

Наноактуатор, основанный на углеродной нанотрубке

© С.С. Кузнецов, Ю.Е. Лозовик*, А.М. Попов*

Московский физико-технический институт,
141700 Долгопрудный, Московская обл., Россия

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

E-mail: lozovik@isan.troitsk.ru, popov@ttk.ru

(Поступила в Редакцию 6 сентября 2006 г.
В окончательной редакции 11 октября 2006 г.)

Предложена концепция наноактуатора, основанного на углеродной нанотрубке и предназначенного для преобразования поступательной силы, направленной вдоль оси нанотрубки, в относительное вращение слоев. Рассмотрены возможные схемы наноактуатора, а также проведены численные расчеты, демонстрирующие принципы его работы. Обсуждаются возможные способы приведения наноактуатора в движение.

Работа поддержана грантом РФФИ № 05-02-17864 и грантом БРФФИ-РФФИ № 06-02-81036-Бел-а.

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

1. Введение

Произвольное [1,2] и контролируемое манипулятором [3] относительное движение слоев в многослойных углеродных нанотрубках [4], а также экстраординарные упругие свойства нанотрубок [5,6] делают перспективным использование слоев нанотрубок в качестве подвижных элементов наноэлектромеханических систем (НЭМС). Был предложен ряд устройств, перспективных для применения в НЭМС и основанных на относительном движении слоев углеродных нанотрубок: наноподшипники вращения [7] и скольжения [3], нанощестерня [8], нанопереклюатель [9], гигагерцевый осциллятор [10,11], броуновский наномотор [12], нанореле [13], а также пара наноболт–наногайка [14–17]. Более того, экспериментально реализованы наномоторы, в которых в качестве вала и втулки использованы слои многослойной углеродной нанотрубки [18,19].

Недавно было предложено использовать двухслойную углеродную нанотрубку, являющуюся парой наноболт–наногайка, для преобразования силы, приложенной к одному из слоев и направленной вдоль оси нанотрубки, в относительное вращение слоев [15–17]. Такая пара наноболт–наногайка может быть использована в наноактуаторе (т.е. в наноустройстве, предназначенном для приведения НЭМС в движение), принцип работы которого аналогичен принципу приведения во вращение юлы [20]. В настоящей работе предложена концепция наноактуатора и проведены расчеты, подтверждающие возможность реализации наноактуатора. Работа имеет следующую структуру: в разделе 2 предложены принципиальная схема наноактуатора, список возможных нанотрубок, из которых может быть изготовлен наноактуатор, а также аналитическое описание принципов работы наноактуатора; раздел 3 посвящен численным расчетам относительного движения слоев нанотрубки, использованной в устройстве наноактуатора; в разделе 4 обсуждаются возможные способы приведения наноактуатора в движение.

2. Схема и принцип действия наноактуатора

Принципиальные схемы наноактуатора показаны на рис. 1. В схеме, показанной на рис. 1, *a*, внутренний слой (слой 1) нанотрубки является статором и закреплен неподвижно. Следующие два слоя (слои 2 и 3) являются ротором. Относительное положение этих слоев должно быть зафиксировано. Статор и ротор представляют собой наноподшипник вращения. Внешние слои служат для преобразования силы, приложенной к слою 4 и направленной вдоль оси нанотрубки, во вращение ротора. Такое преобразование возможно в том случае, если слои 3 и 4 образуют пару наноболт–наногайка. Схема, показанная на рис. 1, *b*, отличается от схемы на рис. 1, *a* обратным порядком расположения слоев: статор

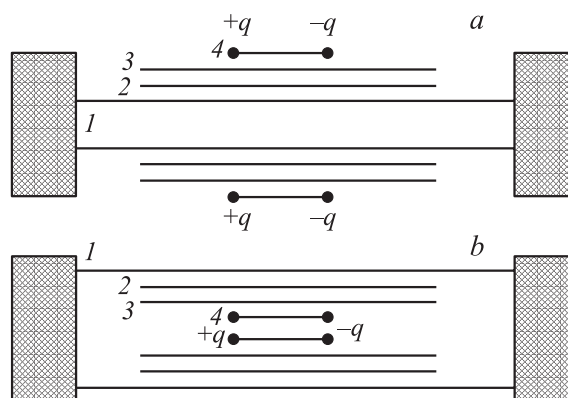


Рис. 1. Принципиальные схемы наноактуатора: со статором — внутренним слоем (*a*), со статором — внешним слоем (*b*). Фиксированный слой 1 — статор. Слои 2 и 3, вращающиеся совместно, — ротор. Слои 3 и 4 являются парой наноболт–наногайка. Заряды на краях слоя 4 могут быть получены в результате химической адсорбции и служить для управления наноактуатором с помощью электрического поля.

(слой 1) является внешним, а пара наноболт–напогайка (слои 3 и 4) — внутренними слоями.

