

Классификация двухслойных нанотрубок с соизмеримыми структурами слоев

© Ю.Е. Лозовик, А.М. Попов, А.В. Беликов

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

E-mail: lozovik@isan.troitsk.ru

(Поступила в Редакцию 26 сентября 2002 г.
В окончательной редакции 21 ноября 2002 г.)

Предложена классификация двухслойных нанотрубок с соизмеримыми структурами слоев, основанная на понятии классов эквивалентности как совокупности всех слоев с индексами хиральности вида (kf, kg) , где f и g — индексы хиральности класса, k — индекс диаметра слоя. Все двухслойные нанотрубки с соизмеримыми слоями с индексами хиральности соответственно (k_1f_1, k_1g_1) и (k_2f_2, k_2g_2) , где k_1, k_2 — целые числа, образуют семейство нанотрубок с разными радиусами, но с одинаковыми геометрическими параметрами: расстоянием между слоями, длиной элементарной ячейки нанотрубки, разницей углов хиральности слоев. Рассчитаны геометрические параметры нанотрубок для рода семейств. Исследовано распределение различных типов двухслойных нанотрубок с соизмеримыми структурами слоев по их радиусам. Оценены пороговые значения сил, необходимых для приведения слоев нанотрубки в относительное движение. Кратко обсуждается возможное использование нанотрубок с соизмеримыми структурами слоев в различных наноструктурах.

Работа поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований и программы Министерства науки.

Уникальные электронные и механические свойства углеродных нанотрубок [1,2] открывают широкие возможности для их применения в наноэлектронике и наномеханике. Например, было предложено использовать нанотрубки в устройствах нанометрового размера: диоде [3], транзисторе [4], элементарной ячейке памяти [5], нанопинцете [6,7], а также в качестве иглы атомно-силового микроскопа [8–10]. Приведенные примеры возможного использования нанотрубок основаны на внутренних электронных и механических свойствах однослойных нанотрубок или слоев многослойных нанотрубок. Однако недавно было экспериментально обнаружено, что слабое ван-дер-ваальсовое взаимодействие между слоями позволяет слоям многослойной нанотрубки легко двигаться относительно друг друга, причем это движение может быть как произвольным [11,12], так и контролируемым с помощью манипулятора [13]. Теоретически был рассмотрен ряд наноструктур, использующих относительное движение слоев нанотрубок: наноподшипник [14], нанощестерня [15], нанопружина [13], механический нановыключатель [16], электрический нановыключатель и нанодрель [17].

Таким образом, исследование геометрических соотношений между структурами [18] и характеристик взаимодействия [19–23] двух соседних слоев нанотрубки актуально для развития наномеханики. Отметим, что двухслойные нанотрубки уже получены при синтезе в дуговом разряде [2], а также недавно при нагреве [24] и облучении электронами [25] однослойных нанотрубок с фуллеренами внутри. В настоящее время построена классификация неспиральных двухслойных нанотрубок [18], рассчитаны энергетические барьеры для

относительного движения и вращения слоев нескольких двухслойных нанотрубок [19–23] и относительного вращения оболочек двухоболочечных наночастиц [26,27].

Поскольку слой нанотрубки является одномерным кристаллом [28,29], структуры соседних слоев могут быть как соизмеримыми, так и несоизмеримыми [22]. Как показано далее, пороговое значение силы F , которая должна быть приложена к слою нанотрубки, чтобы привести его в движение относительно соседнего слоя, в случае слоев с соизмеримой структурой на порядки величины больше, чем в случае слоев с несоизмеримой структурой. Кроме того, эта сила F в случае слоев с несоизмеримой структурой определяется длиной слоев. Поэтому нанотрубки со слоями с соизмеримыми и несоизмеримыми структурами могут быть использованы в принципиально различных механических наноструктурах. В связи с этим в данной работе построена классификация и рассчитаны геометрические параметры двухслойных нанотрубок с соизмеримыми структурами слоев. Построенная нами классификация двухслойных нанотрубок является также классификацией пар соседних слоев с соизмеримой структурой в многослойных нанотрубках.

