

# Управление движением наноэлектромеханических систем на основе углеродных нанотрубок

© О.В. Ершова, Ю.Е. Лозовик\*, А.М. Попов\*, О.Н. Бубель\*\*,  
Н.А. Поклонский\*\*, Е.Ф. Кисляков\*\*

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

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

\*\* Белорусский государственный университет,  
220030, Минск, Белоруссия

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

(Поступила в Редакцию 24 января 2007 г.)

Предложен новый способ управления движением наноэлектромеханических систем (НЭМС), основанных на углеродных нанотрубках, а именно, в результате химической адсорбции атомов или молекул на открытых концах однослойной нанотрубки она приобретает электрический дипольный момент. Этот диполь может быть приведен в движение с помощью неоднородного электрического поля. Впервые рассчитаны электрические дипольные моменты химически модифицированных нанотрубок. Возможность предложенного способа управления движением НЭМС на основе нанотрубок показана на примере гигагерцевого осциллятора. Рассчитаны рабочие характеристики такого осциллятора и управляющего поля.

Работа выполнена в рамках совместной программы БРФФИ–РФФИ (грант БРФФИ Ф06Р-075 и грант РФФИ 06-02-81036-Бел-а), а также поддержана грантом РФФИ № 05-02-17864.

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] и 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], нанопереключитель [9], гигагерцевый осциллятор [10,11], бронуновский наномотор [12], нанореле [13], пара наноболт–наногайка [14–17], а также наноактуатор, предназначенный для преобразования силы, направленной вдоль оси нанотрубки, в относительное вращение слоев [18]. Более того, экспериментально реализованы наномоторы, в которых в качестве вала и втулки использованы слои многослойной углеродной нанотрубки [19,20].

В этой связи актуальной задачей является разработка способов управления относительным движением слоев нанотрубок. Недавно было предложено несколько таких способов.

1) С помощью неоднородного магнитного поля в случае, когда подвижный слой металлический, а остальные слои полупроводниковые [21]. Однако в настоящее время отсутствуют эксперименты, моделирование либо численные оценки, демонстрирующие осуществимость такого способа.

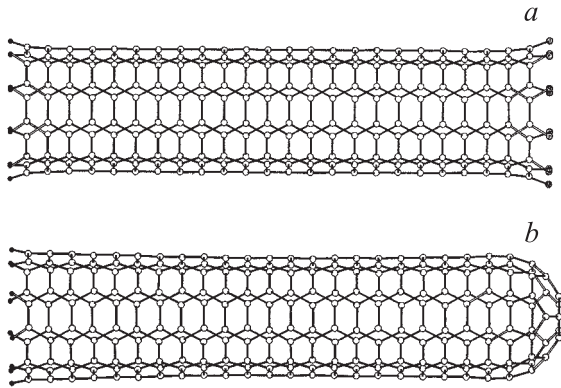
2) С помощью электрического поля в случае, когда во внутреннем пространстве подвижного слоя находятся ионы металла [22]. Предложенная в [22] технология получения таких слоев, основанная на отжиге нанотрубки с металлофуллеренами внутри, позволяет получать только очень короткие слои с неконтролируемой длиной [23].

3) С помощью давления нагреваемого газа, который заключен между подвижным и фиксированным слоями [24]. В этом случае необходимо охлаждение НЭМС после каждого однократного приведения в движение подвижного слоя.

В данной работе мы предлагаем новый способ управления движением слоя нанотрубки, а именно, слой нанотрубки может быть преобразован в диполь с помощью адсорбции доноров и акцепторов электронов на его концах. Управление движением такого слоя возможно с помощью неоднородного электрического поля. Осуществимость предложенного способа управления движением НЭМС на основе нанотрубок показана на примере гигагерцевого осциллятора.

## 2. Расчет дипольных моментов нанотрубки

В данной работе впервые рассчитаны электрические дипольные моменты химически модифицированных однослойных углеродных нанотрубок. Расчеты проводились полуэмпирическим методом молекулярных орбиталей с параметризацией гамильтониана РМ3 [25]. На примере нанотрубки (5,5) рассмотрено два случая хими-



**Рис. 1.** Структура химически модифицированных нанотрубок (5,5). *a* — с двумя открытыми концами, на одном из которых адсорбированы атомы водорода, а на другом — фтора (240 атомов углерода, 10 атомов водорода и 10 атомов фтора); *b* — с одним открытым концом, на котором адсорбированы атомы водорода (250 атомов углерода и 10 атомов водорода).