Слои 1 и 2 представляют собой наноподшипник вращения в том случае, когда выполняется следующее условие: $E_\phi \ll E_z$, где E_ϕ и E_z — барьеры для относительного вращения слоев 1 и 2 и их скольжения вдоль оси нанотрубки соответственно. Это условие очень хорошо выполняется в том случае, когда слои 1 и 2 являются нехиральными соизмеримыми слоями (слои 1 и 2 образуют двухслойную нанотрубку типа „armchair“ $(n, n)@(m, m)$ или типа „zigzag“ $(n, 0)@(m, 0)$). Расчеты показывают, что в таких нанотрубках барьеры E_ϕ для относительного вращения слоев очень малы (менее 0.005 meV/atom для расчетов методом функционала плотности [21] и менее 10^{-11} meV/atom для расчетов с использованием полуэмпирических потенциалов [22]) и, по крайней мере, на несколько порядков меньше барьеров E_z для относительного скольжения слоев (исключением являются только $(5, 5)@(10, 10)$ и $(9, 0)@(18, 0)$ двухслойные нанотрубки (ДН), имеющие существенные барьеры для относительного вращения слоев). Поэтому было предложено использовать указанные двухслойные нанотрубки как подшипники вращения с точно фиксированным положением вдоль оси вращения [22,23].

Для того чтобы исследовать характеристики относительного движения слоев нанотрубки, необходимо рассчитать зависимость энергии взаимодействия U 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 ДН может быть использована в качестве пары наноболт–напогайка 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 для относительного движения слоев ДН вдоль линии резьбы и для срыва резьбы (движение поперек резьбы) соответственно, 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 [15,16].

В общем случае слой нанотрубки имеет винтовую симметрию (см. [24]), поэтому рельеф типа резьбы может наблюдаться для большинства ДН. Однако в тех случаях, когда ДН со слоями без дефектов могут иметь рельеф типа резьбы, весьма малый барьер для срыва резьбы, связанный с несовместимостью винтовых симметрий слоев, не позволяет использовать такие ДН в качестве пары наноболт–напогайка в НЭМС [15,16,20,25].

Было показано, что ДН с соизмеримыми слоями, из которых один слой является хиральным, а другой содержит периодически расположенные дефекты атомной структуры, наиболее перспективны для использования в НЭМС в качестве пары наноболт–напогайка [20,22,25].

Барьер E_ϕ для относительного вращения нехиральных слоев 1 и 2 будет мал только в случае, когда оба слоя не содержат дефектов атомной структуры. Как показано в [20,25], нехиральный слой без дефектов не может быть использован для создания пары наноболт–напогайка. Следовательно, один и тот же слой не может входить и в наноподшипник, и в пару наноболт–напогайка. Таким образом, данный наноактуатор может быть сделан только из нанотрубки, содержащей не менее четырех слоев: два слоя являются наноподшипником вращения и два слоя — парой наноболт–напогайка. Для адекватной работы наноактуатора желательно, чтобы относительное положение слоев 2 и 3 было фиксированным. Относительное смещение слоев 2 и 3 вдоль оси нанотрубки будет предотвращено, если слой 3 будет нехиральным слоем, соизмеримым со слоем 2. Для предотвращения относительного вращения слоев 2 и 3 мы предлагаем создать в слое 3 дефекты атомной структуры. Эти же дефекты, периодически расположенные в идентичных местах элементарных ячеек слоя 3, могут быть использованы для создания пары наноболт–напогайка из слоев 3 и 4. В качестве слоя 4 удобно использовать хиральный слой, соизмеримый со слоем 3. В этом случае барьеры для относительного движения слоев вдоль линии резьбы и для срыва резьбы пропорциональны полному числу дефектов на длине перекрытия слоев 3 и 4 [20,25]. Таким образом, барьеры с необходимой для работы наноактуатора величиной могут быть получены с помощью изменения длины слоя 4 или концентрации дефектов в слое 3.

Итак, рассматриваемый наноактуатор состоит из трех последовательных соизмеримых нехиральных внутренних слоев и соизмеримого с ними хирального слоя.

Недавно была предложена классификация ДН с соизмеримыми слоями [22,26]. Согласно этой классификации, такие ДН образуют семейство, все члены которого имеют одинаковые расстояния между слоями и углы хиральности внутреннего и внешнего слоев. Данная классификация является одновременно классификацией возможных пар соизмеримых соседних слоев. В частности, для нехиральных соизмеримых слоев расстояние между слоями соответствует экспериментальному для следующих индексов хиральности слоев 1, 2 и 3:

$$(k, 0)@(k + 9, 0)@(k + 18, 0), \quad k \geq 4 \quad (1)$$

$$(k, k)@(k + 5, k + 5)@(k + 10, k + 10), \quad k \geq 2. \quad (2)$$

В первом случае расстояние между слоями 3.50 Å, во втором — 3.37 Å.

В качестве слоев 3 и 4 могут быть использованы нанотрубки из всех семейств с одним нехиральным и одним

Семейства ДН, которые могут быть использованы в наноактуаторе в качестве пары наноболт–наногайка