1. Структура и относительное движение слоев двухслойных нанотрубок

Структура слоя нанотрубки определяется парой целых чисел — индексами хиральности (n, m) , — соответствующей координатам вектора решетки графита

Таблица 1. Барьеры и пороговые силы при перемещении слоев нанотрубок относительно друг друга вдоль оси нанотрубок

Нанотрубка	Соизмеримость структур слоев	$\Delta U_m, \text{meV}$	$\Delta U, \text{eV}/\mu\text{m}$	F_m, nN	$F, \text{nN}/\mu\text{m}$
(14,0)@(16,10)	Несоизмеримы	300 [22]		0.8	
(12,12)@(18,6)	”	400 [23]		1.0	
(12,12)@(29,1)	”	400 [23]		1.0	
(12,12)@(24,9)	”	600 [23]		1.6	
(7,7)@(12,12)	Соизмеримы		200 [22]		500
(7,7)@(12,12)	”		1000 [23]		2600
(12,12)@(17,17)	”		500 [23]		1300
(5,5)@(10,10)	”		37 [19]		100

Примечание. ΔU_m — максимальный барьер при движении слоев с несоизмеримыми структурами, ΔU — барьер при движении слоев с соизмеримыми структурами, приходящийся на единицу длины нанотрубки, F_m — пороговое значение силы, необходимое для приведения в движение слоев с несоизмеримыми структурами, F — пороговое значение силы, необходимое для приведения в движение слоев с соизмеримыми структурами (на единицу длины нанотрубки).

$\mathbf{c} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$ (где \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 — единичные векторы плоскости графита). Соответствующий этому вектору отрезок при сворачивании фрагмента плоскости графита в слой нанотрубки становится окружностью (рис. 1) [28,29]. Радиус R слоя описывается формулой

$$R = \frac{|\mathbf{c}|}{2\pi} = \frac{a_0\sqrt{n^2 + mn + m^2}}{2\pi}, \quad (1)$$

где a_0 — длина единичного вектора плоскости графита. Длина элементарной ячейки слоя нанотрубки равна

$$b = \frac{\sqrt{3}a_0\sqrt{n^2 + mn + m^2}}{CGD(2m+n, 2n+m)}, \quad (2)$$

где $CGD(2m+n, 2n+m)$ — наибольший общий делитель чисел $2m+n$ и $2n+m$. Угол хиральности, определяемый как угол между векторами \mathbf{a}_1 и \mathbf{c} , есть

$$\theta = \arccos \frac{2n+m}{\sqrt{n^2 + m^2 + mn}}. \quad (3)$$

Поскольку плоскость графита имеет ось симметрии шестого порядка, только слои, определяемые векторами \mathbf{c} , лежащими внутри угла 60° , т.е. с $m > 0$,

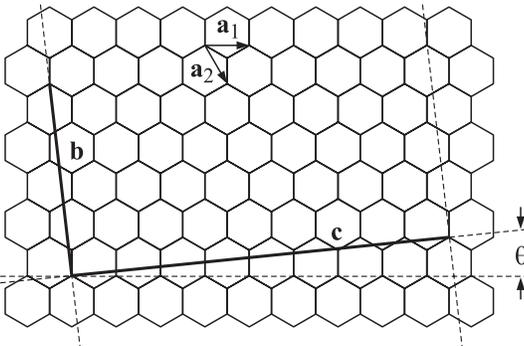


Рис. 1. Плоскость графита, сворачиваемая в слой нанотрубки. \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 — единичные векторы плоскости графита. Слой нанотрубки однозначно определяется вектором \mathbf{c} . b — единичный вектор, а θ — угол хиральности слоя.

$n > 0$, неэквивалентны. Слои с индексами хиральности вида (n, n) и $(n, 0)$ являются неспиральными, а все остальные — спиральными. При этом слои с индексами хиральности (n, m) и (m, n) зеркально-симметричны, т.е. имеют левоспиральную для $n > m$ и правоспиральную для $m > n$ структуру.

Структуры слоев нанотрубки соизмеримы, если отношение длин элементарных ячеек слоев b_1/b_2 является рациональной дробью. В этом случае двухслойная нанотрубка представляет собой одномерный кристалл с длиной элементарной ячейки, равной наименьшему общему кратному длин элементарных ячеек слоев.

Если пренебречь вкладом атомов на краях слоев в энергию взаимодействия слоев, то очевидно, что энергетический барьер ΔU_c для относительного движения слоев с соизмеримыми структурами есть $\Delta U_c = \Delta U_1 N_c$, где ΔU_1 — барьер, приходящийся на одну элементарную ячейку нанотрубки, N_c — число элементарных ячеек в нанотрубке. Другими словами, для достаточно длинной нанотрубки барьер ΔU_c пропорционален ее длине.¹ Следовательно, в случае слоев с соизмеримыми структурами в принципе возможно изготовление нанотрубки с заданной величиной барьера ΔU_c . Величина барьера ΔU_i для относительного движения слоев с несоизмеримыми структурами не растет с увеличением длины нанотрубки, а флуктуирует вблизи среднего значения аналогично сумме членов ряда $\cos j$ [22,23]. Величины барьеров для относительного движения вдоль оси нанотрубки слоев с соизмеримыми и несоизмеримыми структурами (см. [19,22,23]) представлены в табл. 1. Как следует из вышеприведенных аргументов и табл. 1, для нанотрубок длиной порядка $10\mu\text{m}$ барьер для относительного движения вдоль оси нанотрубки для слоев с соизмеримыми структурами на три-четыре порядка превышает барьер для такого же движения слоев с несоизмеримыми структурами. Среднее значение пороговой силы, которое вызывает

¹ Отметим, что недавно были получены нанотрубки длиной от 200nm (при синтезе напылением углерода на подложку [30]) до $30\mu\text{m}$ (при термическом разложении ацетилена на катализаторе [31]).

