

НАНОЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ, ОСНОВАННЫЕ НА НАНОТРУБКАХ

Ю. Е. Лозовик*, А. Г. Николаев, А. М. Попов **

*Институт спектроскопии Российской академии наук
142190, Троицк, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 20 апреля 2006 г.

Рассмотрены наноэлектромеханические системы, основанные на многослойных углеродных нанотрубках. Обсуждаются способы управления движением и режимы работы таких систем. Проанализированы структуры двухслойных углеродных нанотрубок с локальными атомными дефектами, которые могут быть использованы в качестве пары «наноболт – наногайка». Для двухслойных нанотрубок с различными типами дефектов рассчитаны барьеры и пороговые силы для относительного движения слоев вдоль линии «резьбы» и для срыва резьбы. Обнаружено, что тип дефекта не влияет на качественные характеристики резьбы. Рассмотрена возможность получения двухслойных нанотрубок, являющихся парой наноболт – наногайка, в результате самоорганизации.

PACS: 61.46.Fg, 85.85.+j, 87.80.Mj

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее десятилетие достигнут значительный прогресс в развитии наномеханики. Например, продемонстрирована возможность манипулировать объектами нанометрового размера [1], рассмотрены принципиальные схемы наноэлектромеханических систем (НЭМС), в которых может быть реализовано управляемое движениеnanoобъектов [2]. Таким образом, поиск nanoобъектов, которые могут быть использованы в качестве подвижных элементов НЭМС, является весьма актуальной задачей. Произвольное [3, 4] и контролируемое манипулятором [5] относительное движение слоев в многослойных углеродных нанотрубках [6–8] и необычные упругие свойства слоев углеродных нанотрубок [9–12] делают перспективным использование таких слоев в качестве подвижных элементов НЭМС. Был предложен ряд наномеханизмов, основанных на относительном скольжении или вращении слоев нанотрубки: наноподшипник [13] и наношестеренка [14], управляемые электрическим полем; нанопружины [5]; нанопереключатель [15] и гигагерцевый осциллятор [16]. Уникальные электронные свойства углеродных нанотрубок [17] находят применение в

таких реализованных экспериментально электронных наноустройствах, как нанотранзисторы [18], нанодиоды [19], ячейки памяти [20], наномодулятор тока [21] и другие. Была предложена принципиальная схема переменного нанорезистора, основанная одновременно на механических и электронных свойствах нанотрубок [22–24]. Более того, недавно были осуществлены наномоторы, основанные на относительном вращении слоев углеродных нанотрубок [25, 26]. В указанных нанорезисторе и наномоторе слой нанотрубки выступает в роли как подвижного элемента, так и элемента электрической цепи. Недавно к этому ряду применений углеродных нанотрубок в НЭМС прибавилась новая уникальная возможность: было показано, что двухслойная нанотрубка может представлять собой пару с эффективной «винтовой резьбой» [27].

В настоящей статье рассматриваются различные режимы работы НЭМС, в устройстве которых использована двухслойная нанотрубка с эффективным потенциальным рельефом энергии взаимодействия слоев, имеющим винтовую симметрию (так что в определенном смысле она представляет собой пару «наноболт – наногайка»). Определены условия, при которых могут быть реализованы разные режимы работы, обсуждается возможность использования этих режимов в различных НЭМС и способы

*E-mail: lozovik@isan.troitsk.ru

**E-mail: popov@ttk.ru

приложения сил для реализации различных типов движения. Разработана модель для расчета энергии взаимодействия слоев с дефектами атомной структуры. Проведенный расчет энергии взаимодействия слоев показывает, что наличие периодически расположенных дефектов в атомной структуре двухслойной нанотрубки делает возможным получение нанотрубок, которые могут быть использованы в качестве пары наноболт–наногайка с желаемыми характеристиками резьбы. Обсуждается возможность получения таких нанотрубок в результате самоорганизации. В настоящей работе мы предлагаем принципиально новые типы НЭМС, основанных на углеродных нанотрубках, устройство которых включает такую пару наноболт–наногайка: «нанодрель» для модификации поверхности (см. также [22–24]) и «наномотор», в котором сила, направленная вдоль оси нанотрубки, преобразуется в относительное вращение ее слоев.

Отметим также, что двухслойные нанотрубки, являющиеся в данной работе объектом теоретического исследования, могут быть получены с помощью различных методов синтеза: в стандартной для получения углеродных нанотрубок дуге [28], в такой же дуге в присутствии водорода и катализатора [29], при каталитическом разложении углеводородов [30, 31], а также из однослойных нанотрубок с цепочкой фуллеренов внутри с помощью их нагрева [32] или при облучении электронами [33].

Статья организована следующим образом. В разд. 2 проведен анализ симметрии потенциального рельефа энергии взаимодействия слоев двухслойных нанотрубок без дефектов и с дефектами атомной структуры. В разд. 3 описана методика расчета энергии взаимодействия слоев двухслойных нанотрубок с дефектами. В разд. 4 представлены результаты расчетов характеристик двухслойных нанотрубок в качестве пары наноболт–наногайка. В разд. 5 представлены принципиальные схемы НЭМС, устройство которых включает пару наноболт–наногайка, созданную на основе двухслойных нанотрубок, и обсуждаются способы управления движением и режимы работы таких НЭМС. Выводы представлены в разд. 6.

2. ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ РЕЛЬЕФЫ ДВУХСЛОЙНЫХ НАНОТРУБОК С СОИЗМЕРИМЫМИ СЛОЯМИ

Для того чтобы исследовать характеристики относительного движения слоев нанотрубки, необходимо рассчитать зависимость энергии U взаимодействия

двух соседних слоев от координат, которые описывают относительное положение слоев: угла ϕ относительного вращения слоев вокруг оси нанотрубки и длины z относительного перемещения слоев вдоль этой оси. Удобно визуализировать потенциальный рельеф энергии взаимодействия слоев, $U(z, \phi)$, в виде развертки цилиндрической поверхности. В принципе, двухслойная нанотрубка может быть использована в качестве пары наноболт–наногайка в случае, когда потенциальный рельеф имеет долины, направленные по винтовой линии, аналогично резьбе на боковой поверхности болта. Такие потенциальные рельефы мы называем далее рельефами типа резьбы. К количественным характеристикам этой резьбы относятся потенциальные барьеры E_1 и E_2 соответственно для относительного движения слоев нанотрубки вдоль линии резьбы и для срыва резьбы (движение поперек резьбы), а также пороговые силы для приведения слоев в относительное движение вдоль линии резьбы и для срыва резьбы. Качественно резьба может характеризоваться не только потенциальными барьерами, но и их отношением $\beta = E_2/E_1$. Это отношение называется относительной глубиной резьбы [22, 23].

В общем случае слой нанотрубки имеет винтовую симметрию [34], поэтому рельеф типа резьбы может наблюдаться для большинства двухслойных нанотрубок. Однако, как это показано ниже, в тех случаях, когда нанотрубки со слоями без дефектов имеют рельеф типа резьбы, характеристики этой резьбы не позволят использовать такие нанотрубки в качестве пары наноболт–наногайка в НЭМС. Так как слой углеродной нанотрубки является одномерным кристаллом [17, 35], соседние слои могут быть как соизмеримыми, так и несоизмеримыми [36]. Первоначально рельеф типа резьбы был найден для ряда двухслойных нанотрубок с несоизмеримыми слоями, причем для упрощения один из слоев предполагался предельно коротким — с длиной, равной длине одной элементарной ячейки слоя (обычно эта длина порядка нескольких единиц или десятков нанометров) [27]. Однако детальное исследование показало, что для нанотрубок с несоизмеримыми слоями глубина резьбы потенциального рельефа и, следовательно, сила, необходимая для срыва резьбы, малы для любой длины слоев [22, 23]. Более того, глубина резьбы значительно флуктуирует с изменением длины короткого подвижного слоя, а при некоторых значениях длины этого слоя возможно даже исчезновение рельефа типа резьбы [22, 23]. Таким образом, создание нанотрубки с несоизмеримыми слоями, которая может быть использована в качестве па-

ры наноболт – наногайка с желаемой глубиной резьбы, весьма проблематично. Нанотрубки с соизмеримыми нехиральными слоями не могут иметь потенциального рельефа типа резьбы [37, 38]. В случае нанотрубок с соизмеримыми слоями, хотя бы один из которых является хиральным, потенциальный рельеф сильно сглажен вследствие несовместимости симметрий слоев [36–40], и, таким образом, все барьеры для относительного движения слоев очень малы. Эта малость барьеров объясняется тем фактом, что в рассматриваемом случае только очень высокие гармоники преобразования Фурье взаимодействия U_a между атомом одного слоя и целым другим слоем дают вклад в барьеры [39].

Как оказывается, дефекты атомной структуры слоя кардинальным образом меняют ситуацию, а именно, в результате появления дефектов даже первая гармоника преобразования Фурье взаимодействия U_a дает ненулевой вклад в барьеры. Как показано ниже, это ведет к увеличению соответствующих барьеров на 8–10 порядков величины. Данное свойство двухслойных нанотрубок с дефектами атомной структуры может быть использовано для получения нанотрубок с рельефом типа резьбы, характеристики которой позволяют использовать ее в качестве пары наноболт – наногайка в НЭМС. Было предложено создавать одинаковые искусственные дефекты в идентичных положениях в большом количестве элементарных ячеек двухслойных нанотрубок с соизмеримыми слоями [38, 41] (в разд. 5 обсуждается возможность получения таких дефектов с помощью самоорганизации). В этом случае любой барьер ΔU для относительного движения слоев определяется выражением

$$\Delta U = \Delta U_u N_u,$$

где ΔU_u — барьер на одну ячейку нанотрубки, N_u — количество ячеек с дефектами. Таким образом, «атомный дизайн» структуры двухслойных нанотрубок позволяет для достаточно длинных нанотрубок получать пару наноболт – наногайка с желаемыми (достаточно большими) значениями барьера, который предотвращает срыв резьбы.

В настоящее время проведены многочисленные экспериментальные [42–45] и теоретические [46–53] исследования углеродных нанотрубок с дефектами атомной структуры. Рассмотрены дефекты различной природы: вакансии одного и двух атомов [46], пара пятиугольник–семиугольник в структуре слоя [46], дефекты Стоуна–Вальса [47], замена атомов углерода атомами бора [42–44, 48, 49], азо-

та [42, 48–50] и кремния [51], адсорбция частиц на поверхности внешнего слоя [45, 52, 53].