№	$(n_3, m_3)@(n_4, m_4)$	$H, \text{Å}$	$\Theta, \text{градусы}$
Статор — внутренний „zigzag“ слой (рис. 1, а)			
1	$(26 + 7n, 0)@(25 + 5n, 15 + 3n)$	29.82	21.79
2	$(30 + 13n, 0)@(24 + 8n, 21 + 7n)$	55.38	27.80
3	$(29 + 19n, 0)@(32 + 16n, 10 + 5n)$	80.94	13.17
4	$(22 + 31n, 0)@(24 + 24n, 11 + 11n)$	132.06	17.90
5	$(28 + 37n, 0)@(33 + 33n, 7 + 7n)$	157.62	9.43
6	$(34 + 43n, 0)@(35 + 35n, 13 + 13n)$	183.18	15.18
7	$(40 + 49n, 0)@(39 + 39n, 16 + 16n)$	208.74	16.43
8	$(58 + 67n, 0)@(45 + 45n, 32 + 32n)$	285.42	24.43
Статор — внутренний „armchair“ слой (рис. 1, а)			
9	$(16 + 7n, 16 + 7n)@(33 + 11n, 6 + 2n)$	17.22	8.21
10	$(21 + 13n, 21 + 13n)@(44 + 22n, 2 + n)$	31.97	2.20
11	$(14 + 19n, 14 + 19n)@(26 + 26n, 11 + 11n)$	46.73	16.83
12	$(26 + 31n, 26 + 31n)@(46 + 46n, 13 + 13n)$	76.24	12.10
13	$(32 + 37n, 32 + 37n)@(47 + 47n, 26 + 26n)$	91.00	20.57
Статор — внешний „zigzag“ слой (рис. 1, б)			
14	$(5 + 5n, 3 + 3n)@(16 + 7n, 0)$	29.82	21.79
15	$(8 + 8n, 7 + 7n)@(22 + 13n, 0)$	55.38	27.80
16	$(16 + 16n, 5 + 5n)@(28 + 19n, 0)$	80.94	13.17
17	$(24 + 24n, 11 + 11n)@(40 + 31n, 0)$	132.06	17.90
18	$(33 + 33n, 7 + 7n)@(46 + 37n, 0)$	157.62	9.43
19	$(35 + 35n, 13 + 13n)@(52 + 43n, 0)$	183.18	15.18
20	$(39 + 39n, 16 + 16n)@(58 + 49n, 0)$	208.74	16.43
21	$(45 + 45n, 32 + 32n)@(76 + 67n, 0)$	285.42	24.43
Статор — внешний „armchair“ слой (рис. 1, б)			
22	$(11 + 11n, 2 + 2n)@(12 + 7n, 12 + 7n)$	17.22	8.21
23	$(22 + 22n, 1 + n)@(18 + 13n, 18 + 13n)$	31.97	2.20
24	$(26 + 26n, 11 + 11n)@(24 + 19n, 24 + 19n)$	46.73	16.83
25	$(46 + 46n, 13 + 13n)@(36 + 31n, 36 + 31n)$	76.24	12.10
26	$(47 + 47n, 26 + 26n)@(42 + 37n, 42 + 37n)$	91.00	20.57

Примечание. Для каждого семейства $n = 0$ соответствует наноактуатору с минимальным возможным радиусом. В таблицу включены все семейства, для которых минимально возможный радиус слоя $4 R_4 \leq 100 \text{Å}$, индексы хиральности слоя $4 n_4, m_4 < 50$, а расстояние между слоями $R_{34} \in [3.3, 3.7] \text{Å}$. H — длина элементарной ячейки ДН, Θ — угол хиральности слоя 4 .

хиральным соизмеримыми слоями. Мы выбрали такие семейства из полного списка семейств двухслойных соизмеримых нанотрубок, приведенного в [22,26]. Список всех возможных двухслойных углеродных нанотрубок, из которых может быть изготовлена пара наноболт–наногайка, пригодная для использования в наноактуаторе, приведен в таблице. Четырехслойная нанотрубка, на основе которой может быть создан наноактуатор, определяется следующим образом: после выбора индексов хиральности слоев 3 и 4 (пары наноболт–наногайка) в таблице индексы хиральности слоев 1 и 2 подбираются с помощью выражений (1) и (2).

Рассмотрим работу наноактуатора, в котором к слою 4 приложена сила \mathbf{F} , направленная вдоль оси нанотрубки. Как показано в работах [15,16], движение слоя 4 относительно слоя 3 в результате действия силы, направленной вдоль оси нанотрубки, описывается тем же уравнением движения, что и движение частицы в плоскости в

потенциальном поле, соответствующем энергии взаимодействия слоев 3 и 4 ,

$$M_4 \ddot{r} = -\frac{dU(r)}{dr} + \mathbf{F}, \quad (3)$$

где M_4 — масса слоя 4 ; $U(r)$ — энергия взаимодействия слоев 3 и 4 ; r — вектор с компонентами z и $L = \phi R_4$, где z и ϕ — цилиндрические координаты, описывающие положение слоя 4 относительно слоя 3 ; R_4 — радиус слоя 4 . В рассматриваемой плоскости движения частицы линии резьбы являются прямыми, пересекающими ось координаты L под углом резьбы χ . Таким образом, относительное винтовое движение слоев 3 и 4 будет аналогично движению частицы вдоль прямого потенциального желоба линии резьбы в результате действия силы \mathbf{F} , направленной под углом к направлению желоба.

Рассмотрим случай короткого импульса силы $\mathbf{P} = \mathbf{F}\Delta t$, когда время Δt действия силы \mathbf{F} существенно меньше,

чем время, за которое частица перемещается в соседний минимум потенциального рельефа. Разложим скорость \mathbf{V} , которую приобрела частица в результате действия импульса силы \mathbf{P} , на взаимно перпендикулярные компоненты $V_{\parallel} = V \sin \chi$ и $V_{\perp} = V \cos \chi$, направленные вдоль и поперек линии резьбы соответственно. Частица придет в движение вдоль линии резьбы (соответственно слой 4 придет в винтовое движение относительно слоя 3), если будут выполнены следующие условия.