относительное движение слоев вдоль оси нанотрубки можно оценить как $F \approx 2\Delta U/l$, где ΔU — барьер для относительного движения слоев, l — смещение слоев нанотрубки между их относительными положениями, соответствующими минимумам энергии взаимодействия слоев. Поскольку на каждый атом оболочки приходится не более одного эквивалентного минимума, смещение l не может быть меньше чем $a_0/2$ [23]. Это значение смещения l мы использовали для оценок пороговых сил, которые вызывают относительное движение вдоль оси нанотрубки слоев с соизмеримыми и несоизмеримыми структурами. Результаты таких оценок представлены в табл. 1. Итак, для нанотрубок длиной порядка $10 \mu\text{m}$ пороговые силы, необходимые для относительного движения вдоль оси нанотрубки слоев с соизмеримой структурой, на три-четыре порядка превышают силы, необходимые для такого же движения слоев с несоизмеримой структурой в нанотрубке с такой же длиной. Исследования относительного движения слоев нанотрубки с помощью атомно-силового микроскопа обнаруживают два типа такого движения, для которых силы, необходимые для приведения в относительное движение слоев нанотрубки, отличаются на порядки величины [12]. В первом случае величина этих сил была порядка $100 \text{ nN}/\mu\text{m}$, что соответствует нашим оценкам для относительного движения слоев с соизмеримыми структурами (табл. 1). Во втором случае силы, необходимые для приведения в движение слоев, были меньше силовой чувствительности микроскопа. Можно предположить, что эти два случая отвечают относительному движению соответственно слоев с соизмеримыми и несоизмеримыми структурами. Таким образом, диапазон сил, необходимых для приведения в относительное движение слоев с соизмеримыми структурами, доступнее для точного управления таким движением в механических наноустройствах, например, с помощью манипулятора [13].

Более того, согласно расчетам зависимости барьера для относительного движения слоев с несоизмеримыми структурами от длины нанотрубки [22,23], изменение длины одного из слоев нанотрубки всего на 1 nm может привести к изменению величины барьера ΔU_i на порядок. В этом случае изготовление нанотрубок с заданной величиной барьера ΔU_i , а следовательно, и силы, управляющей относительным движением слоев, представляется затруднительным.

Итак, мы полагаем, что относительное движение слоев с соизмеримыми и несоизмеримыми структурами может быть использовано в принципиально различных механических наноустройствах. Быстрое относительное движение слоев с несоизмеримыми структурами под действием сил, значительно превышающих пороговые, может быть использовано в таких наноустройствах, для которых важной характеристикой их работы является скорость относительного движения слоев нанотрубки. Такими наноустройствами могут быть, например, наноподшипник [14], наносестерня [15], нанопружина [13],

нанодрель [17]. Медленное относительное движение слоев с соизмеримыми структурами под действием сил порядка пороговых может применяться в таких наноустройствах, для которых важной характеристикой их работы является точность определения относительного положения слоев нанотрубки. Такими наноустройствами могут быть, например, механический [16] и электрический [17] нановыключатели.

2. Классификация и геометрические параметры нанотрубок с двумя слоями с соизмеримыми структурами

Как следует из формулы (2), все слои нанотрубки с индексами хиральности вида (kf, kg) , где k — натуральное число, имеют одинаковые длины элементарных ячеек

$$b = \frac{\sqrt{3}a_0\sqrt{f^2 + fg + g^2}}{CGD(2f + g, f + 2g)} \quad (4)$$

и, следовательно, соизмеримые структуры. Такие слои имеют также одинаковые углы хиральности. В данной работе мы предлагаем называть такую совокупность слоев, для которой f и g — взаимно простые числа, классом эквивалентности, пару чисел (f, g) — индексами хиральности класса, а k — индексом диаметра слоя. Классы эквивалентности (f, g) и (g, f) будем считать различными, так как соответствующие им зеркально-симметричные слои с индексами хиральности (n, m) и (m, n) в общем случае должны иметь разные барьеры для достижения относительно соседних слоев. Для слоев нанотрубок (k_1f, k_1g) и (k_2f, k_2g) , $k_2 > k_1$, из одного класса эквивалентности расстояние между ними

