

01;05

Теория квазистатических наномашин

© В.Л. Попов

Падерборнский университет, 33098 Падерборн, ФРГ
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия
E-mail: popov@phys.uni.-paderborn.de

Поступило в Редакцию 13 декабря 2001 г.

Рассмотрено движение систем нескольких тел, соединенных связями изменяющейся длины в пространственно-периодическом потенциале. Показано, что квазистатическими периодическими во времени изменениями параметров системы возможно индуцировать поступательное движение систем в отсутствие направленных внешних сил, а также движение в направлении, противоположном направлению внешней силы. Для возможности индуцированного поступательного движения параметры системы (например, длины связей) должны изменяться в пространстве параметров по замкнутым траекториям, полностью охватывающим одно или несколько замкнутых бифуркационных множеств системы. Найдены бифуркационные множества для нескольких модельных систем. Показано, что рассмотренный механизм индуцирования поступательного движения может быть реализован путем воздействия переменного эллиптически поляризованного электрического поля на частицы размеров порядка нанометра, находящиеся на химически инертной кристаллической поверхности (например, поверхности графита).

Понимание принципов индуцирования направленного движения на атомном уровне важно для разработки методов контролируемого транспорта нанообъектов или макромолекул вдоль инертных кристаллических поверхностей высокого качества (атомарно-гладких или содержащих только небольшое количество дефектов). Примером таких поверхностей могут служить сколы слюды или графита, исследование которых показывает, что в этих материалах возможно создание поверхностей значительной площади, являющихся практически атомарно-гладкими [1]. В [2] мы показали, что тело или группа тел, находящихся в пространственно-периодическом потенциале, могут быть приведены в направленное макроскопическое движение путем периодических во времени воздействий. Вслед за авторами работы [3] мы называем объекты атомарных или нанометровых размеров, приводимые в кон-

тролируемое движение внешними периодическими воздействиями, наномашинами.

В [2] были рассмотрены условия индуцирования направленного движения нанообъектов динамическими воздействиями с частотой, сравнимой с собственной частотой колебаний системы в минимумах периодического потенциала. В данном письме мы покажем, что частота воздействий, при которых возможно макроскопически направленное движение системы, не ограничена снизу. При малых частотах внешних воздействий движение можно рассматривать как квазистатическое. Его анализ сводится при этом к исследованию сингулярных точек и линий в пространстве медленно меняющихся параметров системы (бифуркационных множеств). Предлагаемые принципы исследования, основанные на поиске сингулярных множеств системы, иллюстрируются ниже на примере простейших модельных систем. В конце статьи обсуждается возможность практической реализации индуцированного движения нанообъектов.

В качестве первого примера рассмотрим наномашину, предложенную в [2]. В простейшем варианте она представляет собой систему трех тел, связанных жесткими связями длиной l_1 и l_2 , находящуюся в пространственно-периодическом гармоническом потенциале. Полная потенциальная энергия трех тел в этом случае равна

$$U = U_0(\cos(k(x - l_1)) + \cos(kx) + \cos(k(x + l_2))), \quad (1)$$

где $k = 2\pi/a$, a — пространственный период потенциала. Потенциальная энергия (1) может быть переписана в виде

$$U = U_0 \sqrt{(\sin kl_1 - \sin kl_2)^2 + (1 + \cos kl_1 + \cos kl_2)^2} \cos(kx - \varphi), \quad (2)$$

$$\tan \varphi = \frac{\sin kl_1 - \sin kl_2}{1 + \cos kl_1 + \cos kl_2}. \quad (3)$$

Фаза φ является непрерывной и однозначно определенной функцией параметров l_1 и l_2 вдоль любой траектории на плоскости (l_1, l_2) , не проходящей через сингулярные точки, в которых амплитуда потенциала (2) обращается в нуль, а фаза (3) не определена. Положение этих точек определяется условиями

$$\begin{aligned} \sin kl_1 - \sin kl_2 &= 0, \\ 1 + \cos kl_1 + \cos kl_2 &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

