимодействие между атомами О (рис. 5б). Подобные эффекты наблюдаются и для зигзагообразных нанотрубок.

Установлено, что с увеличением диаметра УНТ растет пороговое число присоединенных пар атомов, соответствующее началу процесса «расстегивания». Этот результат иллюстрируется рис. 6а, на котором приведена диаграмма относительного увеличения расстояний между соседними атомами С при последовательной адсорбции пар атомов О на поверхности кресельных УНТ. На рис. 6б показана рассчитанная зависимость энергии адсорбции двух и трех пар атомов О от диаметра кресельных и зигзагообразных УНТ. Видно, что с ростом диаметра энергия адсорбции уменьшается, что свидетельствует об ослаблении воздействия кислорода на наноструктуру.

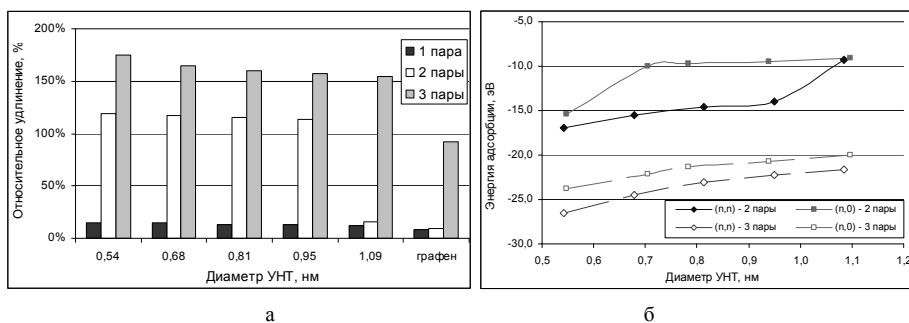


Рис. 6. Диаграмма увеличения расстояния между соседними атомами С (а) и зависимость энергии адсорбции двух и трех пар атомов О от диаметра УНТ (б)

В Разделе 4 с помощью методов DFT и SCC DFTB исследованы процессы образования дефектов в УНТ, BN-НТ, графене и *h*-BN под воздействием быстрых атомов Н, С, О. Энергия образования вакансий E_{form} рассчитывалась в приближении нулевого суммарного заряда:

$$E_{\text{form}} = E_V + \mu_X - E_0, \quad (5)$$

где E_V – энергия наноструктуры с вакансией; E_0 – энергия исходной наноструктуры; μ_X – химический потенциал удаленного атома (С, В или N). Расчеты показали, что строение вакансий в наноструктурах из углерода и нитрида бора различно: в УНТ и графене формируются структуры «пятиугольник–девятиугольник» за счет образования дополнительной связи между атомами С, а в структурах из BN вакансии имеют преимущественно треугольную форму. Энергия образования вакансий в УНТ, как и энергия адсорбции атомов О, сильно зависит от диаметра нанотрубок. Сравнение результатов, полученных методами DFT и SCC DFTB, показало, что метод SCC DFTB, требующий значительно меньших вычислительных ресурсов, обеспечивает расчет энергии образования вакансий с достаточно высокой точностью.

Пороговая энергия выбивания атомов с поверхности наноструктур определялась как минимальная переданная энергия, которой достаточно для того, чтобы атом покинул пределы наноструктуры. Результаты моделирования позволили сделать вывод, что для наноструктур из BN, характеризующихся неравномерным распределением электрического заряда на их поверхности, более корректным является применение метода SCC DFTB, учитывающего данный эффект.

Электрический заряд, передаваемый налетающей частицей атомам наноструктуры, оказывает существенное влияние на величину пороговой энергии образования вакансии. Так, для листа *h*-BN, подвергающегося воздействию отрицательно заряженных частиц, избыточный отрицательный заряд, полученный атомом В, вызывает усиление отталкивания со стороны расположенных рядом с ним атомов N и снижение пороговой энергии образования вакансии, а увеличение отрицательного заряда атома N приводит к противоположному результату. Следовательно, в данном случае вероятность образования вакансий за счет удаления атома В оказывалась выше, чем за счет удаления атома N, что хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными данными.