1) Начальная кинетическая энергия частицы, соответствующая движению вдоль линии резьбы, будет больше барьера E_1 для такого движения:

$$\frac{M_4 V^2 \sin^2 \chi}{2} > E_1. \quad (4)$$

2) Начальная кинетическая энергия частицы, соответствующая движению поперек линии резьбы, будет меньше барьера E_2 для срыва резьбы:

$$\frac{M_4 V^2 \cos^2 \chi}{2} < E_2. \quad (5)$$

Легко показать, что условия (4) и (5) могут быть выполнены одновременно только в случае, когда

$$\operatorname{ctg}^2 \chi < \frac{E_2}{E_1} = \beta. \quad (6)$$

Это условие определяет возможность создания наноактуатора на основе данной пары наноболт–наногайка. Отметим, что из условия (6) следует, что для создания наноактуатора подходят пары наноболт–наногайка с небольшой относительной глубиной резьбы, если угол резьбы превышает 45° .

Зависимость скорости движения частицы вдоль линии резьбы $V_{\parallel}(t)$ от времени может быть найдена интегрированием уравнения (3). Скорость вращения слоя 4 есть $V_4(t) = V_{\parallel}(t) \cos \chi$. Поскольку сила \mathbf{F} направлена вдоль оси вращения подвижных слоев наноактуатора, момент импульса системы из слоев 2, 3 и 4 после действия этой силы останется равным 0:

$$M_4 V_{\parallel}(t) \cos \chi R_4 + M_2 V_2(t) R_2 + M_3 V_3(t) R_3 = 0, \quad (7)$$

где M_2 и M_3 — массы слоев 2 и 3 соответственно, $V_2(t)$ и $V_3(t)$ — зависимости от времени для скоростей вращения слоев 2 и 3 соответственно, R_2 и R_3 — радиусы слоев 2 и 3 соответственно. Заменим в уравнении (7) скорости $V_2(t)$ и $V_3(t)$ на угловую скорость $\omega_3(t) = V_2(t) R_2 = V_3(t) R_3$ вращения слоев 2 и 3, относительное положение которых фиксировано. Тогда из уравнения (7) определим угловую скорость $\omega_2(t)$ ротора из слоев 2 и 3:

$$\omega_3(t) = \frac{M_4 V_{\parallel}(t) \cos \chi R_4}{M_2 R_2^2 + M_3 R_3^2} = \frac{M_4 \omega_4(t) R_4}{M_2 R_2^2 + M_3 R_3^2}, \quad (8)$$

где $\omega_4 = V_{\parallel}(t) \cos \chi R_4$ — угловая скорость слоя 4.

Угол ξ_3 , на который повернется ротор через время t_0 после приложения к слою 4 импульса силы \mathbf{P} , определяется следующим выражением:

$$\xi_3 = \int_0^{t_0} \omega_3(t) dt. \quad (9)$$

Угловое вращение ротора в момент времени t_0 может быть остановлено приложением к слою 4 противоположно направленного импульса силы $-\mathbf{P}$. Таким образом, предложенный наноактуатор может быть использован для поворота ротора на определенный угол или определенное число оборотов.

Определим минимальную длину ротора L_3 , при которой в данном наноактуаторе может быть осуществлен поворот ротора на угол ξ_3 . Максимальное число оборотов слоя 4 относительно слоя 3 равно отношению разницы длины слоя 3 и длины L_4 слоя 4 к шагу резьбы h , определяемому следующей формулой:

$$h = 2\pi R_4 \sin \chi. \quad (10)$$

Отсюда получаем, что максимальный угол ξ_4 поворота слоя 4 относительно слоя 3 есть

$$\xi_4 = \frac{L_4 - L_3}{R_4 \sin \chi}. \quad (11)$$

В любой момент времени t_0 после приложения к слою 4 импульса силы \mathbf{P} отношение углов $\xi_3(t_0)$ и $\xi_4(t_0)$ определяется выражением

$$\frac{\xi_3(t_0)}{\xi_4(t_0)} = \frac{\int_0^{t_0} \omega_3(t) dt}{\int_0^{t_0} \omega_4(t) dt}. \quad (12)$$

Подставляя уравнения (8) и (11) в уравнение (12), получим

$$\xi_3 = \frac{(L_4 - L_3) M_4 R_4}{(M_2 R_2^2 + M_3 R_3^2) \sin \chi}. \quad (13)$$

Массу каждого слоя представим в виде

$$M_i = 2\pi L_i R_i \sigma_i, \quad (14)$$

где σ_i — поверхностная плотность слоя, которую для всех слоев считаем одинаковой. В результате уравнение (13) примет следующий вид:

$$\xi_3 = \frac{(L_4 - L_3) L_4 R_4^2}{L_3 (R_2^3 + R_3^3) \sin \chi}. \quad (15)$$

Откуда получаем выражение для минимальной длины ротора

$$L_3 = \frac{L_4^2 R_4^2}{L_4 R_4^2 + \xi_3 (R_2^3 + R_3^3) \sin \chi}. \quad (16)$$

3. Методика расчета

Для (11, 2)@(12, 12) ДН проведены расчеты потенциального рельефа энергии взаимодействия слоев. Эта ДН является парой наноболт–наногайка в наноактуаторе со статором — внешним слоем, основанном на (11, 2)@(12, 12)@(19, 19)@(26, 26) четырехслойной нанотрубке. Выбор (11, 2)@(12, 12) ДН вызван малым числом атомов в ее элементарной ячейке.