$$\Delta R = \frac{a_0\Delta k}{2\pi} \sqrt{f^2 + fg + g^2} \quad (5)$$

зависит только от разности индексов диаметров слоев $\Delta k = k_2 - k_1$. Таким образом, каждому классу эквивалентности соответствуют семейства двухслойных нанотрубок с одинаковым расстоянием между слоями, определяемым величиной Δk . В том случае, когда слои нанотрубки образуются одновременно [32], расстояние между ними соответствует минимально возможной энергии взаимодействия слоев [33]. Согласно расчетам, эта энергия близка к минимально возможной для нанотрубок с расстоянием между слоями ΔR от 3.3 до 3.5 \AA . В том случае, когда внутренний слой образуется после внешнего (например, при облучении электронами нанотрубки с фуллеренами внутри), ΔR может достигать 3.7 \AA [25]. Условие $\Delta R \leq 3.7 \text{ \AA}$ приводит к тому, что слои из одного класса эквивалентности могут быть соседними слоями нанотрубки только в случае

$$f^2 + fg + g^2 \leq \frac{(3.7 \cdot 2\pi\Delta k)^2}{a_0^2} < 91. \quad (6)$$

Таблица 2. Семейства двухслойных нанотрубок с левоспиральными слоями из одного класса эквивалентности и расстоянием между слоями $\Delta R < 3.7 \text{ \AA}$

(f, g)	Δk	$\Delta R, \text{ \AA}$	$b, \text{ \AA}$	$\theta, \text{ deg}$
(1,0)	9	$3.50 \in I$	4.23	0.00
(1,1)	5	$3.37 \in I$	2.44	-30.00
(3,2)	2	$3.39 \in I$	18.44	-23.41
(4,1)	2	$3.56 \in I$	6.46	-10.89
(7,3)	1	$3.45 \in I$	37.60	-17.00
(8,1)	1	$3.32 \in I$	36.14	-5.82
(2,1)	4	3.09	11.19	-19.11
(3,1)	3	2.80	15.25	-13.90
(4,3)	1	2.36	25.73	-25.28
(5,1)	1	2.17	23.55	-8.95
(5,2)	1	2.43	8.81	-16.10
(5,3)	1	2.72	29.61	-21.79
(5,4)	1	3.04	33.04	-26.33
(6,1)	1	2.55	27.74	-7.59
(7,1)	1	2.93	10.65	-6.59
(7,2)	1	3.18	34.62	-12.22

Примечание. f, g — индексы хиральности класса, ΔR — расстояние между слоями, $\Delta k = k_2 - k_1$ — разность индексов диаметров слоев, соответствующая этому расстоянию, b и θ — длина элементарной ячейки и угол хиральности слоев соответственно. В верхней части таблицы помещены нанотрубки, для которых $\Delta R \in I \equiv [3.3; 3.7] \text{ \AA}$.

Длина связи $a_0/\sqrt{3}$ (расстояние между соседними атомами углерода в слое) взята равной 1.41 \AA , что находится в соответствии как с расчетами [34], так и с экспериментом [33]. Условию (6) удовлетворяют только классы эквивалентности с небольшими индексами хиральности (f, g) . Все такие классы эквивалентности и соответствующие им геометрические параметры двухслойных нанотрубок из левоспиральных слоев одного класса приведены в табл. 2. В верхней части этой таблицы помещены все классы эквивалентности, для которых расстояние ΔR между слоями из одного класса может принадлежать экспериментально наблюдаемому промежутку $I \equiv [3.3; 3.7] \text{ \AA}$. Удивительно, что таких классов эквивалентности всего шесть. Отметим, что двухслойные нанотрубки из слоев, принадлежащих классам эквивалентности (f, g) и (g, f) , являются зеркально-симметричными и, следовательно, имеют одинаковые геометрические параметры.

Рассмотрим теперь нанотрубку, слои которой принадлежат разным классам эквивалентности. Расстояние между слоями такой нанотрубки $(k_1 f_1, k_1 g_1)@(k_2 f_2, k_2 g_2)$ определяется формулой

$$\Delta R = \frac{a_0}{2\pi} \sqrt{f_2^2 + f_2 g_2 + g_2^2} \times \left(k_2 - k_1 \frac{b_1 \text{CGD}(2f_1 + g_1, f_1 + 2g_1)}{b_2 \text{CGD}(2f_2 + g_2, f_2 + 2g_2)} \right). \quad (7)$$

В случае слоев с соизмеримыми структурами, принадлежащих разным классам эквивалентности, т.е. в случае,