или

$$kl_1 = \pi \pm \frac{\pi}{3} + 2\pi n, \quad kl_2 = \pi \pm \frac{\pi}{3} + 2\pi m, \quad (5)$$

где m и n — целые числа. Положение нескольких особых точек на плоскости (l_1, l_2) изображено на рис. 1. Все точки получаются периодическим продолжением двух ближайших к началу координат особых точек $(kl_1, kl_2) = (\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{3})$ и $(kl_1, kl_2) = (\frac{4\pi}{3}, \frac{4\pi}{3})$. При обходе первой из них по замкнутому контуру в плоскости (l_1, l_2) (рис. 1, пунктирная линия 1) фаза уменьшается на 2π , а при обходе второй точки в том же направлении (сплошная линия 2 на рис. 1) увеличивается на 2π . Припишем первой из них топологический индекс $+1$, а второй -1 . Нетрудно убедиться, что в общем случае при изменении длин связей вдоль произвольного замкнутого контура, не проходящего через особые точки, фаза изменяется на $2\pi I$, где I — сумма индексов всех особых точек, охватываемых контуром (например, контур 3 на рис. 1 охватывает три особые точки с индексами -1 , таким образом фаза при обходе по этому контуру изменяется на -6π). Поскольку изменение фазы на величину, кратную 2π , означает перемещение системы трех

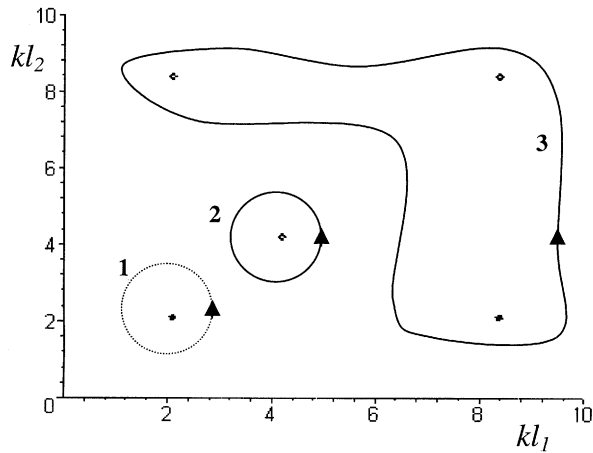


Рис. 1. Особые точки потенциала (1). При изменении длин l_1 и l_2 вдоль замкнутого контура 1 система перемещается на один пространственный период в отрицательном направлении, а при обходе вдоль контура 2 — на один период в положительном направлении.

тел на один пространственный период потенциала, то мы приходим к выводу, что периодическое изменение длин связей l_1 и l_2 , соответствующее движению вдоль любого замкнутого контура, содержащего особые точки с суммой индексов, отличной от нуля, будет приводить к макроскопическому поступательному движению системы, в то время как изменение длин, соответствующее контуру, не содержащему особых точек или содержащему особые точки с суммой индексов, равной нулю, не будет приводить к поступательному движению.

Заметим, что в рассмотренной модели для индуцирования направленного макроскопического движения достаточно обхода любой особой точки по контуру сколь угодно малого радиуса. Это свойство не сохраняется при переходе к моделям с периодическим, но негармоническим потенциалом. В этом смысле модели со строго гармоническим потенциалом являются структурно-неустойчивыми. Рассмотрим в качестве примера потенциал

$$\Phi = U_0 \cos kx + U_1 \cos 2kx, \quad (6)$$

содержащий вторую фурье-компоненту с малой амплитудой U_1 . Потенциальная энергия рассматриваемой нами системы трех тел будет теперь равна

$$U = U_0(\cos(k(x - l_1)) + \cos(kx) + \cos(k(x + l_2))) + U_1(\cos(2k(x - l_1)) + \cos(2kx) + \cos(2k(x + l_2))). \quad (7)$$

