

# УПРАВЛЕНИЕ ДВИЖЕНИЕМ НАНОЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК С ПОМОЩЬЮ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

*О. В. Ершова<sup>a,\*</sup>, Ю. Е. Лозовик<sup>b</sup>, А. М. Попов<sup>b</sup>, О. Н. Бубель<sup>c</sup>,  
Е. Ф. Кисляков<sup>c</sup>, Н. А. Поклонский<sup>c</sup>, А. А. Книжник<sup>d</sup>, И. В. Лебедева<sup>a,d</sup>*

<sup>a</sup> *Московский физико-технический институт  
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

<sup>b</sup> *Институт спектроскопии Российской академии наук  
142190, Троицк, Московская обл., Россия*

<sup>c</sup> *Белорусский государственный университет  
220030, Минск, Республика Беларусь*

<sup>d</sup> *Российский научный центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 31 марта 2008 г.

Предложен новый метод управления движением наноэлектромеханических систем. Метод основан на химической адсорбции атомов или молекул на открытых концах однослойной углеродной нанотрубки, приводящей к возникновению электрического дипольного момента. С помощью метода молекулярных орбиталей рассчитаны электрические дипольные моменты углеродных нанотрубок с химически модифицированными концами. Такая нанотрубка может быть приведена в движение с помощью неоднородного электрического поля. Осуществимость предложенного метода показана на примере гигагерцевого осциллятора на основе нанотрубки. Проанализированы режимы работы такого осциллятора и проведено моделирование его работы методом молекулярной динамики. Определены параметры управления движением и характеристики системы, соответствующие управляемому режиму с постоянной частотой.

PACS: 73.63.Fg, 85.35.Kt

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Возможность свободного относительного скольжения слоев углеродных нанотрубок [1–3] позволяет применять такие слои в качестве подвижных компонентов актуаторов в наноэлектромеханических системах (НЭМС). В настоящее время изготовлены наномоторы, основанные на относительном вращении слоев нанотрубок [4, 5]. Рассмотрены принципы работы и рассчитаны рабочие характеристики ряда НЭМС, основанных на относительном движении слоев нанотрубок. Этот ряд включает следующие НЭМС: наноподшипники вращения [6], нанощетерни [7], нанопереключателы [8], гигагерцевые ос-

цилляторы [9, 10], броуновские наномоторы [11], нанореле [12, 13], пары наноболт–наногайка [14–17], а также наноактуаторы, предназначенные для преобразования силы, направленной вдоль оси нанотрубки, в относительное вращение слоев [13, 18, 19]. В этой связи актуальными проблемами, решение которых необходимо для реализации таких НЭМС, являются разработка методов управления движением компонентов НЭМС, а также учет нанотрибологических аспектов такого движения.

Недавно было предложено несколько методов управления относительным движением слоев нанотрубки.

1) С помощью магнитного поля, взаимодействующего с проводящим подвижным слоем [20]. Однако

\*E-mail: olga.v.ershova@gmail.com

в настоящее время отсутствуют эксперименты, моделирование, либо численные оценки, демонстрирующие осуществимость такого способа.

2) С помощью электрического поля в случае, когда внутри подвижного слоя заключены ионы [21]. Предложенная в работе [21] технология получения таких слоев, основанная на отжиге нанотрубки с металлофуллеренами внутри, позволяет получать только очень короткие слои с неконтролируемой длиной [22].

3) С помощью давления нагреваемого газа, который заключен между слоями [23]. В этом случае необходимо охлаждение НЭМС после каждого однократного приведения в движение подвижного слоя нанотрубки.

Мы предлагаем новый тип актуатора, основанный на новом методе управления движением слоев нанотрубки. Этот метод основан на использовании электрического дипольного момента, возникающего в результате химической адсорбции доноров и акцепторов на открытых краях слоя. Движением такого слоя-диполя можно управлять с помощью неоднородного электрического поля.

Статья построена следующим образом. В разд. 2 представлены расчеты на основе первых принципов электрических дипольных моментов слоев-диполей. Раздел 3 посвящен анализу условий, при которых осуществим предложенный метод управления движением НЭМС на примере работы гигагерцевого осциллятора на основе углеродной нанотрубки. В разд. 4 возможность предложенного метода управления движением НЭМС продемонстрирована с помощью моделирования методом молекулярной динамики.

## 2. РАСЧЕТ ДИПОЛЬНЫХ МОМЕНТОВ НАНОТРУБОК

Для расчета электрических дипольных моментов химически модифицированной нанотрубки (5,5) использовался полуэмпирический метод молекулярных орбиталей с параметризацией PM3 гамильтониана [24, 25]. Адекватность PM3-параметризации гамильтониана показана на примере расчета длин связей фуллерена  $C_{60}$  с симметрией  $I_h$ : рассчитанные значения длин связей совпадают с экспериментальными с точностью до  $10^{-4}$  нм [26]. Было рассмотрено два случая: адсорбция атомов водорода на одном открытом конце нанотрубки (случай А,  $C_{250}H_{10}$ ) и адсорбция атомов водорода и фтора на противоположных открытых концах нанотруб-