когда $b_1/b_2 = p/q$ (где p и q — взаимно простые целые числа, соответствующие отношению длин элементарных ячеек), паре классов эквивалентности отвечают семейства двухслойных нанотрубок с одинаковым расстоянием между слоями. Можно показать, что для слоев с соизмеряемыми структурами всегда

$$\frac{\text{CGD}(2f_1 + g_1, f_1 + 2g_1)}{\text{CGD}(2f_2 + g_2, f_2 + 2g_2)} = 1. \quad (8)$$

Тогда индексы диаметров слоев каждого такого семейства равны

$$k_1^{(i)} = k_1^{(0)} + lq, \quad k_2^{(i)} = k_2^{(0)} + lp, \quad (9)$$

где $k_1^{(0)}$ и $k_2^{(0)}$ — индексы диаметров слоев любой из нанотрубок семейства, l — целое число. Каждой паре классов эквивалентности соответствует только одно семейство с заданным расстоянием ΔR между слоями. При этом положительным индексам диаметров слоев $k_1^{(i)}$ и $k_2^{(i)}$ отвечают нанотрубки $(k_1^{(i)} f_1, k_1^{(i)} g_1)@(k_2^{(i)} f_2, k_2^{(i)} g_2)$, а отрицательным индексам — нанотрубки $(-k_2^{(i)} f_2, -k_2^{(i)} g_2)@(-k_1^{(i)} f_1, -k_1^{(i)} g_1)$, в которых классы эквивалентности, соответствующие внутреннему и внешнему слоям, поменялись местами.

Экспериментально получены многостенные нанотрубки с внешним диаметром до 30 nm [2]. Пары слоев с соизмеримыми структурами из разных классов эквивалентности, входящие в многочисленную нанотрубку с внешним диаметром до 30 nm , могут принадлежать к одному из нескольких сот различных семейств. Число этих семейств достаточно велико для того, чтобы приводить их все в данной работе. В табл. 3 представлены геометрические параметры нанотрубок со слоями с соизмеримыми структурами для ряда семейств. Для всех нанотрубок семейства одинаковы следующие геометрические параметры: расстояние между слоями ΔR , длина элементарной ячейки нанотрубки H и разность углов хиральности слоев $\Delta\theta$.

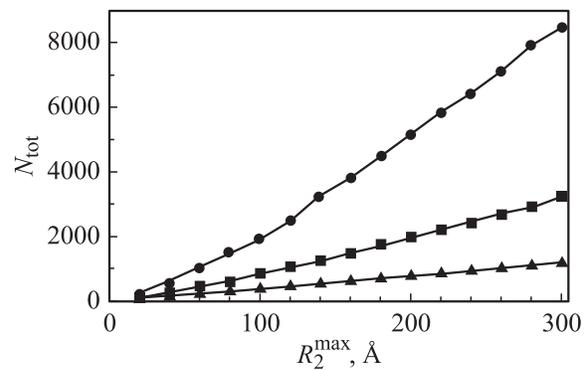


Рис. 2. Полное число N_{tot} (с учетом разницы левоспиральных и правоспиральных слоев) двухслойных нанотрубок различных типов со слоями с соизмеримыми структурами с радиусом внешнего слоя, меньшим R_2^{max} , как функция R_2^{max} .

Таблица 3. Семейства двухслойных нанотрубок с левоспиральными слоями, принадлежащими разным классам эквивалентности, и расстоянием между слоями $\Delta R \in I = [3.3; 3.7] \text{ \AA}$