Итак, как обсуждается выше, расчеты показывают, что для двухслойных нанотрубок с хиральными соизмеримыми слоями неровности потенциального рельефа $U(z, \phi)$ слишком малы, для того чтобы такие нанотрубки могли бы использоваться в НЭМС, основанных на свойствах такого рельефа, в частности, в качестве пары наноболт – наногайка. Более того, мы покажем, что большая часть нанотрубок с соизмеримыми слоями в принципе не могут иметь потенциального рельефа $U(z, \phi)$ типа резьбы. С этой целью рассмотрим разложение потенциального рельефа по гармоникам α_K^M и $\beta_{K'}^{M'}$:

$$U(\phi, z) = \sum_{M, K=0}^{\infty} \alpha_K^M \cos\left(\frac{2\pi}{b} K z + M \phi\right) + \\ + \sum_{M', K'=0}^{\infty} \beta_{K'}^{M'} \cos\left(\frac{2\pi}{b} K' z - M' \phi\right), \quad (1)$$

где b — длина элементарной ячейки нанотрубки. Этот подход аналогичен разложению потенциального поля, созданного слоем нанотрубки [37, 39, 54].

В случае, когда энергия U_i взаимодействия между любыми двумя объектами является функцией, зависящей лишь от координат, описывающих их относительное положение, группа симметрии энергии U_i есть прямое произведение групп симметрий взаимодействующих объектов. Следовательно, в разложении (1) присутствуют только такие гармоники, которые совместимы с симметрией обоих слоев нанотрубки.

Все правила отбора гармоник, совместимых с группами симметрий слоев описаны в работах [37, 39, 54]. А именно, номера M гармоник, совместимых с вращательными симметриями слоев, определяются правилами отбора

$$M = M_1 n_1 = M_2 n_2, \quad M' = M'_1 n_1 = M'_2 n_2, \quad (2)$$

где n_1 и n_2 — порядки основных осей симметрии соответственно внутреннего и внешнего слоя, M_1 и M_2 — целые числа. Номера K гармоник, совместимых с трансляционными симметриями слоев, определяются следующими правилами отбора:

$$\begin{aligned} b/K &= b_1/K_1 = b_2/K_2, \\ b/K' &= b_1/K'_1 = b_2/K'_2, \end{aligned} \quad (3)$$

где b_1 и b_2 — длины элементарных ячеек соответственно внутреннего и внешнего слоев, K_1 и K_2 — целые числа. Из совместности потенциального рельефа $U(z, \phi)$ с винтовыми симметриями $T_{q_1}^{r_1}$ и $T_{q_2}^{r_2}$

соответственно внутреннего и внешнего слоев, следуют правила отбора номеров гармоник:

$$\begin{aligned} M_1 r_1 + K_1 &= (q_1/n_1)j_1, \\ M'_1 r_1 - K'_1 &= (q_1/n_1)j'_1, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} M_2 r_2 + K_2 &= (q_2/n_2)j_2, \\ M'_2 r_2 - K'_2 &= (q_2/n_2)j'_2, \end{aligned} \quad (5)$$

где параметры q_1, r_1 и q_2, r_2 относятся соответственно к внутреннему и внешнему слоям, j_1, j'_1, j_2, j'_2 — целые числа (параметры q_1, r_1 и q_2, r_2 определяются индексами хиральности слоев [54]). Следует учесть, что пары (M, K) и (M', K') номеров гармоник определяются независимыми системами уравнений.

Недавно была предложена классификация двухслойных нанотрубок с соизмеримыми слоями [38, 55]. Эта классификация основана на понятии класса эквивалентности — совокупности всех слоев с индексами хиральности $(n'f, n'g)$, где n' — порядок основной оси симметрии слоя, f и g — взаимно простые натуральные числа, которые называются индексами соизмеримости. Было показано, что все слои из одного класса эквивалентности имеют одинаковые значения длин элементарных ячеек, одинаковые значения параметра r и отношения $A = q/n'$, где A — число ячеек графита в секторе с углом $2\pi/n'$ элементарной ячейки слоя [38]:

$$\begin{aligned} b_1 = b_2 &= b, \quad r_1 = r_2 = r, \\ A = \frac{q_1}{n_1} &= \frac{q_2}{n_2} = \frac{2(f^2 + fg + g^2)}{R}, \end{aligned} \quad (6)$$

где $R = 3$, если $(f - g)/3$ — целое число, $R = 1$ в остальных случаях.

Согласно классификации, описанной выше, все двухслойные нанотрубки с внутренним и внешним слоями из одного класса эквивалентности образуют семейства, для которых расстояние между слоями и разница $\Delta n = n_2 - n_1$ между порядками основных осей симметрии слоев инвариантны для всех членов семейства.

В случае, когда внутренний и внешний слои нанотрубки принадлежат одному классу эквивалентности (например, (5,5)@(10,10) и (8,2)@(16,4)), подставляя выражение (6) в систему уравнений (3), (4), (5), можем эту систему упростить:

$$K = K_1 = K_2, \quad K' = K'_1 = K'_2, \quad (7)$$

$$M_1 r_1 + K_1 = Aj_1, \quad M'_1 r_1 - K'_1 = Aj'_1, \quad (8)$$

$$M_2 r_2 + K_2 = Aj_2, \quad M'_2 r_2 - K'_2 = Aj'_2. \quad (9)$$

Мы решили системы уравнений (2), (7)–(9) для всех возможных семейств нанотрубок со слоями из одного класса эквивалентности (полный список таких семейств приведен в [38]) и получили все пары (M, K) номеров гармоник, совместимых с симметриями обоих слоев и, следовательно, допустимых в разложении (1) потенциального рельефа. В случае, когда хотя бы одно из отношений n_1/n и n_2/n является четным, где n — наибольший общий делитель чисел n_1 и n_2 , все такие пары (M, K) определяются выражением

$$(M, K) = \left(Al, \frac{An_1 n_2 k}{2n} \right), \quad (10)$$

где k и l — неотрицательные целые числа. В случае, когда оба отношения n_1/n и n_2/n являются нечетными, мы получили два набора пар номеров гармоник, совместимых с симметриями обоих слоев. При этом первый такой набор также определяется выражением (10), а второй — следующим выражением:

$$(M, K) = \left(\frac{A(2l' + 1)}{2}, \frac{An_1 n_2 (2k' + 1)}{2n} \right), \quad (11)$$

где k' и l' — неотрицательные целые числа. Пары (M', K') номеров гармоник также определяются выражениями (10) и (11). Отметим, что полученный нами результат для двухслойных нанотрубок со слоями из одного класса эквивалентности является обобщением результата, полученного в работе [54] для нанотрубок с соизмеримыми нехиральными слоями.

Расчеты разложения потенциального поля слоя по гармоникам показывают, что амплитуды таких гармоник очень быстро убывают с увеличением номера гармоники [37, 39]. По этой причине гармоники с наименьшими допустимыми номерами (M_s, K_s) и, следовательно, максимальными амплитудами определяют вид потенциального рельефа $U(\phi, z)$. А именно, в случае, когда максимальную амплитуду имеет гармоника с $K_s = 0$, долины потенциального рельефа на цилиндрической поверхности (ϕ, z) образуют кольца, перпендикулярные оси цилиндра. В случае, когда максимальную амплитуду имеет гармоника с $M_s = 0$, долины потенциального рельефа направлены вдоль оси z . И только в случае максимальной амплитуды гармоники с обоими ненулевыми номерами M_s и K_s долины потенциального рельефа проходят вдоль винтовой линии. Именно в этом случае двухслойные нанотрубки имеют потенциальный рельеф типа резьбы.

Очевидно, что для набора номеров гармоник, определяемых выражением (10), пары наименьших номеров гармоник есть $(M_s, 0)$ и $(0, K_s)$. Поэтому для нанотрубок, которым соответствует этот набор, потенциальный рельеф типа резьбы невозможен (интересно, что этот вывод соответствует нанотрубкам с двумя хиральными слоями). Набор номеров гармоник, определяемых выражением (11), не содержит гармоник с нулевыми номерами. Двухслойные нанотрубки, которым соответствует этот набор, могут иметь в принципе потенциальный рельеф типа резьбы. Такая возможность не определяется однозначно симметрией слоев нанотрубки, а зависит от соотношения амплитуд гармоник. Она реализуется только в случае, если амплитуда гармоники с наименьшими номерами $(M_s/2, K_s/2)$ из набора с номерами, определяемыми выражением (11), больше амплитуд гармоник с минимальными номерами $(M_s, 0)$ и $(0, K_s)$ из набора с номерами, определяемыми выражением (10).

Как указано выше, набору номеров гармоник, определяемых выражением (11), соответствуют двухслойные нанотрубки, у которых оба отношения, n_1/n и n_2/n нечетные. Следовательно, разница порядков основных осей $\Delta n = n_2 - n_1$ для таких нанотрубок является четным числом. Пользуясь таблицей всех возможных семейств двухслойных нанотрубок с соизмеримыми слоями из одного класса эквивалентности [38], получаем, что среди таких нанотрубок потенциальный рельеф типа резьбы могут иметь только нанотрубки из трех семейств,

$$(2l, l)@(2l + 8, l + 4),$$

$$(3l, 2l)@(3l + 6, 2l + 4),$$

$$(4l, l)@(4l + 8, l + 2),$$

где l — целое число. Наименьшие значения номеров гармоник $(M_s/2, K_s/2)$ в этих семействах имеют нанотрубки с наименьшими возможными отношениями n_1/n и n_2/n . А именно, для перечисленных выше семейств такими нанотрубками являются

$$(6, 3)@(14, 7), (3, 2)@(9, 6), (4, 1)@(12, 3),$$

для которых значения $(M_s/2, K_s/2)$ составляют соответственно $(7, 105)$, $(19, 57)$, $(7, 21)$. Амплитуды гармоник с такими большими номерами экстремально малы [37, 39]. Следовательно, даже в том случае, когда амплитуда такой гармоники больше амплитуд гармоник с номерами $(M_s, 0)$ и $(0, K_s)$ и, соответственно, нанотрубка имеет потенциальный рельеф типа резьбы, барьер для срыва резьбы будет

весьма мал, и она не может быть использована в НЭМС в качестве пары наноболт–наногайка. Нанотрубки со слоями из разных классов эквивалентности имеют еще большие номера гармоник, совместимых с симметриями обоих слоев и, следовательно, еще меньшие барьеры для любых типов относительных движений слоев. Поэтому мы рассматриваем в данной работе альтернативный путь получения пары наноболт–наногайка на основе углеродных нанотрубок — внесение в один из слоев нанотрубки искусственных дефектов (путем самоорганизации) таким образом, чтобы все дефекты занимали эквивалентные положения в элементарной ячейке слоя [24, 38].