Моделирование адсорбции атомов O на поверхности наноструктур вблизи одиночных вакансий показало, что атомы O могут легко присоединяться к разорванным связям. Наиболее вероятными оказались два варианта адсорбции: в одном из них атом O присоединялся к разорванной связи, располагаясь над поверхностью, а в другом занимал место удаленного атома, полностью или частично «залечивая» существующий дефект. Наличие дефекта на поверхности наноструктуры приводит к существенному увеличению энергии адсорбции. Например, для кресельной УНТ диаметром 0,54 нм она увеличивается приблизительно 1,5 раза, а наиболее сильные изменения энергии адсорбции происходят для графена и *h*-BN (в 3–4 раза). Вывод об увеличении энергии адсорбции вблизи вакансии подтвержден результатами моделирования взаимодействия с УНТ и BN-НТ радикалов $-\text{CH}_2$, $-\text{CH}_3$, $-\text{NH}_2$, $-\text{OH}$, $-\text{COOH}$ и молекул O_2 .

Процесс образования вакансий в наноструктурах под действием быстрых атомов иллюстрируется рис. 7а, на котором приведены результаты моделирования методом SCC DFTB выбивания атомов С из стенок УНТ налетающими атомом N с энергией 200 эВ (направления скоростей атомов отмечены стрелками). Рис. 7б характеризует процесс передачи энергии налетающего атома углеродной структуре на примере листа графена, бомбардируемого атомами O. Расчеты переданной энергии выполнены для различных значений прицельного параметра *b*, определяемого как расстояние между атомом O и ближайшим к нему атомом С вдоль С–С-связи, и для центра гексагональной ячейки. Видно, что с увеличением прицельного параметра значения переданной энергии снижаются. При пролете атома O через центр ячейки характер зависимости величины переданной энергии от энергии налетающего атома существенно иной, что объясняется низким значением электронной плотности в центре ячейке.

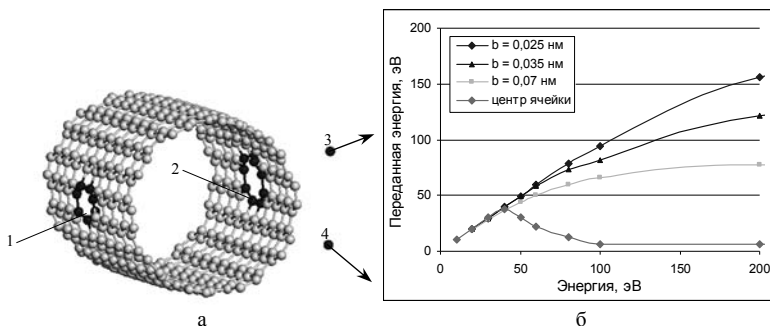


Рис. 7. Образование вакансий в УНТ в результате взаимодействия с атомом Н (а) и зависимость переданной графену энергии от энергии налетающего атома О при различных прицельных параметрах b (б)

С помощью метода SCC DFTB были исследованы особенности формирования кислородсодержащих групп на поверхности УНТ и графена при различных энергиях налетающих атомов О. Установлено, что для УНТ малого диаметра при энергиях атомов О 5–10 эВ в большинстве случаев происходит их захват с образованием эфирных структур, а рассеяние атомов наблюдается только при углах падения более 60° . При тех же условиях на поверхности графена образуются эпоксидные структуры, что согласуется с данными, представленными в разд. 3. С увеличением энергии налетающих атомов О повышается вероятность процессов рассеяния и образования вакансий. При энергии 30–40 эВ атомы О создают в передней стенке бомбардируемой УНТ одиночные вакансии и захватываются ими с образованием преимущественно карбонильных групп. При образовании вакансий в графене атомы О в большинстве случаев замещают в узле решетки выбитые атомы С.

На основании полученных расчетных данных можно сделать следующее общее заключение об изменении соотношения количества кислородсодержащих групп разных видов на поверхности УНТ по мере возрастания флюенса воздействующих атомов О. При малом флюенсе и, соответственно, незначительном количестве адсорбированных атомов О для УНТ относительно большого диаметра (свыше 1–1,5 нм) образуются главным образом эпоксидные структуры. По мере накопления на поверхности адсорбированных атомов О число эпоксидных структур снижается, а эфирных, напротив, растет за счет растяжения С–С-связей в результате коллективного воздействия. При наличии в УНТ вакансий атомы О присоединяются непосредственно к атомам С с разорванной связью, образуя карбонильные группы. Отличительной особенностью механизма воздействия потока атомов О на VN-НТ является возможность частичного «залечивания» образующихся вакансий за счет замещения атомами О выбитых атомов N. Сделанные выводы подтверждаются опубликованными результатами экспериментальных исследований.