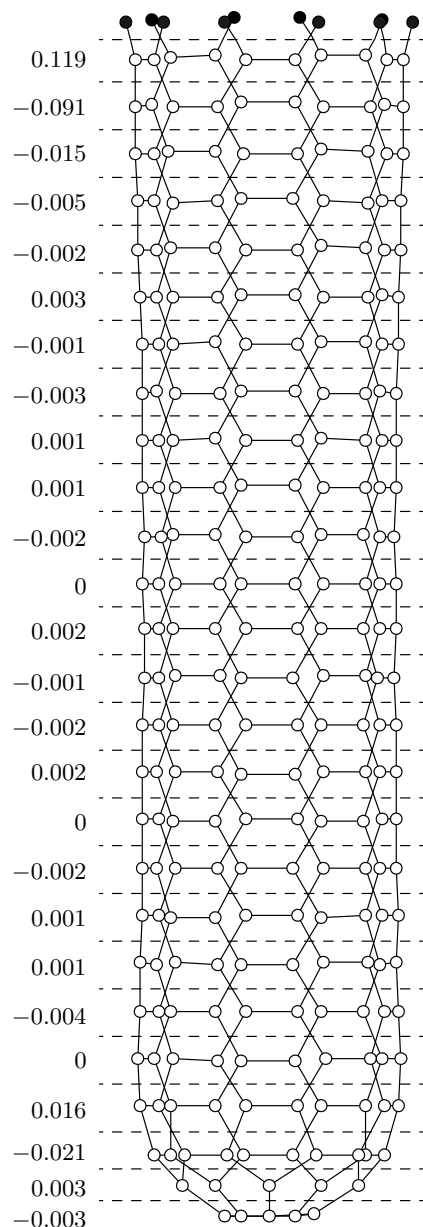
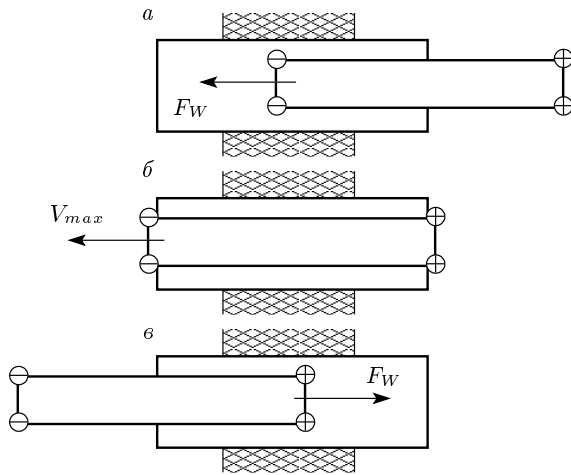


Рис. 1. Структура и распределение зарядов (в единицах заряда электрона) химически модифицированной нанотрубки (5,5) с одним открытым концом, на котором адсорбированы атомы водорода (250 атомов углерода и 10 атомов водорода)

ки (случай В,  $C_{240}H_{10}F_{10}$ ). Были получены следующие значения электрических дипольных моментов:  $d_A = 4.5 \cdot 10^{-29}$  Кл·м и  $d_B = 7.4 \cdot 10^{-29}$  Кл·м для случаев А и В. Полученные в результате расчетов атомная структура и распределение электрического заряда химически модифицированной нанотрубки в случае А показаны на рис. 1.



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

### 3. АНАЛИЗ УПРАВЛЕНИЯ ДВИЖЕНИЕМ НЭМС

Недавно был предложен гигагерцевый осциллятор, основанный на относительном движении слоев нанотрубок, и рассмотрено неуправляемое движение этой НЭМС [9, 10]. Характеристики неуправляемого движения гигагерцевых осцилляторов были подробно исследованы с помощью моделирования методом молекулярной динамики [20, 27–34]. В настоящем разделе мы рассматриваем управление движением с помощью электрического поля для гигагерцевого осциллятора, основанного на двухслойной нанотрубке с внутренним слоем–диполем.

Схема и принцип действия гигагерцевого осциллятора показаны на рис. 2. В таком осцилляторе при телескопическом выдвигании внутреннего слоя сила Ван дер Ваальса  $F_W$  втягивает его обратно во внешний, что приводит к возникновению колебаний системы. Сила  $F_W$  существенно зависит от относительного положения слоев только для расстояний между краями слоев порядка межслойного расстояния, поэтому зависимость  $F_W$  от расстояния  $x$  между центрами слоев можно аппроксимировать выражением [9, 10]

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

где  $L$  и  $l$  — длины соответственно внешнего и внутреннего слоев. Так как потенциал, соответствующий силе (1), является негармоническим, у систем с таким потенциалом отсутствует собственная частота малых колебаний, а частота колебаний с большой амплитудой, которые предполагается использовать в НЭМС, является функцией амплитуды колебаний [9] (под частотой колебаний мы понимаем здесь величину, обратную периоду колебаний). Моделирование методом молекулярной динамики показывает, что добротность осциллятора  $Q = E/\Delta E_T$ , где  $E$  — энергия колебаний, а  $\Delta E_T$  — потеря этой энергии за период  $T$ , имеет порядок  $Q = 100\text{--}1000$  [30, 31] (см. также разд. 4). В результате диссипации энергии колебаний их амплитуда со временем уменьшается, а частота увеличивается [31]. Поэтому, для того чтобы получить стационарный режим работы осциллятора, т. е. с постоянной частотой, необходимо компенсировать диссипацию энергии колебаний работой внешней силы.

Работа  $A$  внешней силы  $F(t)$  в точности компенсирует диссипацию энергии  $E$  за период  $T$ , если выполняется условие

$$A = \frac{E}{Q} = \frac{F_W S}{Q}, \quad (2)$$

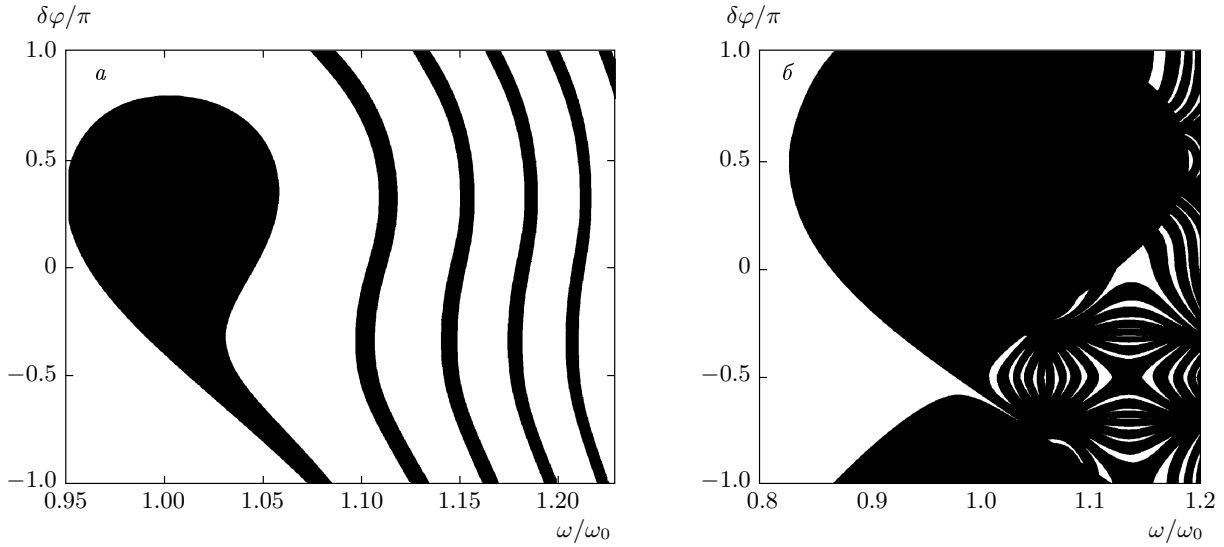
где  $S$  — максимальная длина телескопического выдвигания внутреннего слоя во время одного колебания. Подставляя выражение для работы