Отметим, что нехиральные слои имеют плоскости зеркальной симметрии, проходящие через основную ось слоя. По этой причине для соизмеримых нанотрубок, которые содержат хотя бы один нехиральный слой, амплитуды гармоник, соответствующих эквивалентной правой и левой резьбам равны: $\alpha_K^M = \beta_K^{M'}$ при $M = M'$ и $K = K'$. Следовательно, такие нанотрубки не могут иметь потенциального рельефа типа резьбы [37, 38]. Этот вывод справедлив также в случае, когда один слой является нехиральным, а другой слой содержит дефекты атомной структуры. Таким образом, двухслойные нанотрубки с периодически расположенными атомными дефектами структуры, рассматриваемые в данной работе, могут быть парой наноболт–наногайка только в случае, когда слой без дефектов является хиральным.

3. РАСЧЕТ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ СЛОЯМИ

В настоящее время отсутствуют детальные исследования не только взаимодействия между слоями углеродной нанотрубки, но даже и взаимодействия между слоями графита. Например, как экспериментальные измерения, так и теоретические расчеты дают значения энергии взаимодействия слоев графита, которые различаются на два порядка величины (см. работу [56] и ссылки в ней). Лишь несколько экспериментов посвящены измерению пороговых сил, необходимых для приведения слоев в относительное движение вдоль оси нанотрубки [3–5]. Что касается теоретических исследований, то только барьеры для относительного движения слоев $(5,5)@(10,10)$ двухслойных нанотрубок с наименьшим количеством атомов в элементарной ячейке рассчитаны не только с использованием полуэм-

пирических потенциалов [27, 37, 38], но также и с помощью методов расчетов из первых принципов. Разные методы расчетов для нанотрубок (5,5)@(10,10) дают различные значения величины барьеров E_z и E_ϕ соответственно для относительного скольжения слоев вдоль оси нанотрубки и для относительного вращения слоев. Однако отношения $\beta_b = E_\phi/E_z$ для этих барьеров, полученные для данной нанотрубки с помощью различных методов расчета, имеют близкие значения: $\beta_b = 2.26$ [57], $\beta_b = 2.08$ [40] и $\beta_b = 2.85$ [58] при использовании теории функционала плотности; $\beta_b = 3.5$ при помощи метода сильной связи [59], $\beta_b = 3.1$ и $\beta_b = 2.9$ в случае, когда взаимодействие между слоями описывалось потенциалом Ленарда-Джонса

$$U = 4\epsilon_0 \left[\left(\frac{\sigma_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_0}{r} \right)^6 \right]$$

с параметрами $\epsilon_0 = 2.968$ мэВ и $\sigma_0 = 3.407$ Å для расчетов, в которых соответственно проводился отжиг структуры слоев [27] и слои считались твердыми [38]. Более того, использование потенциала Ленарда-Джонса [38] и других полуэмпирических потенциалов [36, 37] позволило получить важный качественный результат: потенциальный рельеф для всех двухслойных нанотрубок с соизмеримыми слоями, хотя бы один из которых хиральный, является экстремально плоским. Таким образом, мы полагаем, что простой потенциал Ленарда-Джонса дает адекватные качественные характеристики формы потенциального рельефа. Кроме того, число атомов в элементарных ячейках нанотрубок с соизмеримыми хиральными слоями слишком велико, для того чтобы можно было исследовать взаимодействие между слоями исходя из первых принципов.

Мы полагаем, что перечисленные выше причины позволяют считать, что использование потенциала Ленарда-Джонса является адекватным для исследования качественных характеристик относительного движения слоев углеродных двухслойных нанотрубок. Таким образом, потенциал Ленарда-Джонса с указанными выше параметрами использован в настоящей работе для описания парного взаимодействия атомов, принадлежащих соседним слоям. Данные параметры потенциала подобраны подгонкой под экспериментально определенные параметры графита — расстояние между слоями и модули упругости графита. Отметим, что потенциал Ленарда-Джонса был успешно использован для изучения основного состояния и фазовых переходов в кристалле C₆₀ [60], для исследования потенциального ре-

льефа энергии взаимодействия между слоями нанотрубки [22–24, 27, 38, 61] и для расчета характеристик гигагерцевого осциллятора, основанного на относительном движении слоев нанотрубки [16, 62–67]. Для того чтобы исключить влияние края нанотрубки на потенциальный рельеф, мы рассматриваем нанотрубки, состоящие из длинного внутреннего и короткого внешнего слоев. Длина внешнего слоя выбиралась равной длине элементарной ячейки нанотрубки, длина внутреннего слоя выбиралась таким образом, чтобы учесть все пары атомов с межатомным расстоянием, меньшим радиуса обрезания потенциала $40\sigma_0$. Отметим, что учет деформации слоев не влияет существенно на характеристики потенциальных рельефов как двухслойных нанотрубок [36, 38], так и двухслойных углеродных наночастиц [68, 69]. Например, барьеры для относительного вращения и скольжения слоев нанотрубок (5,5)@(10,10), рассчитанные для слоев с неотожженной структурой [38], отличаются лишь на 14 % от барьеров, полученных в работе [27] с использованием отожженной структуры слоев. По этой причине мы рассматриваем взаимодействие твердых слоев двухслойных нанотрубок. Структура слоя может быть получена сворачиванием листа графита с длиной связи 1.42 Å (длина связи многослойных нанотрубок совпадает с длиной связи графита в пределах точности измерения около 0.01 Å с помощью дифракции нейтронов [70]).

Потенциальный рельеф для любых двухслойных нанотрубок с хиральными соизмеримыми слоями, рассчитанный с помощью полуэмпирических потенциалов, является почти плоским. Этот факт, как указано в разд. 2, объясняется несовместимостью винтовых симметрий слоев [39]. Например, барьер для относительного вращения слоев (8,2)@(16,4), рассчитанный с помощью потенциала Ленарда-Джонса, составляет около $5 \cdot 10^{-12}$ мэВ на атом, и это единственный обнаруженный пример, когда барьер для относительного движения хиральных соизмеримых слоев превышает предел точности вычислений [38]. Величина других барьеров для десятков рассмотренных нанотрубок с хиральными соизмеримыми слоями меньше точности вычислений [38]. Расчет с помощью потенциала Колмогорова и Креспи [36] также показывает, что для всех нанотрубок с соизмеримыми слоями без дефектов, из которых хотя бы один слой хиральный, потенциальный рельеф является весьма плоским [37]. Энергия U_{def} взаимодействия между слоями для двухслойных нанотрубок с дефектами может быть записана в виде

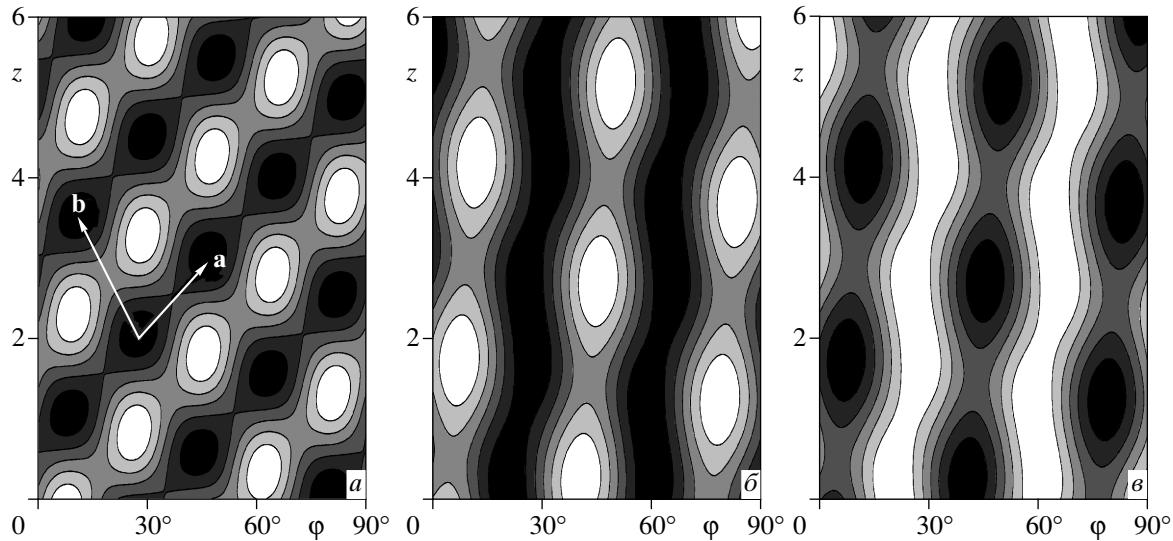


Рис. 1. Потенциальный рельеф энергии взаимодействия слоев $(4, 6)\oplus(12, 8)$ двухслойной нанотрубки как функция относительного перемещения z слоев вдоль оси нанотрубки и угла ϕ относительного вращения слоев вокруг оси: a — вакансия в каждой элементарной ячейке внутреннего слоя; b, c — замещенный атом в каждой элементарной ячейке внешнего слоя. Параметры потенциала взаимодействия замещенного атома с атомами слоя без дефектов $\alpha=2.0$, $\gamma=0.8$ (b) и $\alpha=2.0$, $\gamma=1.5$ (c). Энергия измеряется от своего минимума. Эквипотенциальные линии проведены с интервалами 10 мэВ (a), 33 мэВ (b) и 12 эВ (c); a и b — элементарные векторы решетки, образованной минимумами потенциального рельефа

$$U_{def}(\phi, z) = U_{perf}(\phi, z) + \sum_{i=N_p, j=N_d}^{i=N_p, j=N_d} [(U_{ij_{def}}(\phi, z) - U_{ij_{perf}}(\phi, z)], \quad (12)$$

где U_{perf} — энергия взаимодействия слоев для нанотрубок без дефектов, N_p — количество атомов в целом слое, N_d — количество атомов в слое с дефектами, которые меняют свое положение или электронные свойства в результате возникновения дефекта, $U_{ij_{def}}(\phi, z)$ и $U_{ij_{perf}}(\phi, z)$ — парные энергии взаимодействия между атомами слоя без дефектов и N_d атомами с измененными свойствами (соответственно для нанотрубок с дефектами и без). Так как для нанотрубок с хиральными соизмеримыми слоями без дефектов потенциальный рельеф является почти плоским, $U_{perf}(z, \phi) \approx U_0$, где U_0 — постоянная, то первый член в уравнении (12) не дает вклада в форму потенциального рельефа и, следовательно, в барьеры для относительного движения слоев. Поэтому для расчета этих барьеров достаточно учесть парные взаимодействия только для N_d атомов, соответствующих дефектам. Таким образом можно существенно уменьшить компьютерное время вычисления потенциального рельефа для нанотрубок с хиральными соизмеримыми слоями с дефектами. Сле-

дует заметить, что этот метод не может быть использован для нанотрубок с обоими нехиральными соизмеримыми слоями, у которых потенциальные рельефы с существенными барьерами для относительного движения слоев обнаружены и в случае слоев без дефектов [38–40, 58].