ческой модификации концов нанотрубок. В первом случае один конец нанотрубки закрыт колпачком, а на всех свободных связях открытого конца адсорбированы доноры электронов. Во втором случае оба конца нанотрубки открыты, причем на всех свободных связях одного конца адсорбированы доноры электронов, а другого — акцепторы электронов. В качестве доноров и акцепторов электронов взяты атомы водорода и фтора соответственно. Атомная и электронная структура рассчитана для однослойных нанотрубок, изображенных на рис. 1, *a* и *b*, которые будем называть далее слой *A* и *B* соответственно. Электрические дипольные моменты слоев *A* и *B* составляют  $7.397 \cdot 10^{-29}$  и  $4.536 \cdot 10^{-29}$  С · м соответственно. Отметим, что дипольный момент больше в случае адсорбции доноров и акцепторов электронов на противоположных концах нанотрубки.

### 3. Управление движением гигагерцевого осциллятора

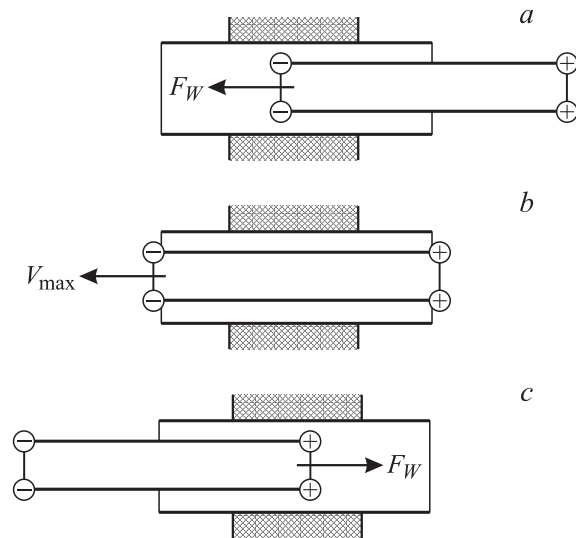
Схема и принцип действия гигагерцевого осциллятора [10,11] показаны на рис. 2. Сила Ван-дер-Ваальса  $F_W$ , которая при телескопическом выдвигении внутреннего слоя втягивает его во внешний, существенно зависит от относительного положения слоев только в случае, когда расстояние между краями слоев порядка межслойного расстояния. Поэтому в стандартной теории гигагерцевого осциллятора зависимость силы  $F_W$  от расстояния  $x$  между центрами слоев можно аппроксимировать следующим выражением [10,11]:

$$F_W(x) = \begin{cases} F_W, & |L - l|/2 < |x| < |L + l|/2, \\ 0, & |x| < |L - l|/2, \\ 0, & |x| > |L + l|/2, \end{cases} \quad (1)$$

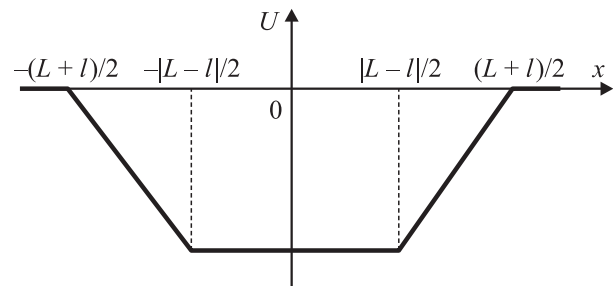
где  $L$  и  $l$  — длины внешнего и внутреннего слоев соответственно. Для такой модели осциллятора зависимость

потенциальной энергии от относительного положения слоев имеет вид, показанный на рис. 3. У систем с таким потенциалом отсутствует собственная частота малых колебаний, а частота колебаний с большой амплитудой (которые предполагаются использовать в НЭМС) сильно зависит от амплитуды. По этой причине для того, чтобы частота колебаний гигагерцевого осциллятора на основе нанотрубки оставалась постоянной, необходимо поддерживать постоянной амплитуду этих колебаний.

Характеристики гигагерцевых осцилляторов были подробно исследованы с помощью моделирования методом молекулярной динамики [21,26–33]. В частности, было показано, что в результате динамического трения происходит диссипация энергии колебаний, свободные колебания осциллятора происходят с увеличивающейся со временем частотой и затухают за время порядка наносекунд [26,27,32]. Диссипация энергии может быть компенсирована работой управляющей внешней силы, приложенной к подвижному слою.



**Рис. 2.** Последовательные (*a–c*) положения слоев гигагерцевого осциллятора в течение половины периода колебаний. *a, c* — максимальное телескопическое выдвигение внутреннего слоя, сила Ван-дер-Ваальса  $F_W$  втягивает внутренний слой во внешний; *b* — внутренний слой проходит по инерции с максимальной скоростью  $V_{\max}$  положение с минимальной потенциальной энергией.