(f_1, g_1)	(f_2, g_2)	$k_1^{(0)}$	$k_2^{(0)}$	p	q	$\Delta R, \text{ \AA}$	$R_2^{\min}, \text{ \AA}$	$H, \text{ \AA}$	$\Delta\theta, \text{ deg}$
(1,0)	(5,3)	5	2	1	7	3.50	5.44	29.61	21.79
(1,0)	(8,7)	4	1	1	13	3.50	5.05	54.99	27.80
(8,7)	(5,3)	2	5	13	7	3.50	13.60	384.93	6.01
(1,1)	(11,2)	2	1	1	7	3.37	4.71	17.10	21.79
(1,0)	(16,5)	10	1	1	19	3.50	7.39	80.37	13.17
(16,5)	(5,3)	1	4	19	7	3.50	10.88	562.59	8.61
(16,5)	(8,7)	5	8	19	13	3.50	40.42	1044.81	14.62
(4,1)	(20,17)	5	1	1	7	3.56	12.47	45.23	16.43
(1,1)	(22,1)	8	1	1	13	3.37	8.75	31.75	27.80
(11,2)	(22,1)	3	2	7	13	3.37	17.50	222.24	6.01
(1,0)	(24,11)	22	1	1	31	3.50	12.05	131.13	17.90
(5,3)	(24,11)	12	3	7	31	3.50	36.15	917.91	13.89
(24,11)	(8,7)	6	15	31	13	3.50	75.79	1704.69	9.90
(3,2)	(25,9)	5	1	1	7	3.39	11.86	129.07	8.61
(1,1)	(26,11)	14	1	1	19	3.37	12.79	46.40	13.17
(11,2)	(26,11)	2	1	7	19	3.37	12.79	324.81	8.61
(3,2)	(30,1)	5	1	1	7	3.39	11.86	129.07	21.79
(1,0)	(33,7)	28	1	1	37	3.50	14.38	156.51	9.43
(5,3)	(33,7)	4	1	7	37	3.50	14.38	1095.57	12.36
(1,0)	(35,13)	34	1	1	43	3.50	16.71	181.89	15.18
(5,3)	(35,13)	11	2	7	43	3.50	33.43	1273.23	6.61
(8,1)	(37,32)	6	1	1	7	3.32	23.25	252.99	21.79
(1,0)	(39,16)	40	1	1	49	3.50	19.05	207.27	16.43
(4,1)	(43,25)	11	1	1	13	3.56	23.16	84.00	10.42
(7,3)	(45,26)	6	1	1	7	3.45	24.18	263.18	4.22
(1,0)	(45,32)	58	1	1	67	3.50	26.04	283.41	24.43
(1,1)	(46,13)	26	1	1	31	3.37	20.87	75.71	17.90
(46,13)	(11,2)	3	14	31	7	3.37	65.98	529.96	3.89
(4,1)	(47,20)	11	1	1	13	3.56	23.16	84.00	6.01
(1,1)	(47,26)	32	1	1	37	3.37	24.91	90.36	9.43
(8,1)	(48,19)	6	1	1	7	3.32	23.25	252.99	10.15

Примечание. (f_1, g_1) и (f_2, g_2) — индексы хиральности классов эквивалентности, соответствующие внутреннему и внешнему слоям, $k_1^{(0)}$ и $k_2^{(0)}$ — индексы диаметров внутреннего и внешнего слоев для нанотрубки с наименьшим радиусом внешнего слоя R_2^{\min} из семейства с заданными (f_1, g_1) и (f_2, g_2) , p и q — числа, соответствующие отношению длин элементарных ячеек слоев, H — длина элементарной ячейки нанотрубки, $\Delta\theta$ — разность углов хиральности слоев. В таблицу включены семейства, для которых индексы хиральности классов эквивалентности $f_1, f_2 < 50$ и радиус внешнего слоя хотя бы одной из нанотрубок семейства $R_2 < 100 \text{ \AA}$.

Итак, мы построили полную классификацию двухслойных углеродных нанотрубок со слоями с соизмеримыми структурами. Слои нанотрубки могут быть как спиральными, так и неспиральными. Поэтому двухслойные нанотрубки можно отнести к трем типам сочетаний слоев: оба слоя неспиральные; неспиральный и спиральный слой; оба слоя спиральные. На рис. 2 представлена зависимость полного числа N_{tot} (с учетом разницы левоспиральных и правоспиральных слоев) двухслойных нанотрубок различных типов со слоями соизмеримыми структурами с радиусом внешнего слоя, меньшим R_2^{\max} , от R_2^{\max} . На рис. 3 показано распределение чисел N_d

нанотрубок этих типов по радиусам внешнего слоя. Поскольку все нанотрубки с обоими неспиральными слоями принадлежат только к двум семействам $((1,0), (1,0)$ и $(1,1), (1,1))$, полное число нанотрубок этого типа увеличивается линейно с ростом максимального радиуса внешнего слоя. Полное число нанотрубок других типов растет быстрее, так как количество разных семейств, вносящих вклад в это число, увеличивается с ростом максимального радиуса внешнего слоя.

Классификация, предложенная в данной работе, применима не только для углеродных, но также и для любых нанотрубок, слои которых получены сворачиванием двумерного кристалла, имеющего элементарную ячейку, аналогичную элементарной ячейке плоскости графита (ромб с углом 60° между элементарными векторами решетки). При этом наличие у исходного двумерного кристалла оси симметрии порядка n_c приводит к неразличимости слоев, определяемых векторами решетки кристалла, угол между которыми составляет $360^\circ/n_c$, что ведет к уменьшению числа различных классов эквивалентности слоев в n_c раз по сравнению с кристаллом без осей симметрии. Если исходный двумерный кристалл имеет аналогично плоскости графита ось симметрии шестого порядка, например, кристалл с треугольной решеткой, число различных классов эквивалентности слоев, свернутых из таких кристаллов, совпадает с числом различных классов эквивалентности для слоев углеродных нанотрубок. Если исходный двумерный кристалл имеет ось симметрии третьего и второго порядка или не имеет осей симметрии, число различных классов эквивалентности соответственно в 2, 3 и 6 раз больше числа различных классов эквивалентности для слоев углеродных нанотрубок. Интересным примером таких нанотрубок являются нанотрубки из WS_2 [35], слои которых свернуты из двумерного кристалла, имеющего ось симметрии третьего порядка. В этих нанотрубках, как и в углеродных, взаимодействие атомов внутри слоя определяется химическими связями