В Разделе 5 представлены результаты моделирования методом DPD структуры полимерных нанокомпозитов и исследования влияния структуры на их свойства, включая стойкость к воздействию частиц космической плазмы. Расчеты показали, что наноразмерные частицы наполнителя, в частности УНТ, в полимерной матрице в большинстве случаев объединяются в конгломераты (рис. 8а). Равномерность распределения УНТ в полимерах (рис. 8б) обеспечивается лишь в достаточно узком диапазоне значений параметров, характеризующих взаимодействие УНТ между собой и с полимерными звеньями.

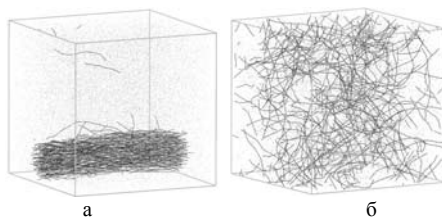


Рис. 8. Результаты моделирования процессов диспергирования УНТ в полимере

С помощью DPD-модели было подтверждено, что функционализация поверхности УНТ может приводить к улучшению их растворимости в матрице. Приложение направленного механического усилия также способно повысить диспергируемость частиц наполнителя в полимерной матрице и обеспечить их выстроенность вдоль заданного направления.

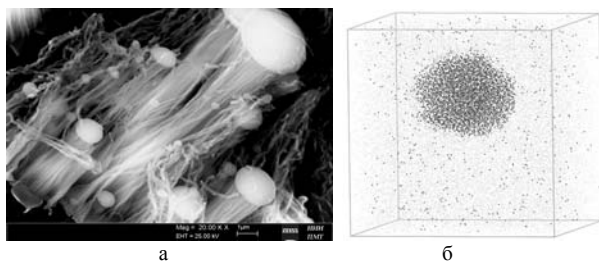


Рис. 9. Структура композитов с наполнителем СПЭС после облучения (а) и результат моделирования (б)

Результаты расчетов подтверждены экспериментальными данными, полученными при облучении образцов полимерных композитов с наноразмерными частицами наполнителя различного состава потоком атомарного кислорода на магнитоплазодинамическом ускорителе НИИЯФ МГУ. В исследованных образцах наблюдалось объединение наночастиц в конгломераты диаметром 1–10 мкм, показанные на рис. 9а на примере образца с частицами сверхразветвленного полиэтоксисилоксана (СПЭС). Подобные сферические конгломераты были получены в результате моделирования методом DPD (рис. 9б).

Образующиеся конгломераты защищают расположенные под ними полимерные звенья от разрушения атомарным кислородом, что хорошо видно на рис. 9а. Методом Монте–Карло было выполнено моделирование процесса эрозии композита с такой структурой под действием потока атомарного кислорода. На рис. 10а,б показана полученная структура композитов при различных диаметрах конгломератов D , находящихся в приповерхностном слое образца. На рис. 10в приведены рассчитанные зависимости потери массы образцов от угла падения атомов О и размеров конгломератов. Из рисунков видно, что полученные в результате моделирования структуры подобны наблюдавшимся в эксперименте, а уменьшение размера конгломератов и увеличение угла падения приводят к ослаблению эрозии.

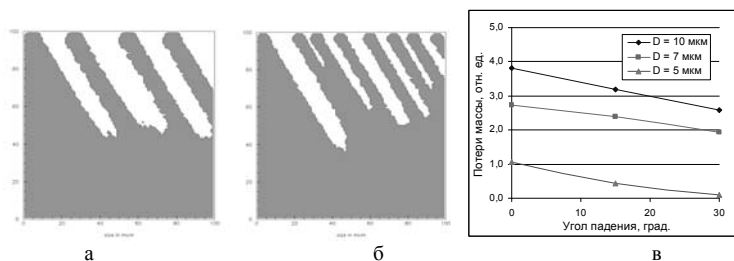


Рис. 10. Результаты моделирования эрозии композита при различных диаметрах конгломератов D (а – 10; б – 7 мкм) и зависимость потерь массы от угла падения потока атомов О (в)

