

КОНФЕРЕНЦИИ И СИМПОЗИУМЫ

Научная сессия Отделения физических наук Российской академии наук

(31 января 2007 г.)

31 января 2007 г. в конференц-зале Физического института им. П.Н. Лебедева РАН состоялась Научная сессия Отделения физических наук Российской академии наук. На сессии были заслушаны доклады:

1. **Кошелев К.Н.** (Институт спектроскопии РАН, г. Троицк, Московская обл.), **Банин В.Е.** (ASML, Veldhoven, Нидерланды), **Салашенко Н.Н.** (Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород). *Работы по созданию источников коротковолнового излучения для нового поколения литографии.*

2. **Балькин В.И.** (Институт спектроскопии РАН, г. Троицк, Московская обл.). *Атомно-проекционная параллельная фабрикация наноструктур.*

3. **Лозовик Ю.Е., Попов А.М.** (Институт спектроскопии РАН, г. Троицк, Московская обл.). *Свойства и нанотехнологические применения нанотрубок.*

Краткое содержание докладов публикуется ниже.

PACS numbers: 42.72. – g, 42.82.Cr

Работы по созданию источников коротковолнового излучения для нового поколения литографии

К.Н. Кошелев, В.Е. Банин, Н.Н. Салашенко

Среди внушительного списка научных, технических и технологических проблем, которые предстоит решить при создании коротковолновой литографии, далеко не последнее место по сложности возникающих проблем занимает источник излучения. Длина волны для нового поколения литографии — EUV-литографии (EUV — от англ. Extreme Ultraviolet — сверхжесткое ультрафиолетовое излучение) — 13,5 нм была выбрана задолго до того, как стало более или менее понятно, как именно может быть устроен источник, обеспечивающий коммерчески выгодное производство — HVM (High Volume Manufacturing). Выбор был сделан частично исходя как из характера производства и свойств многослойных зеркал, так и из предположения, что излучателями будут скорее всего служить линия Ly_{α} водородоподобных ионов лития Li^{+2} (13,5 нм) или пик излучения, связанный с переходами в ионе He^{+9} .

Плазма, излучающая в далеком вакуумном ультрафиолете (ВУФ), — давно и хорошо изученный объект,

однако технические требования, предъявляемые к HVM-источнику, настолько необычны, что, казалось бы, простая задача нагрева плазмы до температуры в несколько десятков электронвольт превращается в целый комплекс сложных физических и инженерно-технических проблем. Рассмотрим эти требования подробнее. В литографии принято характеризовать источник мощностью излучения в так называемом "промежуточном фокусе" (ПФ) на выходе из первичной системы сбора излучения (рис. 1).

Сложная оптика литографического аппарата с большим числом отражающих поверхностей (до 11) многослойных зеркал приводит к тому, что только узкая полоса излучения с шириной в 2 % и центром на 13,5 нм может быть использована для печатания микросхем. Минимально требуемая мощность излучения в ПФ 180 Вт. С учетом эффективности первичного сбора излучения (телесного угла сбора и коэффициентов отражения) и обязательных потерь на устройствах, защищающих оптику от "грязи", это приводит к следующей оценке излучательной мощности источника: средняя "полезная" мощность излучения в телесный угол 2π в узкой спектральной 2 %-ной полосе должна составлять не менее 2000 Вт. Источник принято характеризовать также эффективностью перевода (СЕ) электрической энергии в "полезное" излучение. Эффективный размер излучающей области не должен превышать 1 мм²; рабочая частота источника около 10 кГц и стабильность дозы излучения $3\sigma \leq 0,3\%$ (за 50 вспышек).

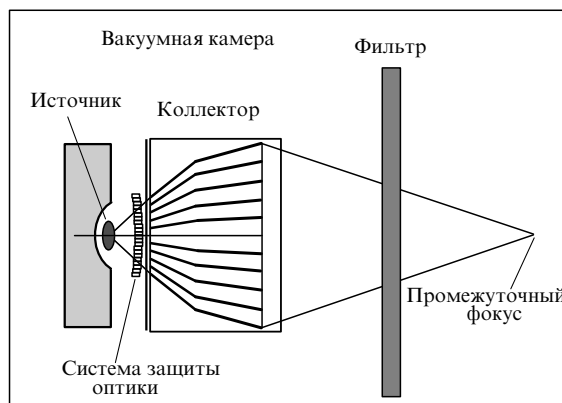


Рис. 1. К определению параметров источника для EUV-литографии.