Найдем бифуркационное множество этого потенциала, определяемое как множество значений параметров, при которых происходит изменение числа положений равновесия потенциала (и тем самым, вообще говоря, нарушается непрерывная и однозначная зависимость положения равновесия системы от управляющих параметров). Положения равновесия определяются условием

$$\partial U / \partial x = 0. \quad (8)$$

В результате бифуркации происходит слияние устойчивой и неустойчивой точек равновесия, после чего обе они исчезают. В самый момент бифуркации, следовательно, исчезающая стационарная точка представляет собой точку перегиба и в ней

$$\partial^2 U / \partial x^2 = 0. \quad (9)$$

Система уравнений (8), (9) определяет бифуркационное множество системы. В случае потенциала (7) уравнения (8), (9) могут быть приведены к следующему эквивалентному виду:

$$\begin{aligned} & (\sin kl_1 - \sin kl_2) + 2(U_1/U_0) \cos kx (\cos^2 kx + 3 \sin^2 kx) \\ & \times (\sin 2kl_1 - \sin 2kl_2) - 4(U_1/U_0) \sin^3 kx (1 + \cos 2kl_1 + \cos 2kl_2) = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} & (1 + \cos kl_1 + \cos kl_2) + 2(U_1/U_0) \sin kx (\sin^2 kx + 3 \cos^2 kx) \\ & \times (\sin 2kl_1 - \sin 2kl_2) + 4(U_1/U_0) \cos^3 kx (1 + \cos 2kl_1 + \cos 2kl_2) = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Очевидно, что при $U_1 = 0$ бифуркационное множество вырождается в набор (5) изолированных сингулярных точек. При $(U_1/U_0) \ll 1$ бифуркационное множество лежит в окрестности точек (5). Можно поэтому в первом приближении в (10), (11) положить $(\sin 2kl_1 - \sin 2kl_2) \approx 0$, $(1 + \cos 2kl_1 + \cos 2kl_2) \approx -1$ и переписать (10), (11) в виде

$$\begin{aligned} & (\sin kl_1 - \sin kl_2) + 4(U_1/U_0) \sin^3 kx = 0, \\ & (1 + \cos kl_1 + \cos kl_2) - 4(U_1/U_0) \cos^3 kx = 0, \end{aligned}$$

откуда

$$(\sin kl_1 - \sin kl_2)^{2/3} + (1 + \cos kl_1 + \cos kl_2)^{2/3} = (4U_1/U_0)^{2/3}. \quad (12)$$

На рис. 2 представлено бифуркационное множество системы при $U_1/U_0 = 0.2$. При изменении параметров l_1 и l_2 вдоль контура, полностью содержащего одну бифуркационную фигуру (рис. 2), фаза изменяется на $\pm 2\pi$ (\pm в зависимости от направления обхода и того, какая сингулярная область обходится). Периодическое воздействие, соответствующее движению по такому контуру, приведет к поступательному движению системы на один период. Напротив, изменение параметров по контуру, полностью лежащему внутри бифуркационной фигуры (рис. 2, внутренний контур), оставляет фазу неизменной и соответствует колебаниям вблизи положения равновесия.

В качестве второго примера рассмотрим систему двух тел, соединенных связью длиной l , в периодическом потенциале. Мы предполагаем, что рассматриваемая система моделирует электрически поляризованный объект на кристаллической поверхности. Воздействие внешнего

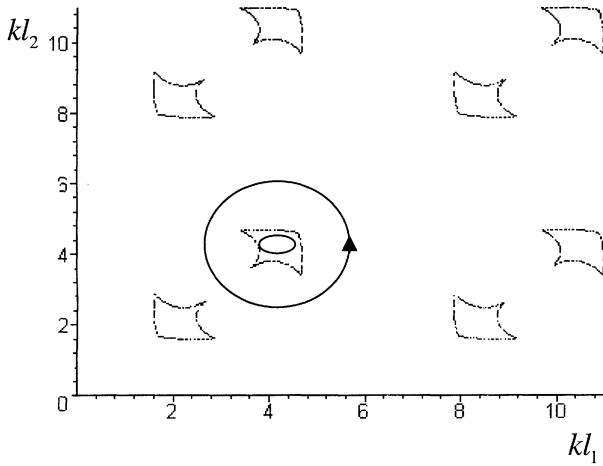


Рис. 2. Бифуркационные контуры потенциальной энергии (7) при $U_1/U_0 = 0.2$. Поступательное движение системы происходит только при изменении параметров вдоль контура, охватывающего замкнутое бифуркационное множество.