В настоящей работе рассмотрены два типа дефектов: вакансия одного атома и замещение одного атома углерода на частицу с измененными параметрами взаимодействия между этой частицей и атомами углерода в соседнем слое без дефектов. Такая частица может быть атомом другого элемента или атомом углерода с модифицированными электронными свойствами в результате химической адсорбции атомов или молекул. В настоящее время отсутствуют экспериментальные данные, которые можно использовать для подгонки параметров потенциала взаимодействия между атомами, соответствующими дефекту, и атомами углерода в соседнем слое. Поэтому мы используем для этого взаимодействия потенциал Ленаарда-Джонса

$$U = 4\epsilon_1 \left[\left(\frac{\sigma_1}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_1}{r} \right)^6 \right]$$

с параметрами ϵ_1 и σ_1 , которые отличаются от параметров, используемых для описания взаимо-

действия атомов углерода, а именно, $\epsilon_1 = \alpha\epsilon_0$ и $\sigma_1 = \gamma\sigma_0$. Все дефекты, рассмотренные в данной работе, меняют взаимодействие между слоями только для одного атома углерода (т. е. $N_d = 1$), поэтому мы называем их далее одноатомными дефектами. Из уравнения (12) очевидно, что для одноатомных дефектов барьеры для любого относительного движения слоев пропорциональны α , и, следовательно, относительная глубина резьбы β не зависит от α .

4. РАСЧЕТ ХАРАКТЕРИСТИК ЭФФЕКТИВНОЙ РЕЗЬБЫ ДВУХСЛОЙНОЙ НАНОТРУБКИ

Все потенциальные рельефы, а также барьеры и пороговые силы для относительного движения слоев рассчитаны нами для случая, когда длина внутреннего слоя существенно больше длины внешнего слоя и внешний слой находится посередине внутреннего слоя. Таким образом, мы пренебрегаем влиянием края внутреннего слоя на взаимодействие слоев. Длина внешнего слоя взята равной 100 нм.

Различные примеры потенциального рельефа типа резьбы для нанотрубок с хиральными соизмеримыми слоями с одной вакансией и одним дефектом на элементарную ячейку нанотрубки показаны на рис. 1. Минимумы потенциального рельефа образуют решетку с элементарными векторами решетки **a** и **b**. Несомненно, что решетка этих минимумов коррелирует с решеткой структуры слоя без дефектов. Такая корреляция исследована также для нанотрубок с несоизмеримыми слоями конечной длины, для которых решетка минимумов потенциального рельефа коррелирует с решеткой структуры длинного слоя [22]. Для детального обсуждения этой корреляции преобразуем угловую координату ϕ в пространственную координату $L = \phi R_1$, где L представляет собой длину проекции на окружность слоя без дефектов для любого пути атома из этого слоя при относительном движении слоев, R_1 — радиус слоя без дефектов. В координатной системе (L, z) векторы **a** и **b** имеют длины $a = b = a_0$, где $a_0 = 2.46 \text{ \AA}$ — длина вектора решетки графита, и угол между векторами составляет 60° . Для нанотрубок с несоизмеримыми слоями найдены два типа решетки из минимумов потенциального рельефа: тип I с прямоугольной решеткой минимумов и тип II с треугольной решеткой минимумов [22]. Все винтовые потенциальные рельефы, полученные в данной работе, имеют тип II решетки из минимумов.

Обсудим геометрические характеристики резьбы

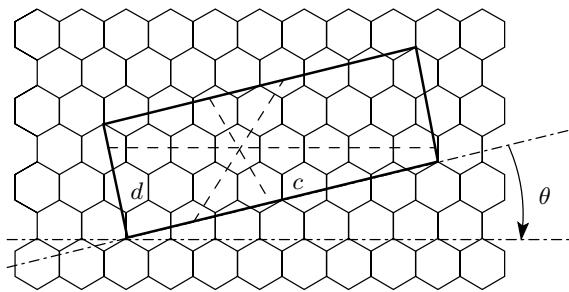


Рис. 2. Разворотка элементарной ячейки слоя на плоскости графита показана прямоугольником со сторонами c и d . Длина c равна длине окружности слоя, а длина d — длине элементарной ячейки слоя. Возможные направления линии резьбы показаны штриховыми линиями, перпендикулярными сторонам шестиугольника, образованного связями между атомами углерода

бы. В координатной системе, представленной выше, угол резьбы χ между линией резьбы и окружностью слоя может быть представлен в виде

$$\chi = \theta + k \cdot 60^\circ, \quad (13)$$

где θ — угол хиральности слоя без дефектов, а k принимает одно из трех значений 0, 1, 2. Возможные направления линий резьбы на развертке слоя показаны на рис. 2. Угол θ хиральности слоя нанотрубки может быть выражен как [17, 35]

$$\theta = -\arccos \frac{2m_1 + m_2}{2\sqrt{m_1^2 + m_2^2 + m_1 m_2}}, \quad (14)$$

где m_1 и m_2 — индексы хиральности слоя. Очевидно, что число линий резьбы N_t равно порядку t оси вращательной симметрии слоя без дефектов (t — наибольший общий делитель m_1 и m_2). Угол хиральности θ слоя без дефектов, угол резьбы χ , число N_t линий резьбы, и шаг резьбы h для рассмотренных нанотрубок приведены в табл. 1. Шаг резьбы h определяется здесь как относительное смещение слоев вдоль оси нанотрубки, соответствующее полному относительному повороту слоев вдоль линии резьбы:

$$h = 2\pi R_1 \sin \chi. \quad (15)$$

Потенциальные рельефы для малых ($\gamma=0.8$) и больших ($\gamma=1.5$) значений параметра γ потенциала взаимодействия замещенных атомов с атомами соседнего слоя показаны соответственно на рис. 1б и 1в. Взаимодействие между замещенным атомом

Таблица 1. Геометрические характеристики потенциального рельефа для двухслойных нанотрубок с одной вакансией в каждой элементарной ячейке нанотрубки: угол хиральности θ слоя без дефектов, число линий резьбы N_t , угол резьбы χ и шаг резьбы h

Нанотрубки	Вакансия во внутреннем слое				Вакансия во внешнем слое			
	N_t	θ	χ	$h, \text{ \AA}$	N_t	θ	χ_2	$h_2, \text{ \AA}$
(6,4)@(12,8)	4	23.41°	23.41°	16.92	2	23.41°	83.41°	21.16
(8,2)@(16,4)	4	10.89°	10.89°	8.53	2	10.89°	70.89°	21.30

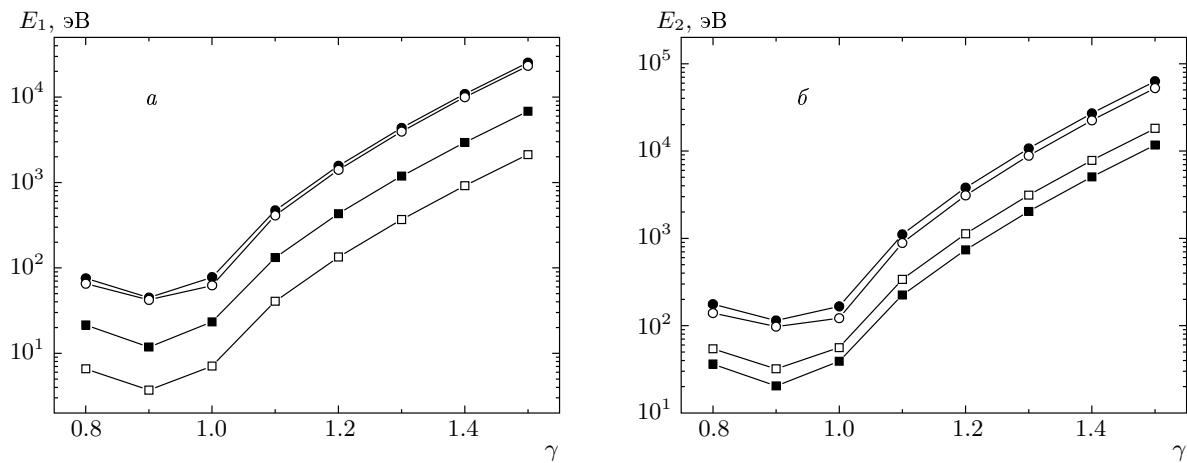


Рис. 3. Зависимость барьеров для относительного движения слоев от параметра γ потенциала, соответствующего замещенному атому: *а* — в случае относительного движения слоев вдоль линии резьбы; *б* — в случае срыва резьбы. Каждая элементарная ячейка слоя с дефектами содержит один замещенный атом с параметром потенциала $\alpha=2.0$. Темные квадраты и круги соответствуют нанотрубкам (4,6)@(12,8) с замещенными атомами во внутреннем и внешнем слоях, светлые квадраты и круги — нанотрубкам (8,2)@(16,4) с замещенными атомами во внутреннем и внешнем слоях

и ближайшим атомом в соседнем слое в случае малых значений параметра γ соответствует притягивающей области потенциала, а в случае больших значений параметра γ — отталкивающей области потенциала. Поэтому потенциальные рельефы называются здесь притягивающий $U_a(z, \phi)$ и отталкивающий $U_r(z, \phi)$ потенциальные рельефы. Интересно, что эти потенциальные рельефы выглядят на рис. 1 как позитив и негатив, или, если представить трехмерные изображения рельефов, один рельеф является слепком с другого. Для получения численной характеристики этого свойства притягивающего и отталкивающего рельефов изменим масштаб неровностей притягивающего рельефа $U_a(z, \phi)$ таким образом, чтобы величина этих неровностей была равна величине неровностей отталкивающего рельефа $U_r(z, \phi)$:

$$U'_a(z, \phi) = A [U_a(z, \phi) - \langle U_a(z, \phi) \rangle_{z, \phi}]. \quad (16)$$

Здесь $A = \Delta U_r / \Delta U_a$, где ΔU_a и ΔU_r — разности между максимальными и минимальными значениями соответственно притягивающего и отталкивающего рельефов. Эти разности дают характерный масштаб неровностей потенциального рельефа. Тогда суммарный рельеф

$$S(z, \phi) = U'_a(z, \phi) + U_r(z, \phi) \quad (17)$$

характеризует разницу между формами притягивающего и отталкивающего потенциальных рельефов. В случае, когда эти формы совпадают, $S(z, \phi) = \text{const}$. Для рассматриваемых рельефов разность ΔS между максимальным и минимальным значением $S(z, \phi)$ в 13 раз меньше, чем характерный масштаб неровностей отталкивающего рельефа ΔU_r .