Литий как рабочий материал был отвергнут на довольно ранней стадии исследований, в первую очередь, из-за необычайных технологических трудностей и опасности загрязнения всей литографической системы химически весьма агрессивным элементом. Эксперименты с более удобным химически нейтральным ксеноном показали, что коэффициент СЕ составляет 0,5–0,7 % для импульсной разрядной плазмы. Это означает, что средняя электрическая мощность, выделяемая в малом объеме источника, должна достигать 300–400 кВт.

Оценки, приведенные выше, сделаны для источника на основе разрядной плазмы. Другой возможный кандидат — плазма лазерного факела (ПЛФ). Существует целый ряд преимуществ ПЛФ как EUV-источника по сравнению с разрядной плазмой. Это и несколько больший коэффициент конверсии, и преимущества в эффективности сбора излучения, и, возможно, более простая система защиты оптики от разрушающего действия корпускулярного излучения. Однако наиболее существенным и, возможно, определяющим выбор типа источника аргументом, является высокая стоимость лазерных систем со средней световой мощностью во много десятков киловатт. Очевидно, что этот аргумент носит временный характер, поскольку коммерческая стоимость любой hi-tech-продукции имеет особенность неуклонно снижаться, однако в сегодняшних планах основных производителей литографических машин акцент сделан на использование EUV-источников на основе разрядной плазмы. Ниже мы опишем некоторые результаты по созданию разрядных источников, опираясь в основном на совместную работу Института спектроскопии РАН и лидирующей компании по производству литографических машин ASML (Нидерланды) в рамках Интеграционного проекта "MoreMoore" 6-й рамочной программы Европейского сообщества.

Низкая эффективность ксенона связана, в частности, с тем, что в используемом узком спектральном диапазоне излучает лишь несколько линий одного иона Xe^{+9} . В результате в нестационарной и неоднородной плазме импульсных разрядов и лазерных факелов полезное излучение присутствует в течение гораздо более короткого времени, чем полное время высокотемпературной фазы, и далеко не весь объем неоднородной по температуре плазмы излучает полезные кванты. Казалось, что это непреодолимое препятствие, однако атомная физика подсказала возможное решение — использование излучения многозарядных ионов олова.

С точки зрения фундаментальной атомной спектроскопии имеется несколько причин в пользу выбора олова в качестве рабочего вещества для источника излучения на длине волны 13,5 нм. Резонансными переходами в ионах $\text{Sn}^{+8} - \text{Sn}^{+13}$ являются $4d^k - (4d^{k-1}4f + 4p^54d^{k+1})$. Большая величина обменного взаимодействия $4d-4f$ в конфигурации $4d^{k-1}4f$ и обменного взаимодействия $4p-4d$ в конфигурации $4p^54d^{k+1}$ приводит к разделению уровней энергии этих конфигураций на две зоны, причем вероятности переходов из верхней зоны намного превосходят вероятности переходов из нижней зоны. Сильное взаимодействие между конфигурациями $4d^{k-1}4f$ и $4p^54d^{k+1}$ приводит к еще большему сужению этой излучательной зоны. В результате, несмотря на наличие многих сотен уровней в широком интервале энергии, излучение концентрируется в узком спектральном интервале. Кроме того, из-за малой зависимости энергии

возбуждения при $n = 4 - n' = 4$ -переходах в этот интервал попадают интенсивные переходы в нескольких соседних ионах. Подробное изучение спектра оловянной плазмы, возбуждаемого в вакуумной искре, было инициировано работами по созданию источника для EUV-литографии [2].