Методом Монте–Карло с помощью программного комплекса SRIM/TRIM моделировались процессы взаимодействия атомов Н, Не и О при энергиях 1–100 кэВ с многослойными структурами «полимер–металл» с толщинами слоев 10–100 нм. Моделирование для двухслойных структур показало, что, несмотря на существенное различие для полимеров и металлов удельных потерь энергии, коэффициентов ослабления потока и вероятности обратного рассеяния налетающих атомов, ослабление потока практически не зависело от порядка расположения слоев. На рис. 11а,б приведены энергетические спектры протонов с исходными энергиями 2,5 и 5 кэВ после прохождения слоев вольфрама W и полиэтилена (ПЭ) толщиной 10 и 50 нм соответственно. Видно, что при указанной толщине слоев для ПЭ наблюдается существенно большее по сравнению с W смещение спектров в сторону малых энергий и их уширение. В то же время, как видно из рис. 11в, спектры протонов после прохождения через рассматриваемые двухслойные структуры при различной последовательности расположения слоев весьма близки.

На рис. 12а показаны рассчитанные распределения удельных ионизационных потерь энергии протонов с энергией 10 кэВ в многослойной мишени из ПЭ (20 нм) и W (10 нм), а на рис. 12б – аналогичные распределения для таких же структур при воздействии атомов О с энергией 50 кэВ. В данном случае соотношение энерговыделения за счет

ионизации в слоях ПЭ и W иное, нежели в отдельных слоях из тех же материалов, а также в двухслойных структурах. Это объясняется существенным изменением энергетического спектра протонов и атомов O после прохождения каждого слоя и влиянием обратного рассеяния, вероятность которого выше для частиц низких энергий.

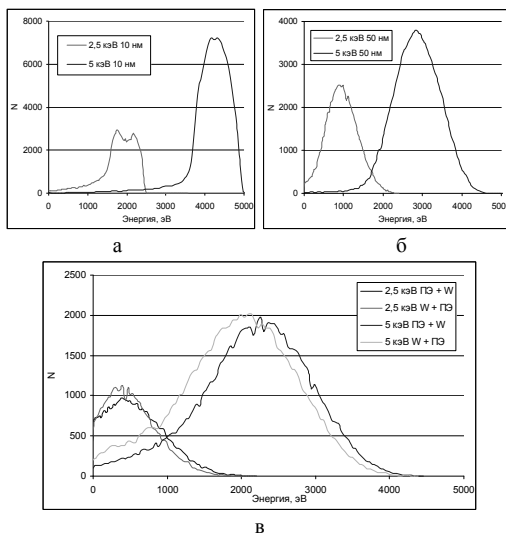


Рис. 11. Энергетические спектры протонов различной энергии после прохождения: а – слоя W толщиной 10 нм; б – слоя ПЭ толщиной 50 нм; в – двухслойных структур из указанных материалов при различном расположении слоев

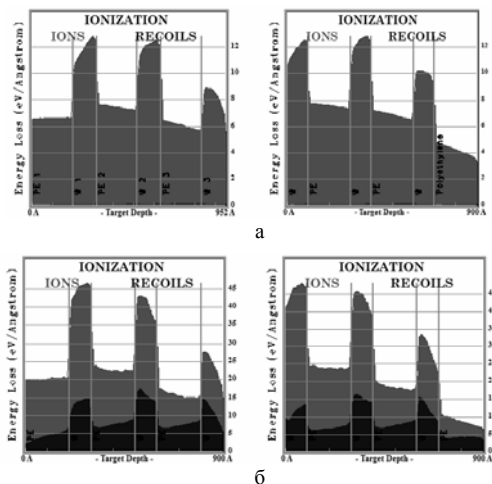


Рис. 12. Распределения удельных ионизационных потерь протонов с энергией 10 кэВ (а) и атомов O с энергией 50 кэВ (б) при различном порядке расположения слоев в многослойных структурах

В **Заключении** сформулированы основные результаты и выводы диссертационной работы.