В настоящее время отсутствуют детальные исследования не только взаимодействия между слоями углеродной нанотрубки, но даже и взаимодействия между слоями графита. Как различные экспериментальные измерения, так и различные теоретические расчеты дают разброс значений энергии взаимодействия слоев графита на два порядка величины (см. работу [27] и ссылки в ней). В экспериментах, посвященных измерению пороговых сил, необходимых для приведения слоев в относительное движение вдоль оси нанотрубки, не были определены индексы хиральности слоев [1–3]. Следовательно, такие эксперименты не могут быть использованы для проверки расчетов относительного движения слоев. Только для (5, 5)@(10, 10) ДН с небольшим числом атомов в элементарной ячейке барьеры для относительного движения слоев нанотрубки рассчитаны не только с использованием полуэмпирических потенциалов [14, 22, 28], но также и с помощью расчетов из первых принципов [21, 23, 29, 30]. Разные методы расчетов для ДН (5, 5)@(10, 10) дают различные значения величины барьеров E_z и E_ϕ для относительного скольжения слоев вдоль оси нанотрубки и для относительного вращения слоев соответственно. Однако для качественной характеристики потенциального рельефа (отношения этих барьеров $\beta_b = E_\phi/E_z$) с помощью различных методов расчета для (5, 5)@(10, 10) ДН были определены близкие значения. А именно значения $\beta_b = 2.08$ [21], $\beta_b = 2.85$ [23] и $\beta_b = 2.3$ [29] были получены с помощью метода функционала плотности, $\beta_b = 3.5$ — с помощью метода сильной связи [30]. Значения $\beta_b = 3.1$ [14] и $\beta_b = 2.9$ [22] были получены для случая, когда взаимодействие между слоями описывалось потенциалом Леннарда–Джонса $U = 4\epsilon_0((\sigma_0/r)^{12} - (\sigma_0/r)^6)$ с параметрами $\epsilon_0 = 2.968$ meV и $\sigma_0 = 3.407$ Å, при этом для расчетов в [14] проводился отжиг структуры слоев, а в [22] слои считались твердыми. Более того, использование потенциала Леннарда–Джонса [22] и других полуэмпирических потенциалов [28, 31] позволило получить важный качественный результат: потенциальный рельеф для всех ДН с соизмеримыми слоями, хотя бы один из которых хиральный, является экстремально плоским. Таким образом, мы полагаем, что простой потенциал Леннарда–Джонса дает адекватные качественные характеристики формы потенциального рельефа. Кроме того, число атомов в элементарных ячейках ДН с соизмеримыми слоями, хотя бы один из которых хиральный, слишком велико для того, чтобы можно было исследовать взаимодей-

ствие между слоями с помощью расчетов из первых принципов.

Поэтому потенциал Леннарда–Джонса с указанными выше параметрами использован в настоящей работе для описания парного взаимодействия атомов, принадлежащих соседним слоям. Данные параметры потенциала подобраны под расстояние между слоями и модули упругости графита. Отметим, что потенциал Леннарда–Джонса был успешно использован для изучения основного состояния и фазовых переходов в кристалле C_{60} [32], для исследования потенциального рельефа энергии взаимодействия между слоями ДН [14–17, 21, 33] и относительного движения слоев [10, 11] в нанотрубках без дефектов. Для того чтобы исключить влияние края нанотрубки на потенциальный рельеф, мы рассматриваем ДН, состоящие из длинного внутреннего и короткого внешнего слоев. Длина внешнего слоя выбиралась равной эквивалентной длине элементарной ячейки ДН, длина внутреннего слоя выбиралась таким образом, чтобы учесть все пары атомов с межатомным расстоянием, меньшим радиуса обрезания потенциала $40\sigma_0$. Было показано, что учет деформации слоев не влияет существенно на характеристики потенциальных рельефов как ДН [22, 31], так и двухслойных углеродных наночастиц [34, 35]. Например, барьеры для относительного вращения и скольжения слоев ДН (5, 5)@(10, 10), рассчитанные для слоев с неотожженной структурой [22], отличаются только на 14% от барьеров, полученных Дрессельхаус и др., которые использовали отожженную структуру слоев [14]. По этой причине мы рассматриваем взаимодействие твердых слоев ДН. Структура слоя была получена сворачиванием листа графита с длиной связи 1.42 Å (длина связи многослойных нанотрубок совпадает с длиной связи в графите в пределах точности измерения ~ 0.01 Å с помощью дифракции нейтронов [36]).

Потенциальный рельеф для любых ДН с соизмеримыми слоями, из которых хотя бы один хиральный, рассчитанный с помощью полуэмпирических потенциалов, является экстремально плоским. Этот факт объясняется несовместимостью винтовых симметрий слоев [37]. Например, барьер для относительного вращения слоев (8, 2)@(16, 4) ДН, рассчитанный с помощью потенциала Леннарда–Джонса, составляет около $5 \cdot 10^{-12}$ meV на атом, и это единственный обнаруженный пример, когда барьер для относительного движения хиральных соизмеримых слоев превышает предел точности вычислений [22]. Величина других барьеров для десятков рассмотренных ДН с хиральными соизмеримыми слоями меньше точности вычислений [22]. Расчет с помощью потенциала Креспи и Колмогорова [31] также показывает, что для всех рассмотренных ДН с соизмеримыми слоями без дефектов, из которых хотя бы один слой хиральный, потенциальный рельеф является экстремально плоским [28]. Энергия взаимодействия между слоями U_{def} для ДН с дефектами может быть

записана в виде

$$U_{\text{def}}(\phi, z) = U_{\text{perf}}(f, z) + \sum_{i,j=1}^{i=N_p, j=N_d} (U_{ij_{\text{def}}}(\phi, z) - U_{ij_{\text{perf}}}(\phi, z)), \quad (17)$$