$$A = \int_0^T V(t)F(t) dt$$

( $V(t)$  — относительная скорость слоев) в выражение (2), получим, что для гармонической управляющей силы  $F(t) = F_0 \cos \omega t$  ( $\omega$  — желаемая частота колебаний осциллятора), действующей на подвижный слой, в предположении, что  $Q \gg 1$ , критическая амплитуда  $F_0^{cr}$  управляющей силы, при которой происходит точная компенсация диссипации энергии, определяется выражением

$$F_0^{cr} = \frac{mS\omega^2}{4Q \cos(\omega t_{in}/2)}, \quad (3)$$

где  $m$  — масса подвижного слоя,  $t_{in}$  — время, в течение которого внутренний слой находится полностью



**Рис. 3.** Начальные сдвиги фаз  $\delta\phi$  и отношения  $\omega/\omega_0$ , при которых возможен стационарный режим (черные области) для осцилляторов с добротностью  $Q = 100$  (а),  $Q = 1000$  (б) и амплитуд управляющей силы  $F_0 = 2F_0^{cr}$  (а),  $F_0 = 100F_0^{cr}$  (б)

внутри внешнего. Анализ показывает, что критическая амплитуда  $F_0^{cr}$  внешней управляющей силы минимальна в случае, когда длины слоев равны,  $L = l$ . В этом случае выражение (3) принимает вид

$$F_0^{cr} = \frac{\pi^2 F_W}{32Q}, \tag{4}$$

а связь частоты и амплитуды колебаний осциллятора —

$$\omega_{go}(S) = \sqrt{\frac{\pi^2 F_W}{8mS}}.$$

Для исследования рабочих режимов гигагерцевого осциллятора, управляемого гармонической силой, было проанализировано решение уравнения движения внутреннего слоя осциллятора, основанного на двуслойной нанотрубке (5, 5)@(10, 10) с обоими слоями длиной 3.1 нм. Сила Ван дер Ваальса для такой трубки, согласно расчетам методом функционала плотности, составляет  $F_W = 625$  пН [35]. Для силы трения, пропорциональной относительной скорости слоев,  $F_f = -\gamma\dot{x}$ , это уравнение принимает вид

$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + a \operatorname{sign} x = b \cos \omega t, \tag{5}$$

где  $a = F_W/m$ ,  $b = F_0/m$ ,  $\gamma = 3\sqrt{F_W/2Sm}/8Q$ . В нашей модели сила, действующая на подвижный слой, является разрывной, поэтому аналитическое решение уравнения (5) существует только для каждого

отдельного полупериода колебаний. При заданных начальных условиях  $x(t_0) = 0$ ,  $\dot{x}(t_0) = V_0$  оно имеет вид

$$x(t) = C_1 - \frac{C_2}{\gamma} e^{-\gamma t} + \frac{b}{\omega^2 + \gamma^2} \left( \frac{\gamma}{\omega} \sin \omega t - \cos \omega t \right) - \frac{a}{\gamma} t, \tag{6}$$

где  $C_1$  и  $C_2$  — константы, определяемые начальными условиями. Частота  $\omega$  управляющей силы была взята равной частоте колебаний осциллятора  $\omega_{go}$  с амплитудой колебаний  $S = 1$  нм. Начальная скорость  $V_0$  внутреннего слоя также соответствовала амплитуде колебаний  $S = 1$  нм. Начальные условия  $t_1 = t(x = 0)$ ,  $V_1 = V(t_1)$  для сшивки со следующим полупериодом определялись численно.

Проведенный анализ уравнения движения осциллятора показывает, что в случае, когда амплитуда управляющей силы меньше критического значения, определяемого выражением (4), колебания осциллятора затухают. В случае, когда амплитуда управляющей силы больше критического значения, возможность стационарного режима работы определяется начальными условиями включения управляющей силы: начальным сдвигом фаз  $\delta\phi$  между управляющей силой и относительной скоростью слоев, и отношением  $\omega/\omega_0$  частоты управляющей силы к частоте колебаний осциллятора в момент включения управляющей силы. Для различных значений

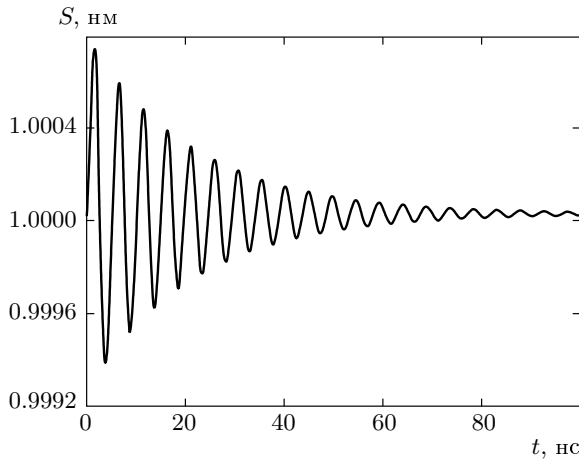


Рис. 4. Зависимость амплитуды колебаний от времени с момента включения управляющей силы с амплитудой  $F_0 = 1.01F_0^{cr}$  для осциллятора с добротностью  $Q = 1000$