1. На основании анализа принципов и методов многомасштабного моделирования для решения задач диссертационной работы были выбраны и апробированы следующие методы: метод теории функционала плотности (DFT), метод DFT в схеме сильной связи с самосогласованными зарядами (SCC DFTB), метод молекулярной динамики, метод диссипативной динамики частиц (DPD).
2. Методом DFT исследованы изменения структурных параметров нанотрубок и нанолент из углерода и нитрида бора, графена и гексагонального нитрида бора при адсорбции на их поверхности атомов кислорода. Установлено, что присоединение атомов к поверхности рассматриваемых наноструктур вызывает удлинение и смещение межатомных связей, приводящее к общей деформации наноструктур. Исследована специфика коллективного воздействия нескольких атомов кислорода на наноструктуры, усиливающего указанные выше эффекты. Впервые получены зависимости изменений структурных параметров углеродных нанотрубок и величины энергии адсорбции от их диаметра.
3. Выполнено математическое моделирование процесса «расстегивания» (*unzipping*) нанотрубок при присоединении к их поверхности пар атомов кислорода. Установлено, что с увеличением диаметра углеродных нанотрубок растет пороговое число присоединенных пар атомов, соответствующее началу процесса «расстегивания». Впервые показано, что нанотрубки из нитрида бора более устойчивы к возникновению данного эффекта за счет химического взаимодействия между адсорбированными атомами кислорода, которое отсутствует в случае углеродных нанотрубок.
4. Методами DFT и SCC DFTB исследовано образование вакансий в нанотрубках из углерода и нитрида бора, графене и листах гексагонального нитрида бора под действием атомов кислорода и водорода с энергиями до 200 эВ. Определены пороговые энергии образования вакансий в графене и листе нитрида бора, рассчитаны потери энергии атомов в графене. Установлено, что пороговая энергия выбивания атома зависит от величины заряда, переданного ему налетающей частицей. Показано, что энергия адсорбции атомов кислорода вблизи вакансий существенно увеличивается. Методом SCC DFTB исследованы особенности формирования кислородсодержащих групп на поверхности углеродных наноструктур при различных флюенсах воздействующих атомов кислорода.
5. Методами молекулярной динамики и DPD исследованы процессы диспергирования наноразмерных частиц наполнителя (углеродных нанотрубок, полиорганосилоксана, Al_2O_3 , TiO_2 , WC) в полимерной матрице. Установлено, что равномерное распределение частиц наполнителя достигается в узком диапазоне параметров,

характеризующих взаимодействие частиц между собой и с полимером. В рамках DPD-модели показано, что функционализация частиц наполнителя путем присоединения к их поверхности молекулярных групп может обеспечить равномерное распределение частиц в полимерной матрице.

6. Методом Монте–Карло произведено моделирование процессов торможения атомов водорода, гелия и кислорода с энергиями 1–100 кэВ в многослойных наноразмерных структурах «полимер–металл». Установлено, что последовательность расположения слоев оказывает существенное влияние на величину переданной энергии и количество образующихся структурных дефектов в каждом слое, что связано с особенностями обратного рассеяния частиц в таких структурах.

Список публикаций

1. Avakov G.V., Blokhintsev L.D., Voronina E.N. Protonium formation in collisions of antiprotons with hydrogen atoms // *Physics of Atomic Nuclei*. 2000. V. 63. No. 3. P. 448–454.
2. Воронина Е.Н., Галанина Л.И., Зеленская Н.С., Лебедев В.М., Милеев В.Н., Новиков Л.С., Синолиц В.В., Спасский А.В. Механизмы ядерных реакций при взаимодействии космической радиации с материалами и наноструктурами // *Известия РАН. Серия физ.* 2009. Т. 73. № 2. С. 208–212.
3. Новиков Л.С., Милеев В.Н., Воронина Е.Н., Галанина Л.И., Маклецов А.А., Синолиц В.В. Радиационные воздействия на материалы космической техники // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2009. № 3. С. 32–48.
4. Воронина Е.Н. Многомасштабное моделирование полимерных нанокомпозитов // *Ядерная физика*. 2011. Т. 74. № 11. С. 1649–1669.
5. Вернигоров К.Б., Алентьев А.Ю., Мешков И.Б., Музафаров А.М., Воронина Е.Н., Новиков Л.С., Черник В.Н. Повышение устойчивости термопластичного полиимида к воздействию атомарного кислорода путем модификации сверхразветвленным полиэтоксисилоксаном // *Перспективные материалы*. 2011. № 4. С. 10–17.
6. Воронина Е.Н., Новиков Л.С., Черник В.Н., Чирская Н.П., Вернигоров К.Б., Бондаренко Г.Г., Гайдар А.И. Математическое и экспериментальное моделирование воздействия атомарного кислорода верхней атмосферы Земли на наноструктуры и полимерные композиты // *Перспективные материалы*. 2011. № 6. С. 29–36.
7. Чирская Н.П., Воронина Е.Н., Милеев В.Н., Новиков Л.С., Синолиц В.В. Полимерные композиты для создания высокоэффективных систем радиационной защиты космических аппаратов // *Физика и химия обработки материалов*. 2011. № 4. С. 18–25.
8. Воронина Е.Н., Новиков Л.С., Чирская Н.П. Математическое моделирование радиационных воздействий на перспективные материалы космических аппаратов // *Известия РАН. Серия физ.* 2011. Т. 75, № 11. С. 1594–1601.