электрического поля ведет к изменению длины объекта и изменению сил нормального давления, действующих на первое и второе тело (благодаря наличию компоненты электрического поля, направленной перпендикулярно поверхности „подложки“), причем нормальные силы, действующие на первое и второе тела, противоположно направлены. Это ведет к увеличению амплитуды периодического потенциала для одного из тел и к ее уменьшению для другого. Описанная система может моделироваться потенциальной энергией

$$U = (N_0 + N_1) \cos(k(x - l/2)) + (N_0 - N_1) \cos(k(x + l/2))$$

$$= 2\sqrt{N_0^2 \cos^2 \frac{kl}{2} + N_1^2 \sin^2 \frac{kl}{2}} \cos(kx - \varphi), \quad (13)$$

$$\tan \varphi = \frac{N_1}{N_0} \tan \frac{kl}{2}, \quad (14)$$

где N_0 — среднее значение амплитуды периодического потенциала, а N_1 — его изменение в результате воздействия нормальной к поверхности компоненты электрического поля.

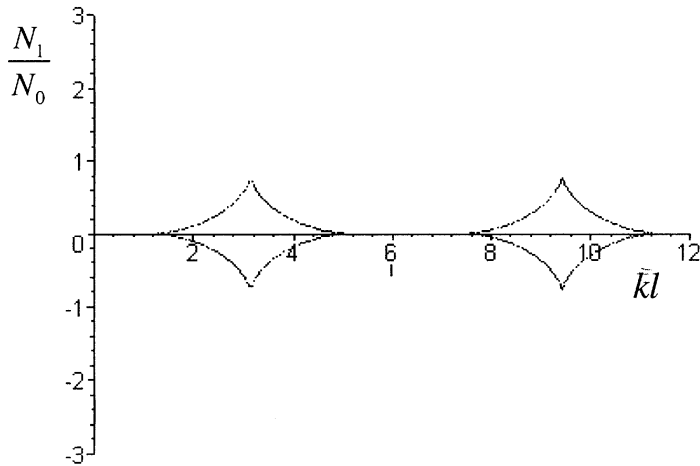


Рис. 3. Бифуркационные контуры двухчастичной машины с негармоническим пространственным периодическим потенциалом (6) при $U_1/U_0 = 0.2$.

Множество сингулярных точек, в которых фаза φ не определена, дается условиями $N_1 = 0$, $\cos(kl/2) = 0$. В плоскости параметров $(N_1/N_0, kl)$ оно состоит из точек $(0, \pi + 2\pi n)$. Изменение фазы на 2π , что соответствует поступательному движению системы на один пространственный период, происходит при обходе любой из этих точек по замкнутому контуру произвольно малого радиуса. Как и в предыдущем примере, это свойство не сохраняется при переходе к негармоническим периодическим потенциалам. Так, например, появление второй фурье-гармоники приводит к преобразованию сингулярных точек в замкнутые бифуркационные линии (рис. 3). Поступательное движение может быть в этом случае индуцировано только изменением параметров вдоль контура, охватывающего бифуркационное множество.