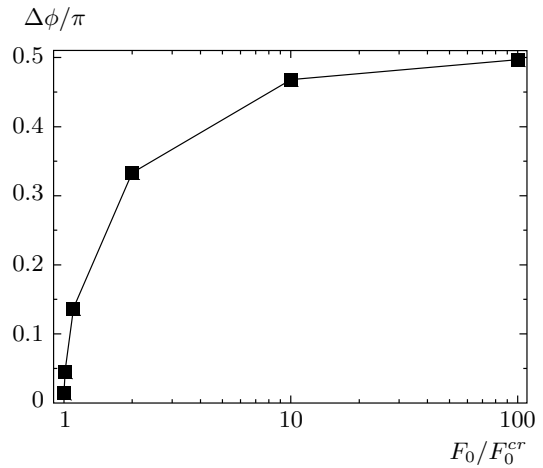


Рис. 5. Стационарный сдвиг фаз  $\Delta\phi$  между управляющей силой и относительной скоростью слоев как функция отношения амплитуды управляющей силы  $F_0$  к критической амплитуде  $F_0^{cr}$

добротности и амплитуды управляющей силы мы определили параметры включения управляющей силы, для которых возможен стационарный режим работы осциллятора (рис. 3). Мы обнаружили, что для больших амплитуд  $F_0 = (10-100)F_0^{cr}$  включение управляющей силы возможно практически для любых значений  $\delta\phi$ , т. е. в произвольный момент времени (см. рис. 3б для  $F_0 = 100F_0^{cr}$ ).

Наше моделирование показывает, что стационарный режим работы осциллятора устанавливается в течение 10–100 нс. Во время установления стационарного режима амплитуда и частота колебаний осциллируют и стремятся к своим стационарным значениям (рис. 4). Частота колебаний осциллятора стремится к частоте управляющей силы. Зависимость частоты колебаний гигагерцевого осциллятора от времени мы аппроксимировали выражением

$$\omega_{go}(t) = \omega + \delta\omega \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \sin\left(\frac{2\pi t}{T_{osc}} + \phi_\omega\right), \quad (7)$$

где  $\tau$  — характерное время установления стационарного режима работы гигагерцевого осциллятора,  $\delta\omega$  — параметр, характеризующий величину осцилляций частоты колебаний,  $T_{osc}$  — период осцилляций частоты и амплитуды колебаний,  $\phi_\omega$  — подгонный параметр. Зависимость амплитуды колебаний осциллятора от времени аппроксимируется аналогичным выражением:

$$S(t) = S_{st} + \delta S \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \sin\left(\frac{2\pi t}{T_{osc}} + \phi_S\right).$$

Временные параметры, характеризующие установление стационарного режима работы для различных значений добротности и амплитуды управляющей силы, представлены в таблице. Отметим, что период  $T_{osc}$  осцилляций частоты и амплитуды колебаний превышает период  $T$  колебаний гигагерцевого осциллятора на порядки величины. Результаты, представленные в таблице, позволяют сделать следующие выводы: 1) увеличение добротности  $Q$  приводит к увеличению характерного времени  $\tau$  установления стационарного режима, увеличению периода  $T_{osc}$  и уменьшению величин осцилляций амплитуды и частоты (соответственно  $\delta S$  и  $\delta\omega$ ); 2) увеличение амплитуды управляющей силы приводит к возрастанию величины и уменьшению периода осцилляций амплитуды и частоты колебаний осциллятора. В стационарном режиме частота и амплитуда колебаний осциллятора, а также сдвиг фаз  $\Delta\phi$  между управляющей силой и относительной скоростью слоев постоянны. На рис. 5 изображена зависимость стационарного сдвига фаз от отношения амплитуды управляющей силы  $F_0$  к критической амплитуде  $F_0^{cr}$ . Эта зависимость практически не меняется при изменении добротности системы. Очевидно, что электрическое поле эффективно компенсирует диссипацию энергии колебаний только для малых значений сдвига фаз  $\Delta\phi$ , т. е. в случае, когда отношение  $F_0/F_0^{cr} \approx 1$  (см. рис. 5). На основе результатов моделирования мы предлагаем следующий способ включения управляющей силы: в начальный момент времени использовать силу с большой амплитудой  $F_0/F_0^{cr} \geq 10$ ,

Временные характеристики установления стационарного режима для различных значений добротности  $Q$  осциллятора и отношения амплитуды управляющей силы  $F_0$  к критической амплитуде  $F_0^{cr}$

$Q$	$F_0/F_0^{cr}$	$\tau$ , нс	$\tau/T$	$\delta\omega$ , ГГц	$T_{osc}$ , нс	$T_{osc}/T$	$S_{st}$ , нм
1000	1.001	$21.5 \pm 0.5$	$1340 \pm 30$	$0.027 \pm 0.004$	$8.7 \pm 0.1$	$544 \pm 6$	1.00002
1000	1.01	$20.8 \pm 0.4$	$1300 \pm 30$	$0.151 \pm 0.002$	$4.86 \pm 0.05$	$304 \pm 3$	1.00004
1000	1.1	$22.0 \pm 0.5$	$1380 \pm 30$	$0.85 \pm 0.02$	$2.70 \pm 0.05$	$169 \pm 3$	1.00012
1000	2	$21.0 \pm 0.5$	$1310 \pm 30$	$4.2 \pm 0.1$	$1.40 \pm 0.05$	$88 \pm 3$	1.00043
1000	10	$20.5 \pm 0.5$	$1280 \pm 30$	$15.1 \pm 0.4$	$0.64 \pm 0.01$	$40.2 \pm 0.6$	1.00249
1000	100	$21.5 \pm 0.5$	$1340 \pm 30$	$49 \pm 11$	$0.206 \pm 0.005$	$12.9 \pm 0.3$	1.02500
100	1.001	$2.20 \pm 0.02$	$138 \pm 1$	$0.0848 \pm 0.0006$	$2.87 \pm 0.01$	$179.3 \pm 0.6$	1.00011
100	1.01	$2.15 \pm 0.02$	$134 \pm 1$	$0.485 \pm 0.003$	$1.55 \pm 0.01$	$96.8 \pm 0.6$	1.00035
100	1.1	$2.11 \pm 0.02$	$132 \pm 1$	$2.69 \pm 0.02$	$0.854 \pm 0.005$	$53.4 \pm 0.3$	1.00114
100	2	$2.07 \pm 0.03$	$129 \pm 2$	$13.0 \pm 0.1$	$0.442 \pm 0.001$	$27.6 \pm 0.1$	1.00432
100	10	$2.25 \pm 0.15$	$141 \pm 9$	$44 \pm 7$	$0.189 \pm 0.005$	$11.8 \pm 0.3$	1.02487
100	100	$2.0 \pm 0.5$	$130 \pm 30$	$190 \pm 60$	$0.065 \pm 0.001$	$4.1 \pm 0.1$	1.24998