**Рис. 3.** Зависимость потенциальной энергии  $U$  осциллятора от расстояния  $x$  между центрами слоев.

Рассмотрим возможность компенсировать диссипацию энергии в случае, когда движение внутреннего слоя управляется внешней гармонической силой  $F(t) = F_0 \cos \omega t$ , направленной вдоль оси слоя, причем частота  $\omega$  соответствует частоте желаемых колебаний осциллятора. В частности, такая сила может быть приложена к слою-диполю с помощью неоднородного электрического поля. Согласно моделированию, добротность  $Q$  таких осцилляторов может быть порядка 100–1000 [31,32]. Следовательно, сила трения слабо меняет движение системы за один период колебаний. Поэтому будем считать, что в течение одного колебания скорость внутреннего слоя изменяется так же, как и в отсутствие силы трения и управляющей силы  $F$ . Пусть в момент времени  $t = 0$  внутренний слой находится в центре внешнего и движется со скоростью  $V_{\max}$ . Зависимость скорости от времени за один период  $T$  имеет вид

$$V(t) = \begin{cases} V_{\max}, t \in \left[0; \frac{t_{\text{in}}}{2}\right] \cup \left[\frac{3}{2}(t_{\text{in}} + t_{\text{out}}) + \frac{t_{\text{out}}}{2}; T\right], \\ V_{\max} - \frac{F_W}{m} \left(t - \frac{t_{\text{in}}}{2}\right), t \in \left[\frac{t_{\text{in}}}{2}; \frac{t_{\text{in}}}{2} + t_{\text{out}}\right], \\ -V_{\max}, t \in \left[\frac{t_{\text{in}}}{2} + t_{\text{out}}; \frac{3}{2}t_{\text{in}} + t_{\text{out}}\right], \\ -V_{\max} + \frac{F_W}{m} \left(t - \frac{3}{2}t_{\text{in}} - t_{\text{out}}\right), \\ t \in \left[\frac{3}{2}t_{\text{in}} + t_{\text{out}}; \frac{3}{2}t_{\text{in}} + 2t_{\text{out}}\right], \end{cases} \quad (2)$$

где  $m$  — масса внутреннего слоя,  $V_{\max} = \sqrt{2F_W s/m}$  — максимальная скорость внутреннего слоя,  $s$  — максимальное расстояние, на которое внутренний слой выдвигается из внешнего,  $t_{\text{in}} = (L-l)\sqrt{m/2F_W s}$  — время движения внутреннего слоя внутри внешнего от одного его конца до другого,  $t_{\text{out}} = 2\sqrt{2ms/F_W}$  — время движения внутреннего слоя, когда один его конец находится вне внешнего. Период колебаний  $T$  определяется выражением

$$T = 2(t_{\text{in}} + t_{\text{out}}) = 2[(L-l) + 4s]\sqrt{m/2F_W s}. \quad (3)$$

Работа, совершаемая силой  $F$  за период  $T$ , определяется интегралом

$$A_c = \int_0^T V(t)F(t)dt. \quad (4)$$

Подставив (2) в интеграл (4), получим работу управляющей силы за период  $T$

$$A_c = \frac{4F_W F_0}{m\omega^2} \cos\left(\frac{\omega t_{\text{in}}}{2}\right), \quad (5)$$

где  $\omega = 2\pi/T$  — угловая частота колебаний. Сила трения за то же время совершает работу  $A_f = -F_W s/Q$ . Из условия  $A_c + A_f = 0$ , означающего, что работа управляющей силы компенсирует диссипацию энергии, найдем

амплитуду управляющей силы  $F_0$

$$F_0 = \frac{ms\omega^2}{4Q \cos\left(\frac{\omega t_{\text{in}}}{2}\right)}. \quad (6)$$

Подставляя  $A_f = -F_W s/Q$  и выражение (3) в (6), получим

$$F_0 \sim \frac{A_f}{\cos\left(\frac{\pi t_{\text{in}}}{2(t_{\text{in}} + t_{\text{out}})}\right)(t_{\text{in}} + t_{\text{out}})^2}. \quad (7)$$