Рассмотренные модели представляют интерес с точки зрения создания методов манипулирования нанообъектами, в том числе и объектами, способными транспортировать „груз“. Важной проблемой является поэтому определение условий, при которых возможно движение объектов в направлении, противоположном действующей на них средней силе. Возможность такого движения подробно обсуждалась в [2]. Для

анализа этой проблемы вернемся опять к рассмотрению наномашины, состоящей из трех тел в строго гармоническом потенциале в присутствии постоянной внешней силы $-F$, моделируемой членом Fx в потенциальной энергии. Полная потенциальная энергия в этом случае имеет вид

$$U = U_0(\cos(k(x - l_1)) + \cos(kx) + \cos(k(x + l_2))) + Fx. \quad (15)$$

Бифуркационное множество системы определяется условиями

$$\begin{aligned} \frac{1}{U_0k} \frac{\partial U}{\partial x} &= -(1 + \cos kl_1 + \cos kl_2) \sin kx \\ &+ (\sin kl_1 - \sin kl_2) \cos kx + \frac{F}{U_0k} = 0, \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{U_0k^2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} &= -(1 + \cos kl_1 + \cos kl_2) \cos kx \\ &- (\sin kl_1 - \sin kl_2) \sin kx = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Умножив уравнение (16) на $\sin kx$, а уравнение (17) на $\cos kx$ и сложив их, найдем:

$$(1 + \cos kl_1 + \cos kl_2) = \frac{F}{U_0k} \sin kx. \quad (18)$$

Умножив уравнение (16) на $\cos kx$, а (17) на $\sin kx$ и вычтя из первого уравнения второе, приходим к уравнению

$$\sin kl_2 - \sin kl_1 = \frac{F}{U_0k} \cos kx. \quad (19)$$

Возведя последние два уравнения в квадрат и сложив их, приходим к уравнению

$$(1 + \cos kl_1 + \cos kl_2)^2 + (\sin kl_1 - \sin kl_2)^2 = \left(\frac{F}{U_0k}\right)^2. \quad (20)$$

На рис. 4 представлены бифуркационные множества, определяемые уравнением (20), при нескольких значениях параметра $f = F/U_0k$. Индуцирование поступательного движения происходит только при изменении параметров l_1 и l_2 вдоль контура, охватывающего бифуркационное

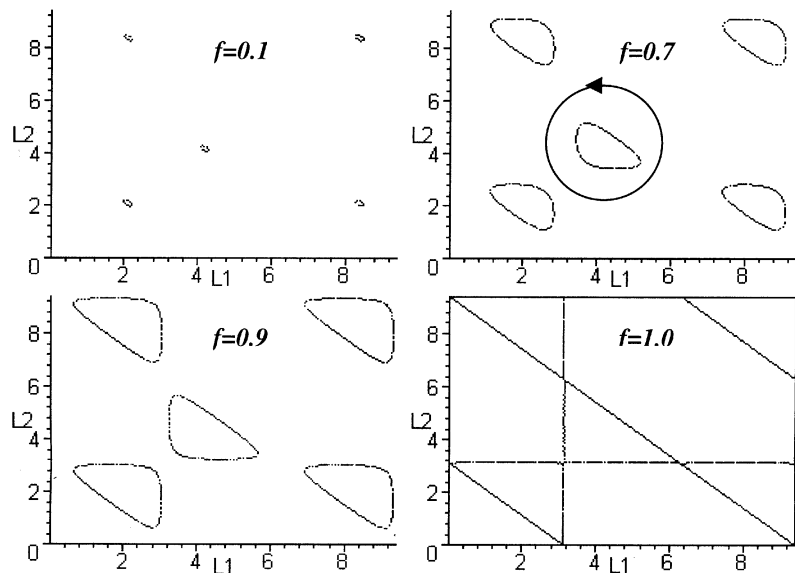


Рис. 4. Бифуркационные множества трехчастичной машины при наличии постоянной внешней силы. Построить контур, полностью охватывающий бифуркационное множество, возможно только при $f < 1$.

множество. Очевидно, что это возможно только при $f < 1$. Таким образом, максимальная сила тяги рассматриваемой машины (которая, однако, практически не достижима) равна $F_{\max} = U_0 k$.