9. Чирская Н.П., Воронина Е.Н., Милеев В.Н., Новиков Л.С., Синолиц В.В. Математическое моделирование характеристик гетерогенных радиационно-защитных экранов космических аппаратов // Перспективные материалы, 2011. Спец. вып. 13. С. 948–957.
10. Novikov L.S., Mileev V.N., Voronina E.N. Modeling and testing of nanomaterials for space applications / AIP Conference Proceedings 9th International Conference on Protection of Materials and Structures From Space Environment, ICPMSE-9, Toronto, May 2008. Ed. J.I Kleiman. New York, 2009. P. 550–558.
11. Novikov L.S., Panasyuk M.I., Voronina E.N. Space Model - a new Russian handbook on spacecraft/environment interaction / AIP Conference Proceedings 9th International Conference on Protection of Materials and Structures From Space Environment, ICPMSE-9, Toronto, May 2008. Ed. J.I Kleiman. New York, 2009. P. 637–644.
12. Новиков Л.С., Воронина Е.Н., Демидов В.А., Самохина М.С., Черник В.Н., Чирская Н.П., Алентьев А.Ю., Вернигоров К.Б., Бондаренко Г.Г., Гайдар А.И., Ерискин А.А. Стойкость полимерных нанокомпозитов к воздействию космических излучений / Взаимодействие излучений с твердым телом. Материалы 9-й Международной конференции, Минск, 22–22 сентября 2011 г. Под ред. В.М. Анищика. Минск: Изд. центр БГУ, 2011. С. 161–164.
13. Новиков Л.С., Воронина Е.Н. Воздействие космических излучений на наноструктурные материалы / Труды XVIII Международного совещания «Радиационная физика твердого тела», Севастополь, июль 2008 г. М.: МИЭМ, 2008. С. 710–727.
14. Воронина Е.Н., Новиков Л.С. Математическое моделирование структуры полимерных нанокомпозитов на основе углеродных нанотрубок / Труды XX Международного совещания «Радиационная физика твердого тела», Севастополь, июнь 2010 г. Под ред. Г.Г. Бондаренко. Т. 2. М.: ГНУ «НИИ ПМТ», 2010. С. 601–611.
15. Чирская Н.П., Воронина Е.Н., Милеев В.Н., Новиков Л.С., Синолиц В.В. Математическое моделирование свойств неоднородных структур для систем радиационной защиты / Труды XXI Международной конференции «Радиационная физика твердого тела», Севастополь, июнь 2010 г. Под ред. Г.Г. Бондаренко. В 2 тт. Т. 2. М.: ГНУ «НИИ ПМТ», 2011. С. 436–443.
16. Новиков Л.С., Воронина Е.Н. Нанотехнологии и наноматериалы в космонавтике / Труды XVII Международной конференции по электростатическим ускорителям и пучковым технологиям, Обнинск, октябрь 2008 г. Под ред. В.А.Романова. М.: ГНЦ РФ ФЭИ, 2010. С. 5–14.
17. Новиков Л.С., Черник В.Н., Воронина Е.Н., Самохина М.С., Е Ицун, Ван Либо. Воздействие молекулярных пучков на материалы атомной и космической техники / Труды XVII Международной конференции по электростатическим ускорителям и пучковым технологиям, Обнинск, октябрь 2008 г. Под ред. В.А.Романова. М.: ГНЦ РФ ФЭИ, 2010. С. 15–21.
18. Новиков Л.С., Воронина Е.Н., Милеев В.Н., Синолиц В.В. Возможности применения наноструктурных материалов и элементов в составе изделий космической техники / Труды Всероссийской научно-технической конференции «Актуальные проблемы ракетно-космического приборостроения и информационных технологий», 2008. Под ред. Ю.М. Урличича, А.А. Романова. М.: Физматлит, 2009. С. 368–375.