*Примечание.*  $\tau$  — характерное время уменьшения осцилляций частоты гигагерцевого осциллятора,  $T$  — период управляющей силы,  $\delta\omega$  — параметр, характеризующий величину осцилляций частоты колебаний,  $T_{osc}$  — период осцилляций частоты колебаний,  $S_{st}$  — стационарная амплитуда колебаний.

которая позволяет получить стационарный режим работы для произвольного начального сдвига фаз  $\delta\phi$ ; после выведения системы на стационарный режим надо постепенно уменьшать амплитуду управляющей силы почти до критической и, следовательно, использовать меньшее управляющее напряжение для поддержания стационарной работы осциллятора.

#### 4. МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРАВЛЕНИЯ ДВИЖЕНИЕМ НЭМС

Работа гигагерцевого осциллятора в управляемом режиме и режиме свободных колебаний исследована с помощью моделирования методом молекулярной динамики. Целью проведенного моделирования является демонстрация осуществимости предложенного метода управления движением НЭМС, а также исследование добротности данной НЭМС.

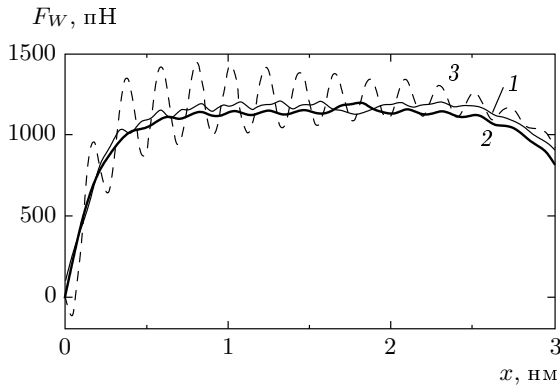
Взаимодействие Ван дер Ваальса между атомами внутреннего и внешнего слоев описывалось с помощью потенциала Ленард-Джонса [12-6,

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

с параметрами из базы данных AMBER [36] для ароматического углерода и водорода, присоединен-

ного к ароматическому углероду:  $\epsilon_{CC} = 3.73$  мэВ,  $\sigma_{CC} = 3.40$  Å и  $\epsilon_{CH} = 0.65$  мэВ,  $\sigma_{CH} = 2.59$  Å для взаимодействий между атомами углерода и между атомами углерода и водорода. Данные параметры позволяют согласованно описывать взаимодействия пар атомов углерод-углерод и углерод-водород. Радиус обрезания потенциала Ленард-Джонса был равен 12 Å. Для описания ковалентных связей между атомами углерода и между атомами углерода и водорода внутри каждого слоя использовался потенциал Бреннера [37].

Зависимость силы Ван дер Ваальса для взаимодействия между слоями от расстояния между центрами масс внутреннего и внешнего слоев, полученная с использованием данных потенциалов, показана на рис. 6. Рассмотрены двуслойные нанотрубки различных типов: с соизмеримыми слоями (5,5)@(10,10) и (9,0)@(18,0) и с несоизмеримыми слоями (5,5)@(18,0). Концы слоев были открыты и не модифицированы химически, длина слоев составляла 3.1 нм. Средние значения силы Ван дер Ваальса для рассмотренных нанотрубок составляют примерно 1200 пН. Энергия  $E_{in}$  взаимодействия слоев пропорциональна площади их перекрытия:  $E_{in} = \alpha\pi DL_{ov}$ , где  $\alpha$  — энергия, приходящаяся на единицу поверхности нанотрубки,  $D$  — диаметр нанотрубки, и  $L_{ov}$  — длина перекрытия слоев.



**Рис. 6.** Зависимость силы Ван дер Ваальса от расстояния между центрами масс слоев для двуслойных нанотрубок длиной 3.1 нм: кривая 1 — (5,5)@(10,10); 2 — (5,5)@(18,0); 3 — (9,0)@(18,18)

Для двуслойных нанотрубок с одинаковыми расстояниями между слоями (около 3.4 Å) энергия  $\alpha$  слабо зависит от диаметра нанотрубки, поэтому сила Ван дер Ваальса примерно пропорциональна диаметру,  $F_W = kD$ . Рассчитанные значения силы  $F_W$  соответствуют значению  $k \approx 0.3$  Н/м. Это в полтора раза больше величины, экспериментально полученной в работе [3]. Такое соответствие можно считать удовлетворительным, учитывая, что в работе [3] измерения проводились для многослойной нанотрубки большого диаметра, а для нанотрубки малого диаметра должна наблюдаться нелинейная зависимость силы взаимодействия слоев от диаметра. Осцилляции силы Ван дер Ваальса при относительном движении слоев вдоль оси двуслойной нанотрубки связаны с изменением относительного расположения структур слоев. Отношение величин амплитуд этих осцилляций для нанотрубок (5,5)@(10,10) и (9,0)@(18,0) имеет порядок 1:10, что совпадает по порядку величины с отношениями барьеров для относительного движения слоев этих нанотрубок, полученными с помощью полуэмпирических расчетов [38] и расчетов методом функционала плотности [35].