Полностью аналогичное вычисление для машины, состоящей из двух тел с потенциальной энергией $U = (N_0 + N_1) \cos(k(x - l/2)) + (N_0 - N_1) \cos(k(x + l/2)) - Fx$, приводит к бифуркационному множеству (рис. 5), определяемому уравнением

$$\cos^2 \frac{kl}{2} + \left(\frac{N_1}{N_0} \right)^2 \sin^2 \frac{kl}{2} = \left(\frac{F}{2N_0 k} \right)^2. \quad (21)$$

Возможность поступательного движения системы при обходе в плоскости параметров по замкнутому контуру сохраняется при $f = F/2N_0 k < 1$. Для максимальной силы тяги имеем $F_{\max} = 2N_0 k$.

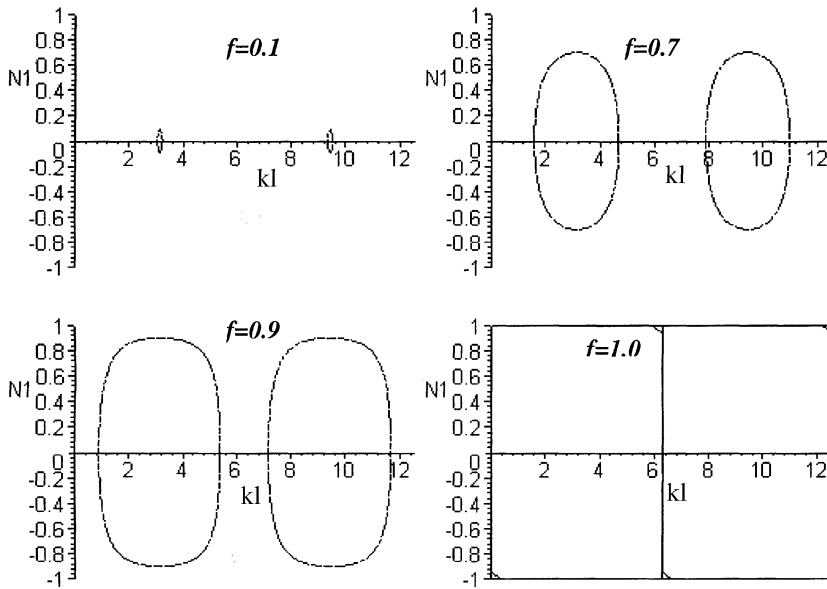


Рис. 5. Бифуркационные множества двухчастичной машины при наличии постоянной внешней силы. Построить контур, полностью охватывающий бифуркационное множество, возможно только при $f < 1$.

Рассмотренные выше системы являются моделями поляризованной частицы (диполя) в переменном электрическом поле. Существенно больший практический интерес представляет, однако, возможность манипулирования нейтральными и неполяризованными частицами. Сформулируем ниже модель наночастицы, обладающей электрострикционными свойствами и находящейся на кристаллической поверхности в переменном периодическом электрическом поле, содержащем как тангенциальную, так и нормальную компоненты. Под действием поля частица изменяет свои размеры. В случае частицы, состоящей из вещества, пространственная группа симметрии которого содержит центр инверсии, изменение линейных размеров частицы является эффектом второго порядка по величине поля. Одновременно происходит поляризация частицы, пропорциональная тангенциальной компоненте электрического поля, а также противоположное по знаку изменение

давления положительно и отрицательно заряженного концов частицы. Рассматриваемая система может быть описана потенциальной энергией (13) с

$$l = l_0 + \beta E^2, \quad N_1 = \alpha E_{\perp} E_{\parallel}, \quad (22)$$

где E_{\perp} и E_{\parallel} есть нормальная и тангенциальная компоненты электрического поля, а $E^2 = E_{\perp}^2 + E_{\parallel}^2$, β — электрострикционная константа, а α — поляризуемость частицы. В случае эллиптически поляризованного переменного поля, меняющегося по закону $E_{\perp} = E_{\perp,0} \cos \omega t$, $E_{\parallel} = E_{\parallel,0} \sin \omega t$, имеем

$$l = l_0 + \frac{\beta}{2}(E_{\perp,0}^2 + E_{\parallel,0}^2) + \frac{\beta}{2}(E_{\perp,0}^2 - E_{\parallel,0}^2) \cos 2\omega t, \quad (23)$$

$$N_1 = \frac{\alpha}{2} E_{\perp,0} E_{\parallel,0} \sin 2\omega t, \quad (24)$$