где U_{perf} — энергия взаимодействия слоев для ДН 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; $U_{ij_{\text{def}}}(\phi, z)$ и $U_{ij_{\text{perf}}}(\phi, z)$ — парные энергии взаимодействия между атомами целого слоя и N_d атомами с измененными свойствами в слое с дефектами для ДН с дефектами и без соответственно. Поскольку для ДН с хиральными соизмеримыми слоями без дефектов потенциальный рельеф является экстремально плоским $U_{\text{perf}}(z, \phi) \approx U_0$, где U_0 — постоянная, первый член в уравнении (17) не вносит вклад 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 ДН с хиральными соизмеримыми слоями с дефектами. Следует заметить, что этот метод не может быть использован для ДН с обоими нехиральными соизмеримыми слоями, у которых потенциальные рельефы с существенными барьерами для относительного движения слоев обнаружены и в случае слоев без дефектов [22].

В работе [20] рассмотрены различные типы дефектов: вакансия одного атома и замещение одного атома углерода на частицу с измененными параметрами взаимодействия между этой частицей и атомами углерода в соседнем идеальном слое. Было показано, что тип и геометрические характеристики дефекта, а также величина параметров потенциала взаимодействия замененных атомов с атомами целого слоя не влияют на качественную характеристику резьбы. Поэтому исследовалось относительное движение слоев пары наноболт–наногайка для одного типа дефекта — вакансии одного атома.

4. Результаты и обсуждение

Ранее были проведены расчеты потенциального рельефа энергии взаимодействия слоев ДН как пары наноболт–наногайка только для случая одинакового положения дефекта в каждой элементарной ячейке ДН [20,22,25]. Было обнаружено, что решетка из минимумов потенциального рельефа $U(r)$ (r — вектор с компонентами z и $L = \phi R$, где z и ϕ — цилиндрические координаты, описывающие относительное положение слоев; R — радиус слоя без дефектов) повторяет структуру развертки слоя без дефектов: их элементарные ячейки совпадают.

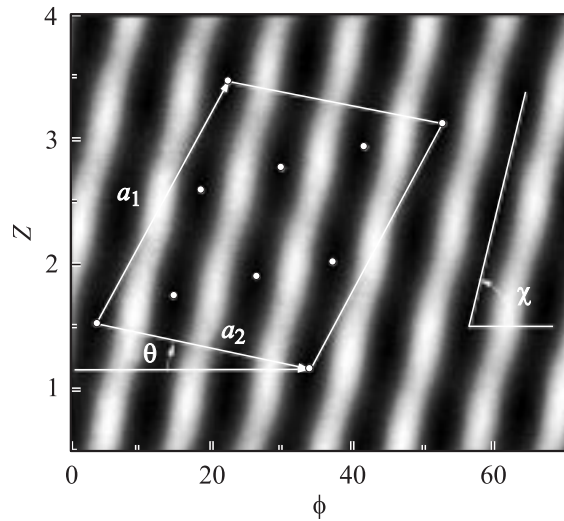


Рис. 2. Потенциальный рельеф энергии взаимодействия слоев (11, 2)@(12, 12) ДН с семью вакансиями на элементарную ячейку ДН (пары наноболт–наногайка) как функция относительного смещения Z внешней стенки вдоль оси нанотрубки и угла ϕ относительного вращения внешней стенки вокруг оси. χ — угол резьбы, Θ — угол хиральности слоя без вакансий, a_1 и a_2 — единичные векторы элементарной ячейки развертки слоя без вакансий. Светлые кружки соответствуют минимумам потенциального рельефа, приходящимся на эту ячейку.

В настоящей работе мы проводим для (11, 2)@(12, 12) ДН, являющейся парой наноболт–наногайка в выбранном в качестве примера наноактуаторе, расчеты потенциального рельефа для различного числа положений вакансий атомов во внешнем слое. Если вакансии расположены в элементарной ячейке ДН достаточно далеко друг от друга, каждая элементарная ячейка ДН может содержать в слое (12,12) все вакансии с различными положениями. В противном случае условие применимости полученных результатов является совпадением полного числа вакансий в слое (12,12) с различными положениями в элементарной ячейке ДН.

Оказалось, что не только относительная глубина резьбы, но и качественная форма потенциального рельефа — угол резьбы и число линий резьбы — определяются числом положений вакансий в элементарной ячейке ДН. Наибольшая относительная глубина резьбы получена в случае семи различных положений вакансий в элементарной ячейке ДН, причем все эти вакансии расположены на одной прямой, параллельной оси нанотрубки. Для этого случая потенциальный рельеф и характеристики резьбы представлены на рис. 2. Итак, согласно нашим расчетам, для этого случая относительная глубина резьбы $\beta = 5.812$, т.е. достаточно велика. Кроме того, для рассчитанного угла резьбы $\chi = 70.9^\circ$ условие (6) выполняется для любой относительной глубины резьбы. Таким образом, возможно изготовление наноактуатора на основе четырехслойной нанотрубки (11, 2)@(12, 12)@(19, 19)@(26, 26).

Два типа корреляции между структурой развертки слоя без дефектов и решеткой из минимумов потенциального рельефа и энергии взаимодействия слоев ДН как пары наноболт–наогайка было найдено для ДН с коротким и длинным несоизмеримыми хиральными слоями [15]. Только один из этих типов найден для ДН с соизмеримыми слоями с одним одинаковым дефектом в каждой элементарной ячейке ДН [20,25]. Потенциальный рельеф, представленный на рис. 2, имеет новый тип такой корреляции: на каждую элементарную ячейку развертки слоя без дефектов приходится семь эквивалентных минимумов потенциального рельефа.