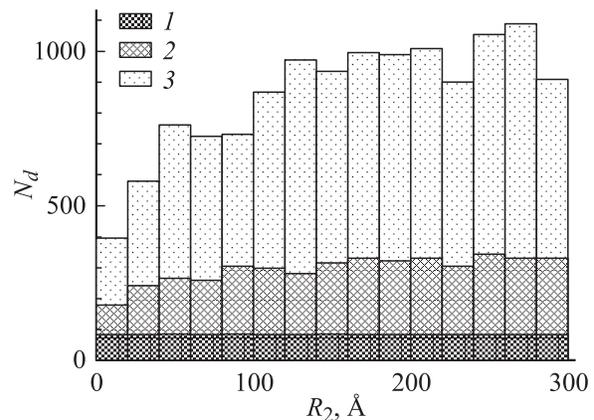


Рис. 3. Распределение числа N_d различных типов двухслойных нанотрубок с соизмеримыми слоями по радиусам внешних слоев R_2 . 1 — нанотрубки с обоими неспиральными слоями, 2 — с одним спиральным и одним неспиральным слоем, 3 — с обоими спиральными слоями.

и является сильным, а взаимодействие атомов соседних слоев слабое ван-дер-ваальсовое. По этой причине можно предположить, что слои в нанотрубках из WS_2 также могут сравнительно легко двигаться относительно друг друга.

Более того, предложенная классификация может быть легко обобщена для любых нанотрубок, слои которых являются одномерными кристаллами. Можно показать, что слой нанотрубки, свернутый из двумерного кристалла с элементарными векторами решетки \mathbf{d}_1 и \mathbf{d}_2 , может быть одномерным кристаллом только в том случае, если α^2 и $\alpha \cos \phi$ — рациональные числа, где $\alpha = |\mathbf{d}_2|/|\mathbf{d}_1|$, ϕ — угол между векторами \mathbf{d}_1 и \mathbf{d}_2 . (Таковыми двумерными кристаллами могут быть, например, кристаллы с квадратной решеткой, а также с прямоугольной решеткой, если отношение между элементарными векторами такой решетки является рациональной дробью). В этом случае аналогично углеродным нанотрубкам слой нанотрубки однозначно определяется вектором $\mathbf{h} = n\mathbf{d}_1 + m\mathbf{d}_2$. При этом слои с индексами хиральности (n, m) и (m, n) имеют одинаковую структуру и разную спиральность. Как и углеродные нанотрубки (см. (4)), все слои нанотрубок с индексами хиральности вида (kf, kg) , где k — натуральное число, принадлежат к одному классу эквивалентности и имеют одинаковые длины элементарных ячеек

$$b = \frac{s_1(f, g)}{s_2(f, g)} d_2 (1 - \cos^2 \varphi) \sqrt{f^2 + 2\alpha f g \cos \varphi + \alpha^2 g^2}, \quad (10)$$

где s_1 и s_2 — натуральные числа.

Большое число возможных двухслойных нанотрубок со слоями с соизмеримыми структурами может привести к трудностям при изучении корреляций между геометрическими параметрами и характеристиками относительного движения этих слоев. Мы полагаем, что предложенная классификация будет полезна для исследования таких корреляций и определения пар слоев, перспективных для применения в наномеханических устройствах. Например, эта классификация может использоваться для поиска пар соседних слоев с максимальными и минимальными барьерами для относительных вращения и движения вдоль оси нанотрубки. Более того, были предсказаны двухслойные нанотрубки с несоизмеримыми слоями, для которых потенциальный рельеф взаимодействия слоев аналогичен резьбе пары винт–гайка [21]. Однако, как отмечалось в настоящей работе, нанотрубки со слоями с соизмеримыми и несоизмеримыми структурами могут быть использованы в принципиально различных наноустройствах. Мы полагаем, в частности, что данная классификация может быть применена для поиска пар соседних слоев с соизмеримыми структурами с потенциальным рельефом энергии взаимодействия слоев, аналогичным резьбе.

Список литературы

- [1] S. Iijima. *J. Cryst. Growth* **50**, 675 (1980).
- [2] S. Iijima. *Nature* **345**, 6348, 56 (1991).
- [3] R. Tamura. *Phys. Rev. B* **64**, 20, 204 404(R) (2001).