откуда

$$\left(\frac{l - l_0 - \frac{\beta}{2}(E_{\perp,0}^2 + E_{\parallel,0}^2)}{\frac{\beta}{2}(E_{\perp,0}^2 - E_{\parallel,0}^2)} \right)^2 + \left(\frac{N_1}{\frac{\alpha}{2} E_{\perp,0} E_{\parallel,0}} \right)^2 = 1. \quad (25)$$

Множество значений l и N_1 , удовлетворяющих этому уравнению, образует эллипс с центром в точке $(l, N_1) = (l_0 + \frac{\beta}{2}(E_{\perp,0}^2 + E_{\parallel,0}^2), 0)$. При выборе $l_0 + \frac{\beta}{2}(E_{\perp,0}^2 + E_{\parallel,0}^2) = \pi + 2\pi n$ эллиптический контур (25) охватывает особую точку и при ее обходе система перемещается на один пространственный период потенциала. Отметим, что один период изменения электрического поля соответствует двум обходам по замкнутому контуру (это очевидно из уравнения (23), (24)), так что за один период колебаний электрического поля система перемещается на два пространственных периода потенциала.

Каким образом могут быть практически реализованы рассмотренные выше модели? Покажем, что к модели типа двух тел со связью переменной длины приводит рассмотрение контакта кристаллической частицы с твердой кристаллической поверхностью. Рассмотрим частицу длины L , период кристаллической решетки которой равен $2\pi/k_2$, находящуюся на кристаллической подложке с периодом $2\pi/k_1$ (рис. 6). Обозначим через u текущую координату точек на поверхности частицы, отсчитываемую от центра тяжести частицы, а через x — координату центра тяжести частицы. Предположим, что взаимодействие между частицей и подложкой

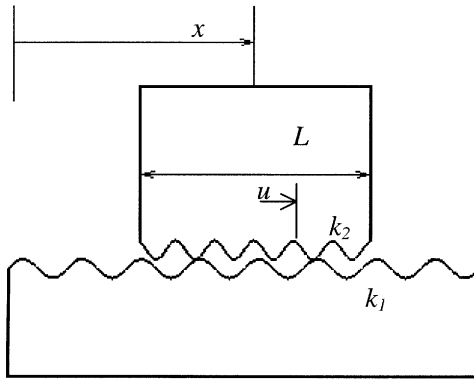


Рис. 6. Схематическое изображение наночастицы с периодом кристаллической решетки $2\pi/k_2$, находящейся на плоской кристаллической поверхности с периодом $2\pi/k_1$.

настолько слабо, что допустимо пренебречь деформацией частицы под действием потенциала взаимодействия. (Оценки показывают, что это условие практически выполнено для частиц нанометровых размеров при условии, что взаимодействие носит вандерваальсовский характер, — например, в случае частиц практически любого вещества на поверхности графита). Для вычисления зависимости потенциальной энергии частицы от координаты ее центра тяжести запишем распределение плотности заряда на поверхности частицы в виде $q = q_0 \cos k_2 u$, а распределение потенциала, создаваемого подложкой, в виде $\varphi = \varphi_0 \cos k_1(x + u)$. Потенциальная энергия взаимодействия частицы с подложкой запишется тогда как

$$U = \int_{-L/2}^{L/2} q_0 \varphi_0 \cos k_2 u \cdot \cos k_1(x + u) du = q_0 \varphi_0 \cos k_1 x \times \left[\frac{\sin \left((k_1 + k_2) \frac{L}{2} \right)}{k_1 + k_2} + \frac{\sin \left((k_1 - k_2) \frac{L}{2} \right)}{k_1 - k_2} \right]. \quad (26)$$