Мы провели моделирование работы гигагерцевого осциллятора, основанного на двуслойных нанотрубках (5,5)@(10,10) с обоими слоями длиной 3.1 нм. В качестве внутреннего слоя был использован слой-диполь, соответствующий случаю А химически модифицированной нанотрубки (см. рис. 1). У внешнего слоя оба конца были открыты и не модифицированы химически. Для интегрирования уравнений движения атомов использован алгоритм

Верле в скоростной форме [39] с шагом по времени 0.2 фс, который примерно в 100 раз меньше периода колебаний атомов водорода. В начале моделирования внутренний слой выдвигался из внешнего на 1 нм и отпускался с нулевой начальной скоростью. Внешний слой удерживался во время моделирования неподвижным с помощью фиксации трех атомов углерода, не лежащих на одной прямой. Моделирование свободных колебаний осциллятора проводилось в микроканоническом ансамбле. Среднеквадратичные флуктуации полной энергии системы, вызванные численными ошибками, составляли менее 0.3 % от энергии взаимодействия Ван дер Ваальса между слоями. Изменение температуры за полное время моделирования свободных колебаний, равное 500 пс, составляло менее 9 %. При моделировании управляемых колебаний осциллятора температура внешнего слоя поддерживалась постоянной путем периодического перемасштабирования скоростей атомов через каждые 0.1 пс (термостат Берендсена [40]). Несмотря на то что только внешний слой находился в контакте с термостатом, наши оценки показывают, что в данных условиях температура внутреннего слоя должна быть близка к температуре внешнего слоя. Согласно проведенному моделированию, скорость диссипации энергии свободных колебаний при 300 К составляет  $W \approx 1.1 \cdot 10^{-9}$  Вт. В качестве коэффициента теплопроводности между слоями нанотрубки мы взяли коэффициент теплопроводности графита в направлении, перпендикулярном слоям,  $\chi_{\perp} \approx 5$  Вт/м·К [41]. В стационарных условиях скорость диссипации энергии колебаний должна равняться скорости переноса энергии к внешнему слою, находящемуся в контакте с термостатом. Для разности температур между слоями получаем

$$\Delta T \approx \frac{W}{2\pi L \chi_{\perp}} \ln \left( 1 + \frac{\delta}{r_{in}} \right) \approx 10^{-2} \text{ К}, \quad (8)$$

где  $L = 3.1$  нм — длина слоев,  $\delta = 3.4$  Å — расстояние между слоями,  $r_{in} = 3.4$  Å — радиус внутреннего слоя. Таким образом, наша оценка показывает, что разница температур между слоями пренебрежимо мала.

При моделировании управляемых колебаний на внутренний слой-диполь действовало гармоническое электрическое поле сферического конденсатора с радиусами обкладок 100 и 110 нм. Использовано распределение зарядов во внутреннем слое, полученное нами методом молекулярных орбиталей (см. рис. 1). Частота поля соответствовала частоте колебаний осциллятора в начальный момент времени. Сдвиг фаз

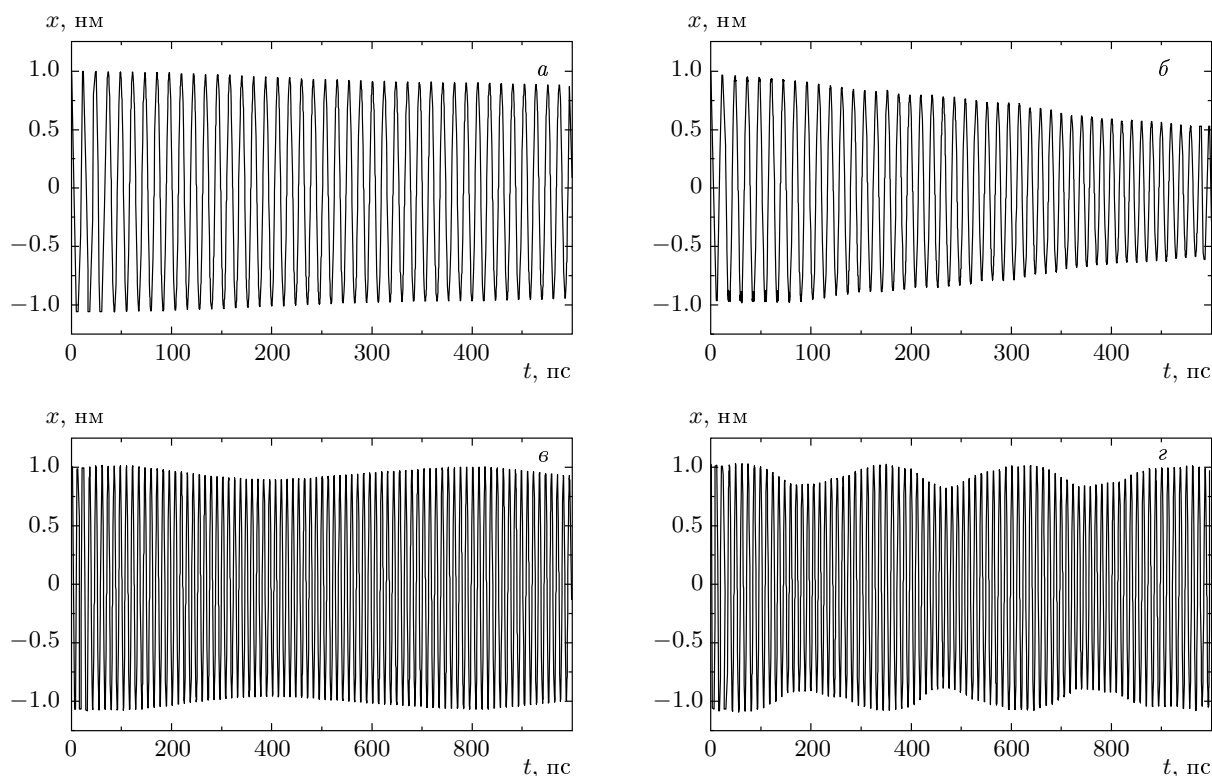


Рис. 7. Зависимость расстояния между центрами масс слоев от времени: *a, б* — свободные колебания; *в, г* — управляемые колебания при температурах  $T = 50$  К (*a, в*),  $T = 300$  К (*б, г*) и напряжениях на конденсаторе  $U_0 = 12.3$  В (*в*),  $U_0 = 60.5$  В (*г*)

между полем и скоростью внутреннего слоя в начальный момент времени равнялся нулю. Зависимости относительного положения слоев от времени, полученные в результате моделирования, показаны на рис. 7.