Для того чтобы определить условия, при которых амплитуда  $F_0$  управляющей силы минимальна, получим выражение для зависимости работы силы трения  $A_f$  от времен  $t_{\text{in}}$  и  $t_{\text{out}}$ . Анализ результатов моделирования затухающих колебаний осциллятора показал, что зависимость силы динамического трения от скорости внутреннего слоя можно аппроксимировать как  $F = -aV - b \cdot \text{sign}(V)V^2$  [33]. В этом случае за один период сила трения совершает работу

$$A_f = -2aV_{\max}^2 \left(\frac{t_{\text{out}}}{3} + t_{\text{in}}\right) - 2bV_{\max}^3 \left(\frac{t_{\text{out}}}{4} + t_{\text{in}}\right). \quad (8)$$

Так как время  $t_{\text{in}}$  пропорционально разнице длин слоев  $\Delta l = L - l$ , минимум функции  $F_0(\Delta l)$  совпадает с минимумом функции  $F_0(t_{\text{in}})$ . Мы подставили (8) в (7), проанализировали полученные выражения и обнаружили, что амплитуда  $F_0$  управляющей силы минимальна для слоев равной длины  $L = l$ .

Формула для частоты колебаний [10] в случае равных длин слоев приобретает вид  $\omega = (\pi/2)\sqrt{F_W/2ms}$ , выражение для работы силы трения (8) можно записать следующим образом:

$$A_f = -\frac{8a\sqrt{2F_W s} \cdot s}{3\sqrt{m}} - \frac{4bF_W s^2}{m}, \quad (9)$$

а выражение (6) для амплитуды управляющей силы

$$F_0 = \frac{\pi^2 F_W}{32Q}. \quad (10)$$

#### 4. Обсуждение результатов

Оценим характеристики электрического поля, необходимого для управления движением слоев-диполей  $A$  и  $B$  в гигагерцевом осцилляторе на основе нанотрубки (5, 5)@(10, 10) с одинаковыми длинами обоих слоев  $L = l = 3.15$  nm. Расстояние между слоями в этой нанотрубке близко к расстоянию между слоями графита 0.34 nm, что является необходимым условием стабильной работы осциллятора [21,28].

Согласно расчетам из первых принципов, энергия взаимодействия слоев в нанотрубке (5, 5)@(10, 10) составляет 23.83 meV на атом внешнего слоя [34], что соответствует силе, втягивающей внутренний слой,  $F_W = 625$  pN. Для такого значения силы  $F_W$  и добротности  $Q = 1000$  амплитуда управляющей силы

$F_0 = 0.193$  pN. Для колебаний с амплитудой  $s = 1$  nm частоты колебаний осциллятора с внутренними слоями  $A$  и  $B$  составляют 388 и 393 GHz соответственно (дальнейшее увеличение амплитуды колебаний вызывает резкое уменьшение добротности из-за качаний оси внутреннего слоя [31,32]).

Сделаем оценки напряжения, необходимого для создания такого неоднородного электрического поля, которое будет управлять движением слоя-диполя, поддерживая стабильную частоту осциллятора. В качестве примера рассмотрим сферический и цилиндрический конденсаторы, на обкладки которых подано напряжение  $U(t) = U_0 \cos \omega t$ . Если расположить ось осциллятора вдоль радиуса конденсатора, то на внутренний слой в сферическом конденсаторе будет действовать сила

$$F_s = \frac{R_1 R_2}{R_2 - R_1} \frac{2d}{r^3} U_0 \cos \omega t, \quad (11)$$

а в цилиндрическом

$$F_c = \frac{1}{\ln(R_2/R_1)} \frac{d}{r^2} U_0 \cos \omega t, \quad (12)$$

где  $R_1$  и  $R_2$  — радиусы внутренней и внешней обкладок конденсаторов соответственно,  $r$  — расстояние внутреннего слоя до центра конденсатора. Мы пренебрегаем изменением  $r$  и принимаем его равным  $(R_1 + R_2)/2$ . Тогда амплитуды напряжения  $U_{0s}$  и  $U_{0c}$  в сферическом и цилиндрическом конденсаторах соответственно определяются следующими выражениями:

$$U_{0s} = \frac{F_0(R_2 - R_1)(R_1 + R_2)^3}{16R_1 R_2 d}, \quad (13)$$

$$U_{0c} = \frac{F_0 \ln(R_2/R_1)(R_1 + R_2)^2}{4d}. \quad (14)$$

Радиусы обкладок мы взяли минимально возможными так, чтобы выполнялись следующие условия: 1) расстояние между обкладками примерно в 2 раза больше, чем необходимо для работы гигагерцевого осциллятора; 2) электрическое поле на длине, равной пути внутреннего слоя, менялось не более чем на 10% (так как при выводе уравнения (6) мы пренебрегаем зависимостью амплитуды управляющей силы от пространственной координаты). Данным условиям соответствуют радиусы обкладок  $R_1 = 100$  nm,  $R_2 = 110$  nm и  $R_1 = 60$  nm,  $R_2 = 70$  nm для сферического и цилиндрического конденсаторов соответственно. Амплитуды напряжения для сферического и цилиндрического конденсаторов составляют соответственно  $U_{0s} = 1.37$  V и  $U_{0c} = 1.70$  V для слоя  $A$  и  $U_{0s} = 2.24$  V и  $U_{0c} = 2.77$  V для слоя  $B$ .