Для того чтобы подчеркнуть аналогию с обсужденными выше моделями, рассмотрим сначала случай близких (но не равных!) периодов

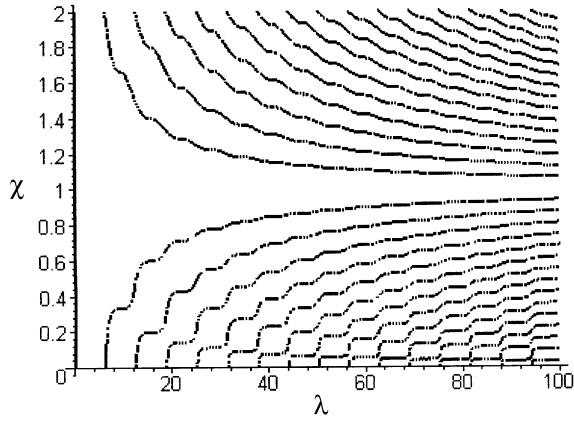


Рис. 7. Решения уравнения (28), определяющие положение сингулярных точек (критической длины) частицы на кристаллической поверхности при различных отношениях κ периодов кристаллических решеток частицы и поверхности.

кристаллических решеток ($k_1 - k_2 \ll k_1 + k_2$). В этом случае первым членом в (26) можно пренебречь по сравнению со вторым и потенциальная энергия частицы приобретает вид

$$U = \frac{q_0 \varphi_0}{k_1 - k_2} \cos k_1 x \sin \left((k_1 - k_2) \frac{L}{2} \right),$$

совпадающий с видом энергии пары частиц в потенциале с волновым вектором k_1 и эффективной длиной связи

$$l_{eff} = \frac{\pi}{k_1} + \left(1 - \frac{k_2}{k_1} \right) L. \quad (27)$$

В общем случае потенциальная энергия (26) не сводится к потенциальной энергии системы двух тел, однако общий случай может быть проанализирован теми же методами, что были использованы выше. Так, сингулярные точки потенциала (26) определяются условием обращения в нуль его амплитуды, т. е.

$$\frac{\sin \left((k_1 + k_2) \frac{L}{2} \right)}{k_1 + k_2} + \frac{\sin \left((k_1 - k_2) \frac{L}{2} \right)}{k_1 - k_2} = 0.$$

Введя обозначения $k_1 L = \lambda$ и $k_2/k_1 = \kappa$, перепишем его в виде

$$\frac{\sin((1 + \kappa)\lambda/2)}{1 + \kappa} + \frac{\sin((1 - \kappa)\lambda/2)}{1 - \kappa} = 0. \quad (28)$$

Решения этого уравнения представлены на рис. 7. Каждому отношению κ периодов кристаллических решеток частицы и подложки отвечает набор дискретных значений длины частицы, при которых амплитуда потенциала обращается в нуль. При обходе этих сингулярных точек в плоскости (L, N_1) по замкнутому контуру частица будет перемещаться на один пространственный период подложки. Как было показано выше, этого можно достичь, используя электрострикционные свойства частицы. Таким образом, совокупность рассмотренных выше моделей демонстрирует возможность направленного движения наночастиц по кристаллической поверхности под действием осциллирующего эллиптически поляризованного электрического поля. При этом направление движения частиц определяется направлением поляризации (и тем самым направлением обхода сингулярных точек в плоскости параметров).

Автор благодарен О.К. Дудко за ценные замечания, М.В. Попову за изготовление действующей модели, способствовавшей лучшему пониманию условий индуцирования направленного движения в периодическом поле, а также Немецкой службе академических обменов (DAAD) за финансовую поддержку.

Список литературы

- [1] *Hölscher H., Schwarz U.D., Zwörner O., Wiesendanger R.* // Phys. Rev. B. 1998. V. 57. N 4. P. 2477–2481.
- [2] *Попов В.Л.* // ЖТФ. 2002 (в печати).
- [3] *Porto M., Urbakh M., Klafter J.* // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 84. N 26. P. 6058–6061.