- [4] S.J. Tans, A.R.M. Verschueren, C. Dekker. *Nature* **393**, 6680, 49 (1998).
- [5] T. Ruedes, P. Kim, E. Joselevich, G.Y. Tseng, C.L. Cheng, C.M. Lieber. *Science* **289**, 5476, 94 (2000).
- [6] P. Kim, C.M. Lieber. *Science* **286**, 5449, 2148 (1999).
- [7] S. Akita, Y. Nakayama, S. Mizooka, Y. Takano, T. Okawa, Y. Miyatake, S. Yamaraka, M. Tsuji, T. Nosaka. *Appl. Phys. Lett.* **79**, 11, 1691 (2001).
- [8] S.S. Wong, E. Joselevich, A.T. Wolley, C.L. Cheng, C.M. Lieber. *Nature* **394**, 6688, 52 (1998).
- [9] J.H. Hafner, C.L. Cheung, C.M. Lieber. *Nature* **398**, 6730, 761 (1999).
- [10] S.P. Jarvis, T. Uchihashi, T. Ishida, H. Tokumoto, Y. Nakayama. *J. Phys. Chem. B* **104**, 26, 6091 (2000).
- [11] M.F. Yu, O. Lourie, M.J. Dyer, K. Moloni, R.S. Ruoff. *Science* **287**, 5453, 637 (2000).
- [12] M.F. Yu, B.I. Yakobson, R.S. Ruoff. *J. Phys. Chem. B* **104**, 37, 8764 (2000).
- [13] J. Cumings, A. Zettl. *Science* **289**, 602 (2000).
- [14] R.E. Tuzun, D.W. Noid, B.G. Sumpter. *Nanotechnology* **6**, 2, 52 (1995).
- [15] D.W. Srivastava. *Nanotechnology* **8**, 4, 186 (1997).
- [16] L. Forro. *Science* **289**, 5479, 560 (2000).
- [17] Yu.E. Lozovik, A.V. Minogin, A.M. Popov. *Microelectronic Engineering*, in press.
- [18] A. Charlier, E. McRae, R. Heyd, M.F. Charlier, D. Moretti. *Carbon* **37**, 11, 1779 (2000).
- [19] J.-C. Charlier, J.P. Michenaud. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 12, 1858 (1993).
- [20] Y.K. Kwon, D. Tomanek. *Phys. Rev. B* **58**, 24, R16 001 (1998).
- [21] R. Saito, R. Matsuo, T. Kimura, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. *Chem. Phys. Lett.* **348**, 3–4, 187 (2001).
- [22] A.N. Kolmogorov, V.H. Crespi. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 22, 4727 (2000).
- [23] M. Damnjanovic, T. Vukovic, I. Milosevic. *Eur. Phys. J. B* **25**, 2, 131 (2002).
- [24] J. Sloan, R.E. Dunin-Borkowski, J.L. Hutchison, K.S. Coleman, V.C. Williams, J.B. Claridge, A.P.E. York, C. Xu, S.R. Bailey, G. Brown, S. Friedrich, M.L.H. Green. *Chem. Phys. Lett.* **316**, 3–4, 191 (2000).
- [25] S. Bandow, M. Takizawa, K. Hirahara, M. Yadasako, S. Iijima. *Chem. Phys. Lett.* **337**, 1–3, 48 (2001).
- [26] M. Yoshida, E. Osawa. *Full. Sci. Tech.* **1**, 1, 54 (1993).
- [27] Ю.Е. Лозовик, А.М. Попов. *ФТТ* **44**, 1, 180 (2002).
- [28] R. Saito, M. Fujita, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. *Appl. Phys. Lett.* **60**, 18, 2204 (1992).
- [29] R.A. Jishi, M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus. *Phys. Rev. B* **47**, 24, 16 671 (1993).
- [30] M. Ge, K. Sattler. *Science* **260**, 5107, 515 (1993).
- [31] X.B. Zhang, X.F. Zhang, D. Bernaerts, G. Van Tendeloo, S. Amelinckx, J. Van Landuyt, V. Ivanov, J.B. Nagy, Ph. Lambin, A.A. Lucus. *Europhys. Lett.* **27**, 2, 141 (1994).
- [32] Ю.Е. Лозовик, А.М. Попов. *УФН* **167**, 7, 751 (1997).
- [33] A. Burian, J.C. Dore, H.E. Fisher, J. Sloan. *Phys. Rev. B* **59**, 3, 1665 (1999).
- [34] O. Gulseren, T. Yildirim, S. Liraci. *Phys. Rev. B* **65**, 15, 153 405 (2002).
- [35] R. Tenne, L. Margulis, M. Genut, G. Hodes. *Nature* **360**, 445, 6403 (1992).