Зависимости барьеров для относительного движения слоев вдоль линии резьбы (E_1) и для срыва резьбы (E_2) от параметра γ потенциала, соот-

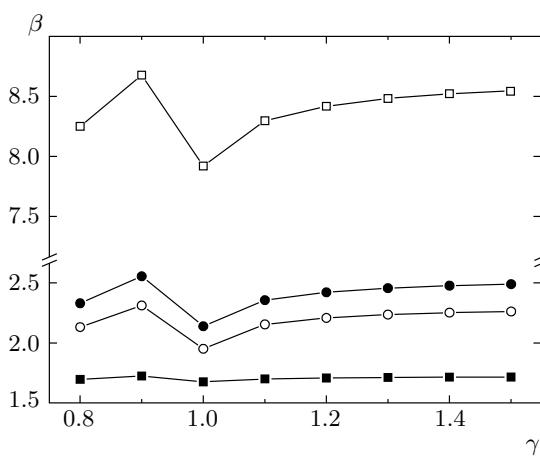


Рис. 4. Зависимости относительной глубины резьбы $\beta = E_2/E_1$ от параметра потенциала γ , соответствующего замещенному атому. Каждая элементарная ячейка слоя с дефектами содержит один замещенный атом с параметром потенциала $\alpha=2.0$. Темные квадраты и круги соответствуют нанотрубке $(4, 6)\ominus(12, 8)$ с замещенными атомами во внутреннем и внешнем слоях, светлые квадраты и круги — нанотрубке $(8, 2)\ominus(16, 4)$ с замещенными атомами во внутреннем и внешнем слоях

ветствующего взаимодействию между замещенным атомом и атомами соседнего слоя, представлены на рис. 3. Различаются две области этих зависимостей: первая (для $\gamma < 1$) указывает на притягивающий, а вторая (для $\gamma > 1$) на отталкивающий потенциальные рельефы. В последнем случае все эти зависимости для $\gamma > 1.2$ могут быть приближенно интерполированы как $\text{const} \cdot \gamma^{12}$.

Как обсуждалось выше, форма потенциально-го рельефа не зависит от параметра α потенциала взаимодействия замещенного атома с атомами слоя без дефектов и слабо зависит от параметра γ этого потенциала. Поэтому относительная глубина резьбы β также незначительно зависит от параметра γ (рис. 4).

Мы исследовали также случай, когда замещенный атом смешен в радиальном направлении относительно положения, на котором находился бы в этом же месте решетки слоя атом углерода. Зависимости барьера E_1 и E_2 соответственно для относительного движения слоев вдоль линии резьбы и для срыва резьбы от радиального смещения замещенного атома представлены на рис. 5. При смещении замещенного атома в направлении от соседнего слоя его взаимодействие с соседним слоем уменьшается, и, следовательно, уменьшаются также оба ба-

рьера E_1 и E_2 . Зависимости относительной глубины резьбы β от смещения замещенного атома представлены на рис. 6. В настоящее время экспериментально получены нанотрубки, легированные атомами бора [42–44] и азота [42]. Расчет структуры легированной однослойной нанотрубки показывает, что радиальное смещение замещенного атома составляет менее 0.02 \AA для азота и 0.11 \AA для бора [48]. Таким образом, рис. 6 показывает, что для возможных радиальных смещений замещенного атома относительная глубина резьбы меняется незначительно.

Поскольку для любого относительного движения слоев нанотрубки существует барьер, это движение возможно только в случае, если сила, вызывающая движение, превышает пороговое значение. Определения сил, вызывающих относительное движение слоев вдоль линии резьбы и срыв резьбы, были введены недавно в работе [22]. В соответствии с этой работой пороговые силы для относительного движения слоев вдоль линии резьбы (F_1) и срыва резьбы (F_2), рассчитаны как максимальные производные для зависимостей энергии U взаимодействия между слоями от координаты l , характеризующей относительные положения слоев вдоль соответствующего направления относительного движения слоев в координатной системе (L, z) . Зависимость пороговых сил F_1 и F_2 от параметра γ потенциала, соответствующего взаимодействию между замещенным атомом и атомами соседнего слоя, представлена на рис. 7. Аналогично зависимостям для барьера E_1 и E_2 различаются две области этих зависимостей: первая (для $\gamma < 1$) указывает на притягивающий, а вторая (для $\gamma > 1$) на отталкивающий потенциальные рельефы. В последнем случае (аналогично соответствующим зависимостям для барьера E_1 и E_2) эти зависимости для $\gamma > 1.2$ могут быть приближенно интерполированы как $\text{const} \cdot \gamma^{12}$. Заметим, что рассчитанные пороговые силы соответствуют диапазону сил, используемых в атомно-силовой микроскопии [71].

Найденные зависимости $U(l)$ очень близки к косинусу, поэтому пороговые силы могут быть приближенно выражены через величины соответствующих барьера

$$F_1 = \frac{\pi E_1}{a_0}, \quad F_2 = \frac{\pi E_2}{a_0}. \quad (18)$$

Разница между значением силы, непосредственно рассчитанным из зависимости $U(l)$, и ее приближенным значением, полученным с помощью формул (18), менее 0.5 % (табл. 2). Таким образом, формулы (18) могут быть использованы для оценки ве-

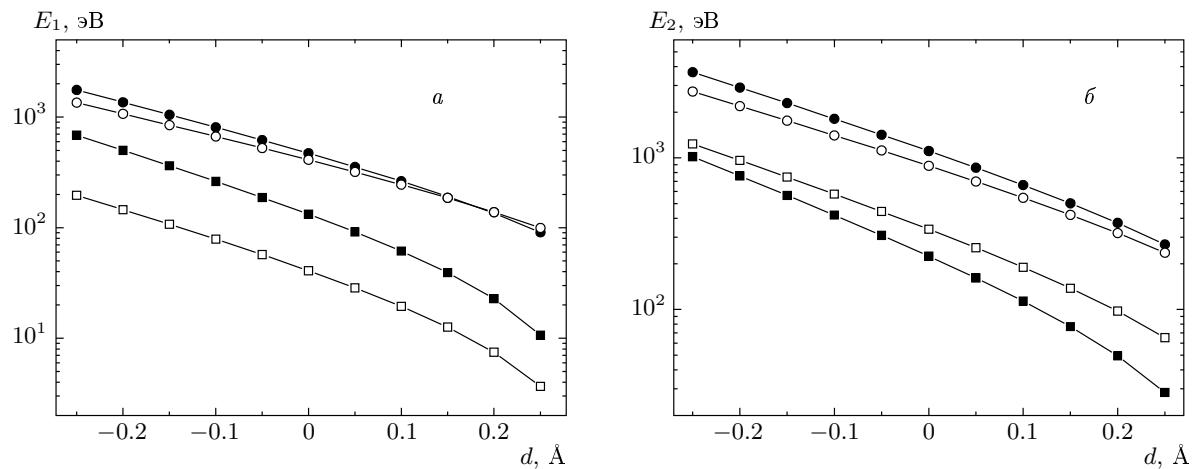


Рис. 5. Зависимость барьеров для относительного движения слоев от радиального смещения d замещенного атома с цилиндрической поверхности слоя с дефектом: *a* — в случае относительного движения слоев вдоль линии резьбы; *б* — в случае срыва резьбы. Каждая элементарная ячейка слоя с дефектами содержит один замещенный атом с параметрами потенциала $\alpha=2.0$ и $\gamma=1.1$. Темные квадраты и круги соответствуют нанотрубке $(4,6)\oplus(12,8)$ с замещенными атомами во внутреннем и внешнем слоях, светлые квадраты и круги — нанотрубке $(8,2)\oplus(16,4)$ с замещенными атомами во внутреннем и внешнем слоях

Таблица 2. Характеристики относительного движения слоев для двухслойных нанотрубок с вакансиями в каждой элементарной ячейке: барьеры E_1 и E_2 , пороговые силы F_1 и F_2 соответственно для относительного движения слоев вдоль линии резьбы и для срыва резьбы, относительная глубина резьбы β ; отношения η_1 и η_2 пороговых сил соответственно для относительного движения слоев вдоль линии резьбы и для срыва резьбы, рассчитанных как производная потенциала взаимодействия слоев нанотрубки, к значению пороговых сил, найденных с помощью формул (18) по величине соответствующих барьеров

Вакансия во внутреннем слое							
Нанотрубка	E_1 , мэВ	E_2 , мэВ	β	F_1 , нН	F_2 , нН	η_1	η_2
$(6,4)\oplus(12,8)$	23.33	39.09	1.68	0.0476	0.0795	1.0022	1.0049
$(8,2)\oplus(16,4)$	7.09	56.13	7.92	0.0144	0.1156	0.9991	1.0036
Вакансия во внешнем слое							
Нанотрубка	E_1 , мэВ	E_2 , мэВ	β	F_1 , нН	F_2 , нН	η_1	η_2
$(6,4)\oplus(12,8)$	77.84	166.47	2.14	0.1591	0.3415	1.00002	0.9962
$(8,2)\oplus(16,4)$	62.29	121.54	1.95	0.1288	0.2487	0.9997	1.0001

личины барьеров E_1 и E_2 на основе пороговых сил, полученных в эксперименте. Отметим, что величины барьеров E_1 и E_2 играют важную роль в механике НЭМС, основанных на относительном движении слоев двухслойных нанотрубок, так как определяют коэффициент диффузии и подвижность для относительных диффузии и дрейфа слоев вдоль линии резьбы [22, 23].