В отсутствие управляющей силы свободные колебания затухают из-за трения между слоями (рис. 7*a, б*). Частота свободных колебаний составляет 80 ГГц. Этот результат согласуется с результатами других работ [27–31, 33, 34]. Через каждую половину периода определялась мгновенная добротность  $Q_{T/2} = E/2\Delta E_{T/2}$ , где  $\Delta E_{T/2}$  — потери энергии колебаний за полпериода. Поскольку наблюдаются существенные термодинамические флуктуации добротности, необходимо проводить ее усреднение. Однако величина  $Q_{T/2}$  сингулярна при  $\Delta E_{T/2} = 0$ . Поэтому для определения среднего значения добротности мы проводили усреднение обратной добротности  $Q_{T/2}^{-1}$  за все время моделирования (500 пс). Зависимость добротности от температуры представлена на рис. 8, из которого видно, что добротность системы сильно уменьшается с ростом температуры. Это согласуется с

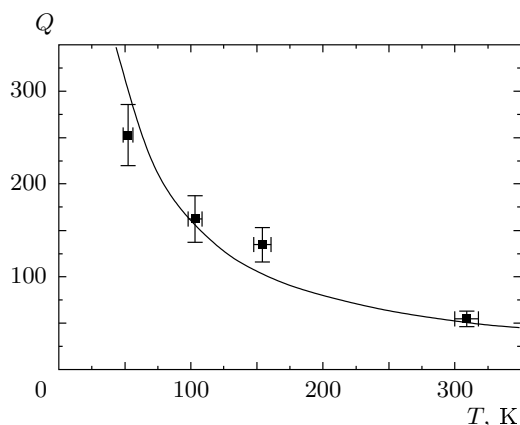


Рис. 8. Зависимость средней добротности от температуры: квадраты — результаты моделирования методом молекулярной динамики; линия — аппроксимация  $Q = \beta/T$

результатами, полученными в работе [33]. Ошибка определения добротности связана с термодинамическими флуктуациями.



Результаты моделирования управляемых колебаний осциллятора представлены на рис. 7*в,г*. Амплитуда управляющего напряжения для моделирования при 300 К составляла 60.5 В, а при 50 К — 12.3 В. Данные значения амплитуды напряжения меньше, чем значения критической амплитуды, которые следуют из выражения (4) (77.2 В при 300 К, 17.6 В при 50 К). Это объясняется тем, что выражение (4) получено в приближении длинного осциллятора с большой амплитудой колебаний, когда справедливо выражение (1) для силы Ван дер Ваальса. Для осциллятора длиной 3.1 нм, для которого проводилось моделирование, сила Ван дер Ваальса не может считаться постоянной и имеет меньшее среднее значение. Управляемые колебания, показанные на рис. 7*в,г*, соответствуют амплитуде управляющей силы, которая больше критической амплитуды. В этом случае наблюдаются осцилляции амплитуды колебаний. Период и амплитуда данных осцилляций при температуре 300 К и напряжении 60.5 В составляют соответственно около 300 пс и 0.18 нм, а при температуре 50 К и напряжении 12.3 В — около 600 пс и 0.12 нм. Наличие таких осцилляций и увеличение периода осцилляций с увеличением добротности системы подтверждают результаты, полученные с помощью полуаналитического решения уравнения движения осциллятора (см. разд. 3). Недавно был осуществлен эксперимент с наномотором, основанным на относительном вращении слоев многослойной углеродной нанотрубки [5]: между нанотрубкой и управляющим электродом прикладывалось управляющее напряжение до 100 В (это напряжение одного порядка с величинами, использованными в нашем моделировании). Таким образом, проведенное моделирование демонстрирует возможность управляемых колебаний гигагерцевого осциллятора на основе двуслойных нанотрубок с помощью предложенного способа управления движением НЭМС.

Обсудим возможные способы уменьшения амплитуды управляющего напряжения. В соответствии с выражением (4) управляющая сила, и, следовательно, управляющее напряжение пропорциональны силе  $F_W$  ван-дер-ваальсова взаимодействия слоев нанотрубки и обратно пропорциональны добротности осциллятора. Как показывает рис. 8, можно приблизительно считать, что добротность осциллятора обратно пропорциональна температуре. Поэтому при низких температурах возможно существенно меньшее управляющее напряжение. Например, при гелиевой температуре 4.2 К управляющее напряжение будет порядка 1 В. Другой путь уменьшения управляющего напряжения — использование

нанотрубок с меньшей силой  $F_W$  ван-дер-ваальсова взаимодействия слоев. Как показывают расчеты методом функционала плотности [35], при увеличении расстояния между слоями нанотрубки с 3.4 до 3.7 Å сила  $F_W$  уменьшается почти в два раза. Отметим, что двуслойные нанотрубки, полученные с использованием катализатора как в дуговом разряде между графитовыми электродами [42], так и в химическом реакторе [43–46] при разложении углеводородов, имеют расстояние между слоями до 4 Å. Отметим также, что управляющее напряжение будет в 1.6 раза меньше для осциллятора со слоем-диполем, соответствующим случаю В химической модификации нанотрубки (см. разд. 2).