Обсудим теперь возможные способы приведения наноактуатора в движение. Сначала рассмотрим способы, которые могут быть использованы для обеих показанных на рис. 1 схем наноактуатора, как с внутренним, так и внешним слоем 4. Расчеты распределения заряда выявили появление дипольного момента при химической адсорбции молекул Br_2 [38] и H_2O [39] на краю одностенных нанотрубок. Более того, знак заряда, перемещенного к краю, зависит от атомов, адсорбированных на открытых краях нанотрубки [40]. Поэтому мы предлагаем увеличивать дипольный момент слоя 4 в результате адсорбции доноров и акцепторов заряда на противоположных открытых краях слоя. В этом случае наноактуатор может быть приведен в движение с помощью неоднородного электрического поля. В случае когда слой 4 является проводящим, наноактуатор может быть приведен в движение с помощью неоднородного магнитного поля, направленного вдоль оси наноактуатора [41].

Ряд способов приведения наноактуатора в движение, рассмотренных далее, могут быть использованы только для наноактуатора с внешним статором и внутренним подвижным слоем 4 (рис. 1, *b*). Было сделано предположение, что подвижный слой может быть заряжен в результате допирования [10,11]. Согласно расчетам, валентный электрон изолированного атома калия в металлофуллерене $\text{K}@C_{60}$ полностью переносится на фуллерен C_{60} [42]. Было сделано предположение о том, что аналогичный перенос заряда с атомов металла на нанотрубку происходит также в случае, когда металлофуллерены находятся внутри одностенной нанотрубки [43]. Было также сделано предположение о том, что в НЭМС на основе таких нанотрубок происходит дальнейший перенос заряда на присоединенные к нанотрубке электроды. Таким образом, атомы металла, заключенные в нанотрубку, могут становиться ионами и внутренний слой 4 с атомами металла внутри может быть приведен в движение с помощью электрического поля [44].

Был разработан также ряд методов, позволяющих внедрять магнитные материалы внутрь нанотрубки [45–47]. В этом случае движением слоя 4, заполненного магнитным материалом, можно управлять с помощью магнитного поля.

Согласно расчетам, электростатические потенциалы существенно различны на открытых и закрытых колпач-

ками концах однослойной нанотрубки [48]. Следовательно, если слой 4 сделать открытым с одного конца и закрытым с другого, у него будет дипольный момент, и наноактуатор может быть приведен в движение с помощью неоднородного электрического поля.

В настоящее время достигнут значительный прогресс в методах нанотехнологии, делающих возможным изготавливать НЭМС на основе углеродных нанотрубок. В частности, возможно перемещение одностенных нанотрубок [49,50] и относительное движение слоев многостенных нанотрубок [3] с помощью наноманипулятора, удаление с нанотрубок, закрывающих концы колпачков [51–53], и нарезка слоев нанотрубок на части желаемой длины [54]. Недавно был разработан способ однозначного определения индексов хиральности стенок [55]. Все это вселяет в нас надежду, что рассмотренный в настоящей работе наноактуатор может быть изготовлен с использованием нанотехнологий ближайшего будущего.

Список литературы

- [1] M.F. Yu, O. Louric, M.J. Dyer, K. Moloni, R.S. Ruoff. *Science* **287**, 637 (2000).
- [2] M.F. Yu, B.I. Yakobson, R.S. Ruoff. *J. Phys. Chem. B* **104**, 8764 (2000).
- [3] J. Cumings, A. Zettl. *Science* **289**, 602 (2000).
- [4] S. Iijima. *Nature* **354**, 56 (1991).
- [5] M.M.J. Treasy, T.W. Ebbesen, J.M. Gibson. *Nature* **381**, 678 (1996).
- [6] E.W. Wong, P.E. Sheehan, C.M. Lieber. *Science* **277**, 1971 (1997).
- [7] R.E. Tuzun, D.W. Noid, B.G. Sumpter. *Nanotechnology* **6**, 52 (1995).
- [8] D.W. Srivastava. *Nanotechnology* **8**, 186 (1997).
- [9] L. Forro. *Science* **289**, 560 (2000).
- [10] Q. Zheng, Q. Jiang. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 045 503 (2002).
- [11] Q. Zheng, J.Z. Liu, Q. Jiang. *Phys. Rev. B* **65**, 245 409 (2002).
- [12] Z.C. Tu, X. Hu. *Phys. Rev. B* **72**, 033 404 (2005).
- [13] L. Maslov. *Nanotechnology* **17**, 2475 (2006).
- [14] R. Saito, R. Matsuo, T. Kimura, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. *Chem. Phys. Lett.* **348**, 187 (2001).
- [15] Yu.E. Lozovik, A.V. Minogin, A.M. Popov. *Phys. Lett. A* **313**, 112 (2003).
- [16] Ю.Е. Лозовик, А.В. Миногин, А.М. Попов. *Письма в ЖЭТФ* **77**, 759 (2003).
- [17] Yu.E. Lozovik, A.M. Popov. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures* **12**, 485 (2004).
- [18] A.M. Fennimore, T.D. Yuzvinsky, W.Q. Han, M.S. Fuhrer, J. Cumings, A. Zettl. *Nature* **424**, 408 (2003).
- [19] B. Bourlon, D.C. Glatti, L. Forro, A. Bachfold. *Nano Lett.* **4**, 709 (2004).
- [20] Ю.Е. Лозовик, А.Г. Николаев, А.М. Попов. *ЖЭТФ* **130**, 516 (2006).
- [21] E. Bichoutskaia, A.M. Popov, A.El-Barbary, M.I. Heggie, Yu.E. Lozovik. *Phys. Rev. B* **71**, 113 403 (2005).
- [22] A.V. Belikov, A.G. Nikolaev, Yu.E. Lozovik, A.M. Popov. *Chem. Phys. Lett.* **385**, 72 (2004).
- [23] E. Bichoutskaia, A.M. Popov, M.I. Heggie, Yu.E. Lozovik. *Phys. Rev. B* **73**, 045 435 (2006).