В табл. 2 приведены рассчитанные значения ба-

рьеров E_1 и E_2 пороговых сил F_1 и F_2 для приведения слоев в относительное движение вдоль линии резьбы и для срыва резьбы, а также относительной глубины резьбы β для случая, когда одноатомный дефект является вакансией. Отметим, что значение относительной глубины резьбы β в этом случае близко к значениям β в случае, когда одноатомные дефекты являются замещенными атомами. Таким образом, полученные результаты показывают, что

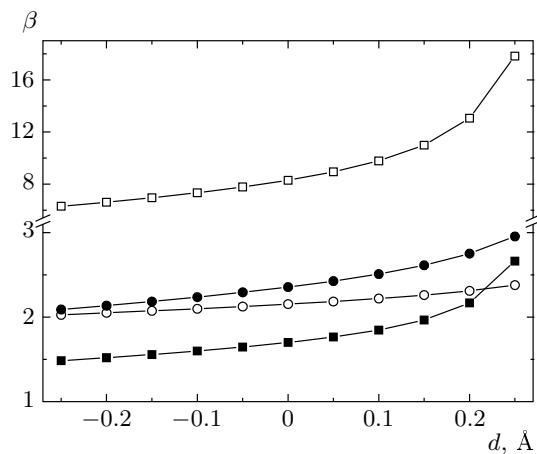


Рис. 6. Зависимости относительной глубины резьбы $\beta = E_2/E_1$ от радиального смещения d замещенного атома с цилиндрической поверхности слоя с дефектом. Каждая элементарная ячейка слоя с дефектами содержит один замещенный атом с параметрами потенциала $\alpha = 2.0$ и $\gamma = 1.1$. Темные квадраты и круги соответствуют нанотрубке $(4, 6)\oplus(12, 8)$ с замещенными атомами во внутреннем и внешнем слоях, светлые квадраты и круги — нанотрубке $(8, 2)\oplus(16, 4)$ с замещенными атомами во внутреннем и внешнем слоях

типа одноатомного дефекта определяет выбор между притягивающим и отталкивающим потенциальным рельефом, а также количественные характеристики потенциального рельефа, такие как значения барьеров и пороговых сил для любого относительного движения слоев. Однако качественные характеристики потенциального рельефа, такие как относительная глубина резьбы, близки для различных типов дефектов, расположенных в одном и том же слое конкретной нанотрубки. Эти результаты позволяют сделать следующий вывод: простая модель, предложенная в данной работе, может быть использована для исследования большого количества двухслойных нанотрубок и определения нанотрубок с наибольшими значениями относительной глубины резьбы. Такие нанотрубки могут быть наиболее перспективными для изготовления пары наноболт–наногайка.

5. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПАРЫ НАНОБОЛТ–НАНОГАЙКА В НЭМС

С целью исследовать возможное использование пары наноболт–наногайка в НЭМС мы проводим анализ относительного движения коаксиальных сло-

ев нанотрубок. Рассматриваем случай, когда один слой зафиксирован, а другой подвижен и силы, действующие на подвижный слой, не вызывают деформации слоя и смещения его оси относительно оси подвижного слоя. Это возможно, например, в случае, когда на каждый атом подвижного слоя действует сила \mathbf{F}_a , состоящая из двух компонент, одинаковых для каждого атома: силы F_z , направленной параллельно оси нанотрубки, и силы F_l , направленной по проходящей через атом касательной к окружности слоя. Легко показать, что в рассмотренном случае движение подвижного слоя массы M относительно фиксированного слоя эквивалентно двумерному движению частицы массы M в потенциальному поле энергии $U(R\phi, z)$ взаимодействия слоев, где R — радиус подвижного слоя, под действием силы $\mathbf{F} = (N_a F_z, N_a F_l)$. При этом движение слоя вдоль винтовой линии резьбы эквивалентно движению частицы по прямой.

Проведенный анализ показывает, что в случаях, когда 1) барьер для срыва резьбы существенно больше барьера для относительного движения слоев вдоль линии резьбы, $E_2 \gg E_1$, 2) энергия теплового движения слоев существенно меньше барьеров для их относительного движения, $kT \ll E_1, E_2$, и 3) сила, действующая на подвижный слой, мала, $F_x \delta/2 \ll kT$ (где F_x — проекция силы \mathbf{F} на линию резьбы, δ — расстояние между минимумами потенциального рельефа вдоль линии резьбы), относительное движение слоев вдоль линии резьбы является дрейфом и описывается уравнением Фоккера–Планка

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial n}{\partial x} B F_x, \quad (19)$$

где x — координата, описывающая относительное положение слоев вдоль линии резьбы, $n(x, t)$ — функция распределения вероятности относительного положения слоев, D — коэффициент диффузии и B — подвижность,

$$D = \frac{1}{2} \Omega \delta^2 \exp\left(-\frac{U_1}{kT}\right), \quad (20)$$

$$B = \frac{\Omega \delta^2}{2kT} \exp\left(-\frac{U_1}{kT}\right), \quad (21)$$

Ω — предэкспоненциальный множитель в формуле Аррениуса для частоты перескока слоев между эквивалентными минимумами потенциального рельефа (по порядку величины множитель Ω равен средней частоте относительных колебаний слоев вдоль

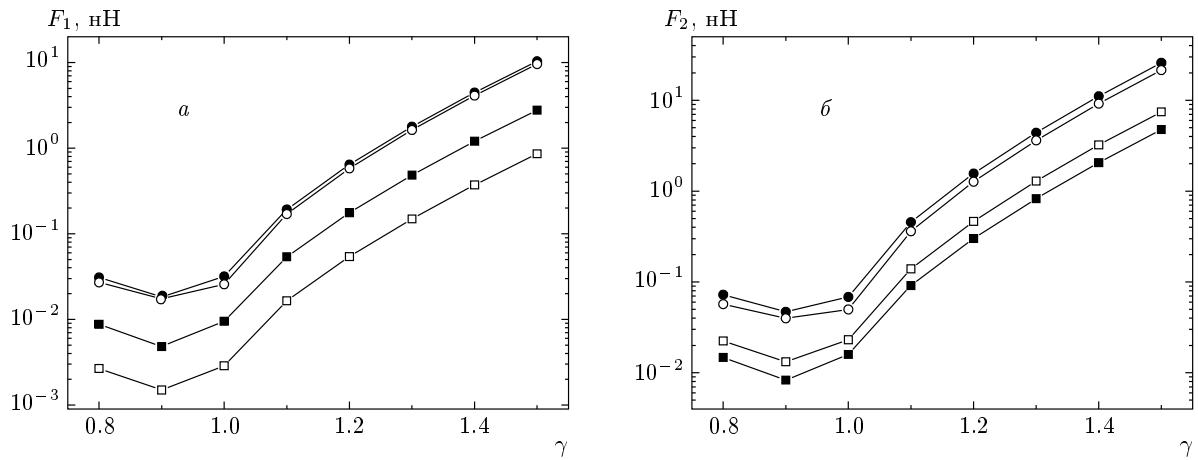


Рис. 7. Зависимость пороговых сил для относительного движения слоев от параметра γ потенциала, соответствующего замещенному атому: *а* — в случае относительного движения слоев вдоль линии резьбы; *б* — в случае срыва резьбы. Каждая элементарная ячейка слоя с дефектами содержит один замещенный атом с параметром потенциала $\alpha = 2.0$. Темные квадраты и круги соответствуют нанотрубке $(4,6)@(12,8)$ с замещенными атомами во внутреннем и внешнем слоях, светлые квадраты и круги — нанотрубке $(8,2)@(16,4)$ с замещенными атомами во внутреннем и внешнем слоях

линии резьбы). Отметим, что выполняется соотношение Эйнштейна $D = kTB$.

Режим работы НЭМС, основанных на относительном движении слоев нанотрубок, в случае, когда это движение описывается уравнением Фоккера–Планка, будем называть режимом работы Фоккера–Планка (см. также [22–24]). Устойчивое направленное движение слоя для режима работы Фоккера–Планка возможно в случае, когда среднее расстояние $x_{dr} = BF_x t$, которое проходит слой вдоль линии резьбы за время t в результате дрейфа под действием силы \mathbf{F} , будет больше, чем расстояние $x_{di} = \sqrt{2Dt}$, на которое смещается слой вдоль линии резьбы в результате диффузии:

$$BF_x t \gg \sqrt{2Dt}. \quad (22)$$

Подставляя в условие (22) соотношение Эйнштейна $D = kTB$, получаем, что режим Фоккера–Планка имеет смысл использовать в НЭМС для времен работы

$$t > \frac{2k^2 T^2}{F_x^2 D} \quad (23)$$

и перемещений x_{dr} слоя вдоль линии резьбы в результате дрейфа, удовлетворяющих условию

$$x_{dr} \gg \frac{2kT}{F_x}. \quad (24)$$

Подставляя в это условие максимальную силу $F_x \approx 2kT/\delta$, для которой адекватно описание относительного движения слоев с помощью уравнения

Фоккера–Планка, получаем, что режим Фоккера–Планка имеет смысл использовать в НЭМС для $x_{dr} \gg \delta$, т. е. для нескольких десятков относительных перескоков слоя между минимумами потенциального рельефа вдоль линии резьбы. Такое перемещение слоя соответствует примерно одному повороту вокруг оси нанотрубки и смещению вдоль оси нанотрубки на несколько нанометров.

Для сил $F_x\delta/2 \gg kT$ стохастической составляющей в относительном движении слоев можно пренебречь. В этом случае движение оболочек будет ускоренным и достаточно точно описывается уравнением движения. Режим работы НЭМС на основе относительного движения слоев нанотрубки, соответствующий таким силам, назовем ускоренным режимом. В этом режиме работы возможно контролируемое относительное перемещение слоев вдоль линии резьбы на любое расстояние.

Силу \mathbf{F} , приводящую в движение подвижный слой относительно неподвижного слоя, можно разделить на две составляющие: силу, направленную вдоль оси нанотрубки (сила первого типа), и силу, направленную по касательной к окружности подвижного слоя (сила второго типа). В случае, когда неровности потенциального рельефа не влияют на относительное движение слоев, тип относительного движения слоев соответствует типу приложенных сил. А именно, силы первого типа, направленные вдоль оси нанотрубки, вызывают отно-

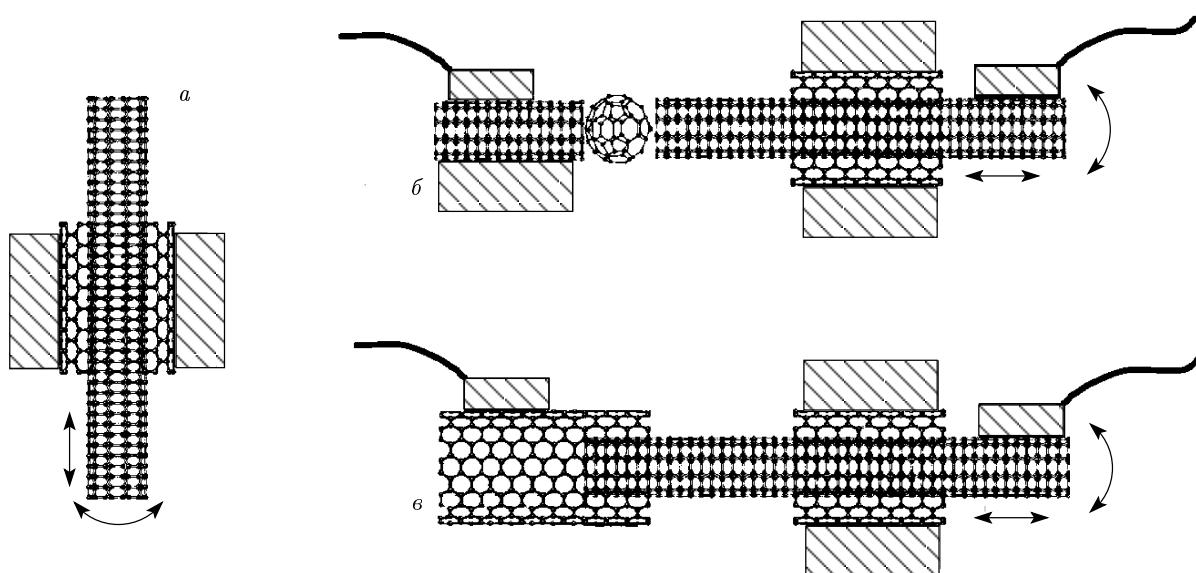


Рис. 8. Принципиальные схемы наноэлектромеханических систем, основанных на углеродных нанотрубках, устройство которых включает пару наноболт–наногайка: *а* — нанодрель; *б, с* — два типа переменных нанорезисторов.