Оценки управляющего напряжения сделаны нами для случая неоднородного электрического поля, создаваемого зарядом, распределенным на поверхности с относительно небольшой кривизной. Использование поля, создаваемого зарядом на поверхности с большей кривизной, в частности поля вблизи острия, позволит управлять движением слоя-диполя, прикладывая существенно

меньшее напряжение. Кроме того, предварительные расчеты показывают, что дипольный момент слоя, на противоположных концах которого адсорбированы доноры и акцепторы, становится больше с увеличением длины слоя. Следовательно, управлять движением более длинных слоев-диполей также можно с помощью меньшего напряжения.

## 5. Заключение

В данной работе разработан новый способ управления движением НЭМС, основанных на углеродных нанотрубках. Этот способ основан на возникновении электрического дипольного момента в результате химической адсорбции доноров и акцепторов на концах углеродных нанотрубок. Предложено управлять движением такой химически модифицированной нанотрубки с помощью неоднородного электрического поля. Впервые рассчитаны электрические дипольные моменты модифицированных нанотрубок. Обнаружено, что дипольный момент больше для случая, когда доноры и акцепторы адсорбированы на противоположных концах нанотрубки. Применение разработанного метода было рассмотрено на примере гигагерцевого осциллятора на основе двуслойной углеродной нанотрубки. Оценки рабочих характеристик такого осциллятора демонстрируют возможность осуществления предложенного способа управления движением НЭМС на основе нанотрубок.

## Список литературы

- [1] M.F. Yu, O. Lourie, M.J. Dyer, K. Moloni, T.F. Kelly, 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. Treacy, 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. 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**, 463 (2004).
- [18] Ю.Е. Лозовик, А.Г. Николаев, А.М. Попов. *ЖЭТФ* **130**, 516 (2006).

- [19] A.M. Fennimore, T.D. Yuzvinsky, W.Q. Han, M.S. Fuhrer, J. Cumings, A. Zettl. *Nature* **424**, 408 (2003).
- [20] B. Bourlon, D.C. Glatti, C. Miko, L. Forro, A. Bachtold. *Nano Lett.* **4**, 709 (2004).
- [21] S.B. Legoas, V.R. Coluci, S.F. Braga, P.Z. Coura, S.O. Dantas, D.S. Galvao. *Nanotechnology* **15**, S 184 (2004).
- [22] J.W. Kang, H.J. Hwang. *J. Appl. Phys.* **96**, 3900 (2004).
- [23] S. Bandow, M. Takizawa, K. Hirahara, M. Yudasaka, S. Iijima. *Chem. Phys. Lett.* **337**, 48 (2001).
- [24] J.W. Kang, K.O. Song, O.K. Kwon, H.J. Hwang. *Nanotechnology* **16**, 2670 (2005).
- [25] J.J.P. Stewart. *J. Comp. Chem.* **10**, 209 (1989).
- [26] J.L. Rivera, C. McCabe, P.T. Cummings. *Nano Lett.* **3**, 1001 (2003).
- [27] J.L. Rivera, C. McCabe, P.T. Cummings. *Nanotechnology* **16**, 186 (2005).
- [28] S.B. Legoas, V.R. Coluci, S.F. Braga, P.Z. Coura, S.O. Dantas, D.S. Galvao. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 055 504 (2003).
- [29] W. Guo, Y. Guo, H. Gao, Q. Zheng, W. Zhong. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 125 501 (2003).
- [30] J. Servantie, P. Gaspard. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 185 503 (2003).
- [31] Y. Zhao, C.-C. Ma, G. Chen, Q. Jiang. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 175 504 (2003).
- [32] C.-C. Ma, Y. Zhao, Y.-C. Yam, G. Chen, Q. Jiang. *Nanotechnology* **16**, 1253 (2005).
- [33] P. Tangney, S.G. Lourie, M.L. Cohen. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 065 503 (2004).
- [34] E. Bichoutskaia, M.I. Heggie, A.M. Popov, Yu.E. Lozovik. *Phys. Rev. B* **73**, 045 435 (2006).