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение кратко сформулируем основные результаты работы. Мы предлагаем новый метод управления движением НЭМС на основе углеродных нанотрубок с помощью неоднородного электрического поля, действующего на подвижный слой-диполь нанотрубки. Рассчитаны дипольные моменты слоев-диполей, которые образуются в результате химической адсорбции атомов на концах слоя. Проведен анализ управления движением гигагерцевого осциллятора на основе нанотрубки, управление движением которого осуществляется с помощью предложенного метода. Показано, что в рассматриваемой ангармонической системе возможен стационарный режим работы, при котором работа электрического поля компенсирует диссипацию энергии колебаний в результате действия силы трения и происходят управляемые колебания с постоянной частотой. Определены минимальное управляющее напряжение и стартовые условия включения управляющей силы, приводящие к установлению стационарного режима, и исследован процесс такого установления. Осуществимость предложенного метода управления движением НЭМС продемонстрирована с помощью моделирования методом молекулярной динамики на примере гигагерцевого осциллятора.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты №№ 08-02-90049-Бел, 08-02-00685) и Белорусского фонда фундаментальных исследований (грант № Ф08Р-061).

## ЛИТЕРАТУРА

1. M. F. Yu, O. Lourie, M. J. Dyer et al., *Science* **287**, 637 (2000).
2. J. Cumings and A. Zettl, *Science* **289**, 602 (2000).
3. A. Kis, K. Jensen, S. Aloni et al., *Phys. Rev. Lett.* **97**, 025501 (2006).
4. A. M. Fennimore, T. D. Yuzvinsky, W. Q. Han et al., *Nature* **424**, 408 (2003).
5. B. Bourlon, D. C. Glatti, L. Forro, and A. Bachtold, *Nano Lett.* **4**, 709 (2004).
6. R. E. Tuzun, D. W. Noid, and B. G. Sumpter, *Nanotechnology* **6**, 52 (1995).
7. D. W. Srivastava, *Nanotechnology* **8**, 186 (1997).
8. L. Forro, *Science* **289**, 560 (2000).
9. Q. Zheng and Q. Jiang, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 045503 (2002).
10. Q. Zheng, J. Z. Liu, and Q. Jiang, *Phys. Rev. B* **65**, 245409 (2002).
11. Z. C. Tu and X. Hu, *Phys. Rev.* **72**, 033404 (2005).
12. L. Maslov, *Nanotechnology* **17**, 2475 (2006).
13. A. M. Popov, E. Bichoutskaia, Yu. E. Lozovik, and A. S. Kulish, *Phys. Stat. Sol. (a)* **204**, 1911 (2007).
14. R. Saito, R. Matsuo, T. Kimura et al., *Chem. Phys. Lett.* **348**, 187 (2001).
15. Yu. E. Lozovik, A. V. Minogin, and 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 and A. M. Popov, *Fullerenes, Nanotubes, and Carbon Nanostructures* **12**, 485 (2004).
18. Ю. Е. Лозовик, А. Г. Николаев, А. М. Попов, *ЖЭТФ* **130**, 516 (2006).
19. С. С. Кузнецов, Ю. Е. Лозовик, А. М. Попов, *ФТТ* **49**, 951 (2007).
20. S. B. Legoas, V. R. Coluci, S. F. Braga et al., *Nanotechnology* **15**, S184 (2004).
21. J. W. Kang and H. J. Hwang, *J. Appl. Phys.* **96**, 3900 (2004).
22. S. Bandow, M. Takizawa, K. Hirahara et al., *Chem. Phys. Lett.* **337**, 48 (2001).
23. J. W. Kang, K. O. Song, O. K. Kwon, and H. J. Hwang, *Nanotechnology* **16**, 2670 (2005).
24. J. J. P. Stewart, *New Polymeric Mat.* **1**, 53 (1987).
25. J. J. P. Stewart, *J. Comp. Chem.* **10**, 209 (1989).
26. О. Н. Бубель, С. А. Вырко, Е. Ф. Кисляков, Н. А. Поклонский, *Письма в ЖЭТФ* **71**, 741 (2000).
27. J. L. Rivera, C. McCabe, and P. P. Cummings, *Nano Lett.* **3**, 1001 (2003).
28. J. L. Rivera, C. McCabe, and P. P. Cummings, *Nanotechnology* **16**, 186 (2005).
29. S. B. Legoas, V. R. Coluci, S. F. Braga et al., *Phys. Rev. Lett.* **90**, 055504 (2003).
30. Y. Zhao, C.-C. Ma, G. Chen, and Q. Jiang, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 175504 (2003).
31. W. Guo, Y. Guo, H. Gao et al., *Phys. Rev. Lett.* **91**, 125501 (2003).
32. J. Servantie and P. Gaspard, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 185503 (2003).
33. C.-C. Ma, Y. Zhao, Y.-C. Yam et al., *Nanotechnology* **16**, 1253 (2005).
34. P. Tangney, S. G. Louie, and M. L. Cohen, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 065503 (2004).
35. E. Bichoutskaia, M. I. Heggie, Yu. E. Lozovik, and A. M. Popov, *Phys. Rev. B* **73**, 045435 (2006).
36. <http://amber.scripps.edu//#ff>.
37. D. W. Brenner, O. A. Shenderova, J. A. Harrison et al., *J. Phys.: Cond. Matter* **14**, 783 (2002).
38. A. V. Belikov, Yu. E. Lozovik, A. G. Nikolaev, and A. M. Popov, *Chem. Phys. Lett.* **385**, 72 (2004).
39. L. Verlet, *Phys. Rev.* **159**, 98 (1967).
40. H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. van Gunsteren et al., *J. Chem. Phys.* **81**, 3684 (1984).
41. Н. А. Абдуллаев, Р. А. Сулейманов, М. А. Алджанов, Л. Н. Алиева, *ФТТ* **44**, 1775 (2001).
42. J. L. Hutchison, N. A. Kiselev, E. P. Krinichnaya et al., *Carbon* **39**, 761 (2001).
43. H. Zhu, C. Xu, B. Wei, and D. Wu, *Carbon* **40**, 2023 (2002).
44. L. Ci, Z. Pao, Z. Zhou et al., *Chem. Phys. Lett.* **359**, 63 (2002).
45. J. Wei, B. Jiang, X. Zang et al., *Chem. Phys. Lett.* **376**, 753 (2003).
46. H. Zhu, M. Yudasaka, and S. Iijima, *Chem. Phys. Lett.* **380**, 496 (2003).