Стрелки показывают возможные движение и вращение слоев

сительное скольжение слоев вдоль оси, а силы второго типа, направленные по касательной к окружности слоя, — относительное вращение слоев. Однако, если неровности потенциального рельефа оказывают существенное влияние на относительное движение слоев, такое соответствие в общем случае отсутствует. Так, для потенциального рельефа типа резьбы относительное движение слоев вдоль винтовой линии резьбы возможно для обоих типов сил (или их суперпозиции), приложенных к подвижному слою. Относительное движение слоев вдоль винтовой линии резьбы является одновременно и относительным вращением, и относительным скольжением вдоль оси нанотрубки. Следовательно, сила первого типа вызывает не только относительное скольжение слоев вдоль оси нанотрубки, но и относительное вращение слоев, а сила второго типа вызывает не только относительное вращение слоев, но и их относительное скольжение вдоль оси. В первом случае возможны НЭМС, работающие аналогично юле. Мы предлагаем ниже использовать такой способ приведения слоев в относительное вращение в наномоторах, состоящих из пары наноболт–наногайка и напоподшипника [13, 38, 58] на основе нанотрубок. Во втором случае возможны НЭМС, работающие аналогично крану, в котором вращение рукоятки преобразуется в поступательное движение стержня.

Так как слой нанотрубки может быть проводя-

щим (см., например, работу [17]), он может быть одновременно как подвижной частью НЭМС, так и частью электрической цепи. (Такая возможность реализована недавно в наномоторах, основанных на относительном вращении слоев углеродной нанотрубки [25, 26].) Мы предлагаем использовать слои нанотрубки в обоих этих качествах в переменном нанорезисторе (см. также [22–24]). Согласно расчетам, проводимость ряда углеродных наносистем, таких как фуллерен, помещенный между двумя однослойными нанотрубками [72], и двухслойная нанотрубка с телескопическими выдвинутыми слоями [73], может меняться на порядки величины при относительном смещении частей наносистемы на расстояние порядка 1 Å. Для обеих наносистем мы предлагаем управлять относительным смещением ее частей и, следовательно, проводимостью нанорезистора с помощью двухслойной нанотрубки. В частности, возможно использование пары наноболт–наногайка для преобразования силы первого типа во вращение проводящего слоя или силы второго типа в скольжение этого слоя вдоль оси. Принципиальные схемы нанорезисторов, основанных на указанных выше наносистемах, показаны на рис. 8б и 8с.

Мы предлагаем также принципиально новые типы НЭМС, основанные на углеродных нанотрубках, устройство которых включает пару наноболт–наногайка (см. также работы [22–24]): нанодрель и

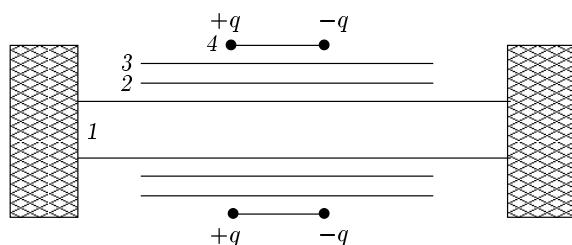


Рис. 9. Принципиальная схема наномотора: фиксированный слой 1 — статор; слои 2 и 3, вращающиеся совместно, — ротор; слои 3 и 4 являются парой наноболт — наногайка. Заряды $\pm q$ на краях слоя 4 могут быть получены в результате химической адсорбции и служить для управления наномотором с помощью электрического поля

наномотор, в котором используется преобразование поступательной силы, направленной вдоль оси нанотрубки, во вращение слоев вокруг этой оси. Использование знакопеременной силы для управления относительным движением слоев позволяет получить движение слоя, аналогичное движению сверла в перфорирующей дрели. Принципиальная схема нанодрели показана на рис. 8а. Такая нанодрель может быть использована для нанолокальной модификации поверхности. Принципиальная схема наномотора показана на рис. 9. Внутренний слой (слой 1) нанотрубки является статором и закреплен неподвижно. Следующие два слоя (2 и 3) являются ротором. Относительное положение этих слоев должно быть фиксировано. Слои 3 и 4 являются парой наноболт — наногайка и служат для преобразования силы, приложенной к слою 4 и направленной вдоль оси нанотрубки, во вращение ротора. Необходимыми условиями работы наномотора являются малый барьер E_ϕ для относительного вращения слоев 1 и 2 и большой барьер E_z для относительного скольжения этих слоев вдоль оси нанотрубки. Оба условия хорошо выполняются в том случае, когда слои 1 и 2 являются нехиральными соизмеримыми слоями с несовместимыми вращательными симметриями слоев [38, 58].

Для работы таких рассмотренных выше НЭМС как нанодрель и наномотор достаточно привести слои нанотрубки в относительное движение или вращение. Эти НЭМС могут быть использованы в обоих режимах работы — Фоккера—Планка и ускоренном. Для адекватной работы переменного нанорезистора необходимо точно управлять относительным положением слоев. Эта НЭМС может быть использована только в ускоренном режиме работы.

Обсудим возможные способы приведения в движение слоев нанотрубок в НЭМС. Недавно было показано, что химическая адсорбция атомов и молекул на краю слоя приводит к перераспределению электрических зарядов на краю слоя [74–76]. Следовательно, при адсорбции атомов и молекул только на одном краю слоя или при адсорбции различных атомов и молекул на противоположных краях слоя слой становится диполем (заряды на краях слоя 4 наномотора показаны на рис. 9). В этом случае к слою-диполю может быть приложена сила со стороны неоднородного электрического поля, имеющего проекцию градиента на ось нанотрубки. Недавно было продемонстрировано движение многослойной нанотрубки, помещенной в воду, под действием неоднородного электрического поля [77]. Это движение является результатом наведения диполей в проводящих слоях нанотрубки. Следовательно, если слой является проводящим, он может быть приведен в движение неоднородным электрическим полем. Было предложено приведение в движение проводящих слоев также под действием неоднородного магнитного поля [63]. При использовании последних двух способов для адекватной работы НЭМС желательно, чтобы остальные слои нанотрубки были полупроводниковыми. Моделирование методом молекулярной динамики показывает, что слои нанотрубки могут быть приведены в относительное движение под действием потока жидкости или газа, взаимодействующего с внешним слоем [78]. Подвижный слой может быть приведен в движение также с помощью наноманипулятора [5].

Обсудим также возможности экспериментального получения предложенных двухслойных нанотрубок с периодически расположенными дефектами, которые могут быть использованы в качестве пары наноболт — наногайка. Новейшие нанотехнологии не позволяют создавать периодически расположенные вакансии одного атома и дефекты Стоуна — Вальса или заменять атом углерода на атом другого элемента. Перенос единичных атомов молекул, адсорбированных на поверхности внешнего слоя, в принципе возможен с помощью иглы сканирующего туннельного микроскопа или атомно-силового микроскопа [79, 80]. Конечно, такая техника делает возможным только штучное производство нанотрубок, которые можно использовать в качестве пары наноболт — наногайка в лабораторных исследованиях. Однако наиболее перспективным способом создания периодически расположенных дефектов атомной структуры слоя нанотрубки является адсорбция частиц на поверхности внешнего слоя. Периодиче-

ское расположение адсорбированных частиц на поверхности внешнего слоя наблюдалось экспериментально [45] и, согласно расчетам в работе [53], может соответствовать основному состоянию системы. Поэтому мы предполагаем, что двухслойные нанотрубки, являющиеся парой наноболт – наногайка, могут быть получены в результате самоорганизации адсорбированных на поверхности внешнего слоя частиц. В этом случае может быть разработана методика производства пар наноболт – наногайка, перспективных для использования в НЭМС.

Отметим, что НЭМС, устройство которых включает пару наноболт – наногайка могут быть основаны не только на углеродных нанотрубках, но также и на нанотрубках другой химической природы. Пара наноболт – наногайка может быть создана на основе двухслойных нанотрубок в случае, когда взаимодействие атомов внутри слоя определяется химическими связями и является сильным, а атомов соседних слоев — слабым ван-дер-ваальсовым, и, следовательно, слои могут сравнительно легко двигаться относительно друг друга (например, нанотрубки из WS₂ [81]).

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложены принципиально новые типы НЭМС, основанные на углеродных нанотрубках с винтовой симметрией потенциального рельефа энергии взаимодействия слоев: переменный нанорезистор, нанодрель для нанолокальной модификации поверхности и наномотор, в котором силы, направленные вдоль оси нанотрубки, преобразуются в относительное вращение слоев. Показано, что возможны два режима работы подобных НЭМС: режим работы Фоккера – Планка, при котором относительное движение слоев вдоль линии резьбы является дрейфом, и ускоренный режим работы, при котором возможно точное управление относительным положением слоев вдоль линии резьбы. Определены условия, при которых могут быть реализованы данные режимы работы, а также обсуждается возможность использования этих режимов в различных НЭМС. Рассмотрены способы приведения НЭМС в движение.

Проведен анализ симметрии потенциального рельефа энергии взаимодействия слоев двухслойных нанотрубок. Показано, что нанотрубки с нехиральными соизмеримыми слоями и периодически расположенными дефектами атомной структуры наи-

более перспективны для использования в НЭМС в качестве пары наноболт – наногайка. В этом случае оба барьера, E_1 для относительного движения слоев вдоль винтовой линии резьбы и E_2 для срыва резьбы, пропорциональны числу дефектов. Таким образом, возможно получение пары наноболт – наногайка с заданной глубиной резьбы.