19. Чирская Н.П., Воронина Е.Н., Милеев В.Н., Новиков Л.С., Синолиц В.В. Компьютерное моделирование воздействия космической радиации на наноструктуры / Труды IX Межвузовской научной школы молодых специалистов «Концентрированные потоки энергии в космической технике, электронике, экологии и медицине», Москва, ноябрь 2008 г. М.: НИИЯФ МГУ, 2008. С. 21–28.
20. Новиков Л.С., Воронина Е.Н. Нанотехнологии и наноматериалы в космонавтике / Труды 2-й Всероссийской научной школы для молодежи «Концентрированные потоки энергии в индустрии наносистем, материалов и живых систем», Москва, ноябрь 2009 г. Под ред. Г.Г. Бондаренко и В.П. Симонова. М.: МИЭМ, 2009. С. 8–21.
21. Воронина Е.Н., Новиков Л.С., Синолиц В.В. Математическое моделирование воздействия космических излучений на наноматериалы / Труды 2-й Всероссийской научной школы для молодежи «Концентрированные потоки энергии в индустрии наносистем, материалов и живых систем», Москва, ноябрь 2009 г. Под ред. Г.Г. Бондаренко и В.П. Симонова. М.: МИЭМ, 2009. С. 102–109.
22. Новиков Л.С., Воронина Е.Н. Нанотехнологии и наноматериалы в космонавтике / Труды X Межвузовской научной школы молодых специалистов «Концентрированные потоки энергии в космической технике, электронике, экологии и медицине», Москва, ноябрь 2009 г. Под ред. Б.С. Ишханова, Л.С. Новикова. М.: НИИЯФ МГУ, 2009. С. 3–15.
23. Новиков Л.С., Бедняков С.А., Воронина Е.Н., Демидов В.А., Зайцев С.В., Черник В.Н., Вернигоров К.Б., Гайдар А.И., Ерискин А.А. Исследование стойкости полимерных композитов к воздействию атомарного кислорода / Труды XII Межвузовской научной школы молодых специалистов «Концентрированные потоки энергии в космической технике, электронике, экологии, медицине», Москва, ноябрь 2011 г. М.: НИИЯФ МГУ, 2011. С. 156–162.
24. Воронина Е.Н., Новиков Л.С., Самохина М.С., Чирская Н.П. Математическое моделирование воздействия атомарного кислорода на полимерные композиты / Труды XII Межвузовской научной школы молодых специалистов «Концентрированные потоки энергии в космической технике, электронике, экологии, медицине», Москва, ноябрь 2011 г. М.: НИИЯФ МГУ, 2011. С. 87–94.
25. Самохина М.С., Вернигоров К.Б., Воронина Е.Н., Гайдар А.И., Новиков Л.С., Черник В.Н. Структурные особенности полимерных нанокompозитов / Труды 1-й Всероссийской школы-семинара студентов, аспирантов и молодых ученых «Функциональные наноматериалы для космической техники», Москва, декабрь 2010 г. М.: МИЭМ, 2010. С. 101–105.
26. Чирская Н.П., Воронина Е.Н., Милев В.Н., Новиков Л.С., Синолиц В.В. Полимерные нанокompозиты для систем радиационной защиты космических аппаратов / Труды 1-й Всероссийской школы-семинара студентов, аспирантов и молодых ученых «Функциональные наноматериалы для космической техники», Москва, декабрь 2010 г. М.: МИЭМ, 2010. С. 93–97.
27. Чирская Н.П., Воронина Е.Н., Милеев В.Н., Новиков Л.С., Синолиц В.В. Анализ эффективности неоднородных радиационно-защитных экранов / Труды 2-й Всероссийской школы-семинара студентов, аспирантов и молодых ученых «Функциональные наноматериалы для космической техники», Москва, май 2011 г. М.: МИЭМ, 2011. С. 92–97.

Напечатано с готового оригинал-макета

Подписано в печать 17.02.2012 г.
Формат 60x90 1/16. Усл. печ. л. 1,0. Тираж 120 экз. Заказ 7060.

Отпечатано в типографии «Реглет»
119526, г. Москва, проспект Вернадского, д. 39
Тел. (495) 363-7890; www.reglet.ru