- [24] C.T. White, D.H. Robertson, J.W. Mintmire. *Phys. Rev. B* **47**, 5485 (1993).
- [25] Yu.E. Lozovik, A.G. Nikolaev, A.M. Popov. *Int. J. of Nanotechnology* **2**, 255 (2005).
- [26] Ю.Е. Лозовик, А.М. Попов, А.В. Беликов. *ФТТ* **45**, 1333 (2003).
- [27] L.X. Benedict, N.G. Chopra, M.L. Cohen, A. Zettl, S.G. Lourie, V.H. Crespi. *Chem. Phys. Lett.* **286**, 490 (1998).
- [28] T. Vukovic, M. Damnjanovic, I. Milosevic. *Physica E* **16**, 269 (2003).
- [29] J.C. Charlier, J.P. Michenaud. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1858 (1993).
- [30] A.H.R. Palser. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **1**, 4459 (1999).
- [31] A.N. Kolmogorov, V.H. Crespi. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4727 (2000).
- [32] J.P. Lu, X.P. Li, R.M. Martin. *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1551 (1992).
- [33] M. Damnjanovic, E. Dobardzic, I. Milosevic, T. Vucovic, B. Nolic. *New. J. Phys.* **5**, 148.1 (2003).
- [34] Yu.E. Lozovik, A.M. Popov. *Chem. Phys. Lett.* **328**, 355 (2000).
- [35] Ю.Е. Лозовик, А.М. Попов. *ФТТ* **44**, 180 (2002).
- [36] A. Burián, J.C. Dore, H.E. Fisher, J. Sloan. *Phys. Rev. B* **59**, 1665 (1999).
- [37] M. Damnjanovic, T. Vukovic, I. Milosevic. *Eur. Phys. J. B* **25**, 131 (2002).
- [38] N. Park, Y. Miyamoto, K. Lee, W.I. Choi, J. Ihm, J. Yu, S. Han. *Chem. Phys. Lett.* **403**, 135 (2005).
- [39] Y.G. Hwang, Y.H. Lee. *J. of Korean Phys. Soc.* **42**, S267 (2005).
- [40] J.S. Murray, P. Lane, M.C. Concha, P. Politzer. In: *Nano and Giga Challenges in Microelectronics. Book of Abstracts. Cracow, Poland (2004)*. P. 175.
- [41] S.B. Legoas, V.R. Coluci, S.F. Braga, P.Z. Coura, S.O. Dantas, D.S. Galvao. *Nanotechnology* **15**, 184 (2004).
- [42] Y.S. Li, D. Tomanek. *Chem. Phys. Lett.* **221**, 453 (1994).
- [43] Y.K. Kwon, D. Tomanek, S. Iijima. *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1470 (1999).
- [44] J.W. Kang, H.J. Hwang. *J. Appl. Phys.* **96**, 3900 (2004).
- [45] S.C. Tsang, Y.K. Chen, P.J.F. Harris, M.L.H. Green. *Nature* **372**, 159 (1994).
- [46] G.L. Zhang, F. Ambe, E.H. du Marche Van Voorthuysen, L. Niesen. *J. Appl. Phys.* **80**, 579 (1996).
- [47] N. Demoncey, O. Stephan, N. Brun. *Eur. Phys. J. B* **4**, 147 (1998).
- [48] Z. Peralta-Inga, P. Lane, J.S. Murray, S. Boyd, M.E. Grice, C.Y. O’Cunor, P. Politzer. *Nano Lett.* **3**, 21 (2003).
- [49] M.F. Yu, M.J. Dyer, G.D. Skidmore, H.W. Rohrs, X.K. Lu, K.D. Ausman, J.R. Von Ehr, R.S. Ruoff. *Nanotechnology* **10**, 244 (1999).
- [50] Z. Shen, S. Lie, Z. Xue, Z. Gu. *Int. J. Nanosci.* **1**, 575 (2002).
- [51] S.C. Tsang, P.J.F. Harris, M.L.H. Green. *Nature* **362**, 520 (1993).
- [52] P.M. Ajayan, T.W. Ebbesen, T. Ichihashi, S. Iijima, K. Tanigaki, H. Hui. *Nature* **362**, 522 (1993).
- [53] J. Liu, A.G. Rinzier, H. Dai, J.H. Hafner, R.K. Bradley, P.J. Boul, A. Lu, T. Iverson, K. Shelimov, C.B. Huffman, F. Rodriguez-Macias, Y.S. Soon, T.R. Lee, D.T. Colbert, R.E. Smalley. *Science* **280**, 1253 (1998).
- [54] K. El-Hami, K. Mitsushige. *Int. J. Nanosci.* **2**, 125 (2003).
- [55] Z. Liu, L.C. Qin. *Chem. Phys. Lett.* **408**, 75 (2005).