Исследовано влияние структуры дефекта и параметров потенциала взаимодействия атома, соответствующего дефекту, и атомов слоя без дефектов на характеристики резьбы. Обнаружено, что относительная глубина резьбы $\beta = E_2/E_1$, которая характеризует качество резьбы, слабо зависит от указанных величин. Таким образом, мы показали, что в случае одноатомного дефекта относительная глубина резьбы определяется структурой слоя без дефекта. Следовательно, простая модель, предложенная в данной работе, может быть использована для исследования двухслойных нанотрубок с нехиральными соизмеримыми слоями и периодически расположенными одноатомными дефектами любого типа. Мы полагаем, что нанотрубки с наилучшими характеристиками резьбы являются наиболее перспективными кандидатами для пары наноболт – наногайка и могут быть отобраны с помощью предложенной модели для квантово-химических расчетов количественных характеристик резьбы.

Предположено, что двухслойные нанотрубки, являющиеся парой наноболт – наногайка, могут быть получены в результате самоорганизации адсорбированных на поверхности внешнего слоя частиц.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 05-02-17864, 06-02-81036Бел) и Программы «Низкоразмерные структуры» Министерства промышленности, науки и технологий РФ.

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Junno, K. Depent, L. Montelius, and L. Samuelson, *Appl. Phys. Lett.* **66**, 3627 (1995).
2. M. Porto, M. Urbakh, and J. Klafter, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 6058 (2000).
3. M. F. Yu, O. Lourie, M. J. Dyer et al., *Science* **287**, 637 (2000).
4. M. F. Yu, B. I. Yakobson, and R. S. Ruoff, *J. Phys. Chem. B* **104**, 8764 (2000).
5. J. Cumings and A. Zettl, *Science* **289**, 602 (2000).

6. S. Iijima, *Nature* **354**, 56 (1991).
7. Ю. Е. Лозовик, А. М. Попов, *УФН* **167**, 751 (1997).
8. А. В. Елецкий, *УФН* **174**, 1191 (2004).
9. M. M. J. Treasy, T. W. Ebbesen, and J. M. Gibson, *Nature* **381**, 678 (1996).
10. E. W. Wong, P. E. Sheehan, and C. M. Lieber, *Science* **277**, 1971 (1997).
11. A. Krishnan, E. Dujardin, T. W. Ebbesen et al., *Phys. Rev. B* **58**, 14013 (1998).
12. P. Poncharat, Z. L. Wang, D. Ugarte, and W. A. de Heer, *Science* **283**, 1513 (1999).
13. R. E. Tuzun, D. W. Noid, and B. G. Sumpter, *Nanotechnology* **6**, 52 (1995).
14. D. Srivastava, *Nanotechnology* **8**, 186 (1997).
15. L. Forro, *Science* **289**, 5479 (2000).
16. Q. Zheng and Q. Jiang, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 045503 (2002).
17. R. Saito, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Appl. Phys. Lett.* **60**, 2204 (1992).
18. S. J. Tans, A. R. M. Verschueren, and C. Dekker, *Nature* **393**, 49 (1998).
19. R. Tamura, *Phys. Rev. B* **64**, 204404(R) (2001).
20. T. Rueches, P. Kim, E. Joselevich et al., *Science* **289**, 94 (2000).
21. M. Menon, A. N. Andriotis, D. Srivastava et al., *Phys. Rev. Lett.* **91**, 145501 (2003).
22. Yu. E. Lozovik, A. V. Minogin, and A. M. Popov, *Phys. Lett. A* **313**, 112 (2003).
23. Ю. Е. Лозовик, А. В. Миногин, А. М. Попов, Письма ЖЭТФ **77**, 759 (2003).
24. Yu. E. Lozovik and A. M. Popov, *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures* **12**, 485 (2004).
25. A. M. Fennimore, T. D. Yuzvinsky, W. Q. Han et al., *Nature* **424**, 408 (2003).
26. B. Bourlon, D. C. Glatti, L. Forro, and A. Bachfold, *Nano Lett.* **4**, 709 (2004).
27. R. Saito, R. Matsuo, T. Kimura et al., *Chem. Phys. Lett.* **348**, 187 (2001).
28. T. W. Ebbesen and P. M. Ajayan, *Nature* **358**, 220 (1992).
29. J. L. Hutchison, N. A. Kiselev, E. P. Krinichnaya et al., *Carbon* **39**, 761 (2001).
30. L. Ci, Z. Pao, Z. Zhou et al., *Chem. Phys. Lett.* **359**, 63 (2002).
31. W. Ren, F. Li, J. Chen et al., *Chem. Phys. Lett.* **359**, 196 (2002).
32. S. Bandow, M. Takizawa, K. Hirahara et al., *Chem. Phys. Lett.* **337**, 48 (2001).
33. J. Sloan, R. E. Dunin-Borkowski, J. L. Hutchison et al., *Chem. Phys. Lett.* **316**, 191 (2000).
34. C. T. White, D. H. Robertson, and J. W. Mintmire, *Phys. Rev. B* **47**, 5485 (1993).
35. R. A. Jishi, M. S. Dresselhaus, and G. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **47**, 16671 (1993).
36. A. N. Kolmogorov and V. H. Crespi, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4727 (2000).
37. T. Vuković, M. Damnjanović, and I. Milošević, *Physica E* **16**, 269 (2003).
38. A. V. Belikov, A. G. Nikolaev, Yu. E. Lozovik, and A. M. Popov, *Chem. Phys. Lett.* **385**, 72 (2004).
39. M. Damnjanović, T. Vuković, and I. Milošević, *Eur. Phys. J. B* **25**, 131 (2002).
40. E. Bichoutskaia, A. M. Popov, A. El-Barbary et al., *Phys. Rev. B* **71**, 113403 (2005).
41. A. V. Belikov, A. G. Nikolaev, Yu. E. Lozovik, and A. M. Popov, *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures* **12**, 117 (2004).
42. O. Stephan, P. M. Ajayan, C. Colliex et al., *Science* **266**, 1683 (1994).
43. D. L. Carroll, Ph. Redlich, X. Blase et al., *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2332 (1998).
44. K. Liu, Ph. Avouris, R. Martel, and W. K. Hsu, *Phys. Rev. B* **63**, 161404(R) (2001).
45. H. Ago, R. Azumi, S. Ohshima et al., *Chem. Phys. Lett.* **383**, 469 (2004).
46. H. J. Choi, J. Ihm, S. G. Louie, and M. L. Cohen, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2917 (2000).
47. H. F. Bettinger, T. Dumitrica, G. E. Scuseria, and B. I. Yakobson, *Phys. Rev. B* **65**, 041406 (2002).
48. J.-Y. Li and J. Bernholc, *Phys. Rev. B* **47**, 1708 (1993).
49. P. E. Lammert, V. H. Crespi, and A. Rubio, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 136402 (2001).

50. A. H. Hevidomskyy, G. Csanyi, and M. C. Payne, Phys. Rev. Lett. **91**, 105502 (2003).
51. R. J. Baieriee, S. B. Fagan, R. Mota et al., Phys. Rev. B **64**, 085413 (2001).
52. S. P. Walch, Chem. Phys. Lett. **374**, 501 (2003).
53. K. A. Park, Y. S. Choi, and Y. H. Lee, Phys. Rev. B **68**, 045429 (2003).
54. M. Damnjanović, I. Milosević, T. Vuković, and R. Sredanović, Phys. Rev. B **60**, 2728 (1999).
55. Ю. Е. Лозовик, А. М. Попов, А. В. Беликов, ФТТ **45**, 1333 (2003).
56. L. X. Benedict, N. G. Chopra, M. L. Cohen et al., Chem. Phys. Lett. **286**, 490 (1998).
57. J.-C. Charlier and J. P. Michenaud, Phys. Rev. Lett. **70**, 1858 (1993).
58. E. Bichoutskaia, A. M. Popov, M. I. Heggie, and Yu. E. Lozovik, Phys. Rev. B **73**, 045435 (2006).
59. A. H. R. Palser, Phys. Chem. Chem. Phys. **1**, 4459 (1999).
60. J. P. Lu, X. P. Li, and R. M. Martin, Phys. Rev. Lett. **68**, 1551 (1992).
61. M. Damnjanović, E. Dobardžić, I. Milošević et al., New. J. Phys. **5**, 148.1 (2003).
62. S. B. Legoaas, V. R. Coluci, S. F. Braga et al., Phys. Rev. Lett. **90**, 055504 (2003).
63. S. B. Legoaas, V. R. Coluci, S. F. Braga et al., Nanotechnology **15**, s184 (2004).
64. W. Guo, Y. Guo, H. Gao et al., Phys. Rev. Lett. **91**, 125501 (2003).
65. Y. Zhao, C.-C. Ma, G. Chen, and Q. Jiang, Phys. Rev. Lett. **91**, 175504 (2003).
66. J. L. Rivera, C. McCabe, and P. P. Cummings, Nano Lett. **3**, 1001 (2003).
67. J. W. Kang and H. J. Hwang, J. Appl. Phys. **96**, 3900 (2004).
68. Yu. E. Lozovik and A. M. Popov, Chem. Phys. Lett. **328**, 355 (2000).
69. Ю. Е. Лозовик, А. М. Попов, А. В. Беликов, ФТТ **44**, 180 (2002).
70. A. Burian, J. C. Dore, H. E. Fisher, and J. Sloan, Phys. Rev. B **59**, 1665 (1999).
71. F. J. Giessibl, Rev. Mod. Phys. **75**, 949 (2003).
72. R. Gutierrez, G. Fagas, G. Cuniberti et al., Phys. Rev. B **65**, 113410 (2002).
73. D. H. Kim and K. J. Chang, Phys. Rev. B **66**, 155402 (2002).
74. J. S. Murray, P. Lane, M. C. Concha, and P. Politzer, in *Nano and Giga Challenges in Microelectronics*, Cracow, Poland, September 13–17 (2004), Book of Abstracts, p. 175.
75. Y. G. Hwang and Y. H. Lee, J. Korean Phys. Soc. **42**, 267 (2005).
76. N. Park, Y. Miyamoto, K. Lee et al., Chem. Phys. Lett. **403**, 135 (2005).
77. D. L. Fan, F. Q. Zhu, R. C. Cammarata, and C. L. Chien, Phys. Rev. Lett. **94**, 247208 (2005).
78. J. W. Kang and H. J. Hwang, Nanotechnology **15**, 1633 (2004).
79. D. M. Eigler and E. K. Schweizer, Nature **344**, 525 (1990).
80. M. F. Crommie, C. Plutz, and D. M. Eigler, Science **262**, 218 (1993).
81. R. Tenne, L. Margulis, M. Genut, and G. Hodes, Nature **360**, 445 (1992).