Уже первые эксперименты с разрядом в парах олова продемонстрировали существенное увеличение СЕ — от 0,5–0,7 % до 2 % или даже до 3 %. Требования к выделяемой в разряде мощности существенно понизились, но необходимая мощность все еще составила около 100 кВт — величину слишком высокую для единичного источника малого размера. Прежде чем сформулировать подходы, позволяющие работать в режиме экстремальных тепловых нагрузок, обратимся к физике используемого разряда. В качестве источника плазмы была выбрана классическая вакуумная искра — разряд между двумя электродами с подачей рабочего вещества в межэлектродный промежуток путем абляции материала катода (олово) с помощью импульса лазерного излучения. Исследования аксиально-симметричных разрядов, в частности в вакуумных искрах, показали, что мягкое рентгеновское излучение и ВУФ-излучение возбуждаются в плазме с токами, превышающими 10 кА в момент развития в столбе разряда перетяжных неустойчивостей. Известно, что эти перетяжки, или "микропинчи", образуются в результате вытекания плазмы в условиях сильных радиационных потерь, в данном случае за счет линейчатого излучения многозарядных ионов олова (см., например, [3]). Вытекание плазмы из перетяжки сопровождается сжатием и нагревом плазмы и переходом ко все более высоким кратностям ионизации. Радиус перетяжки определяется балансом джоулевого нагрева и энергетических потерь, в первую очередь радиационных потерь в оптически плотной плазме.

Процесс продолжается до тех пор, пока либо радиационные потери перестанут компенсировать джоулево тепловыделение, либо в плазме разовьется аномальное сопротивление из-за малого числа носителей тока. На этой стадии происходит быстрое расширение плазмы и распад микропинча. Развитие неустойчивости можно проиллюстрировать с помощью диаграммы (рис. 2), на которой радиус пинча представлен как функция полного числа ионов в сечении разряда (погонная плотность ионов N_i). Направление траектории развития — умень-

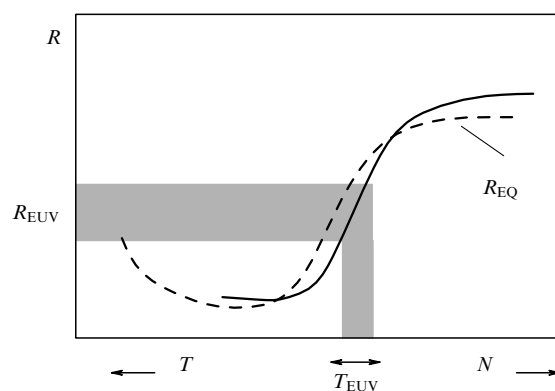


Рис. 2. Равновесный радиус беннетовского пинча (штриховая кривая). Температура T_{EUV} , необходимая для возбуждения EUV-квантов, соответствует сжатию до радиуса R_{EUV} .

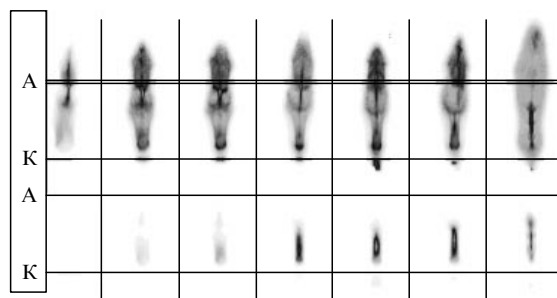


Рис. 3. Изображения столба плазмы, полученные в собственном коротковолновом излучении с помощью микроканального детектора с регулируемым временем открытия (от 3 до 50 нс). Изображение в верхней части рисунка соответствует излучению во всей области чувствительности МКП (< 100 нм); в нижней — через Zr/Si-фильтр. Расстояние между анодом А и катодом К 3 мм.

шение погонной плотности — указано стрелкой. Для сравнительно медленных сжимающихся пинчей в каждый момент выполняется (или почти выполняется) условие равновесия теплового и магнитного давлений — соотношение Беннета,

$$N_i(Z+1)T \sim I^2,$$

так что каждая точка траектории на рис. 2 может быть соотнесена с температурой плазмы, возрастающей вдоль траектории. Для быстрых, динамических пинчей отступления от соотношения Беннета могут быть значительными.

Для токов $I \approx 10-30$ кА температура $T \approx 20-40$ эВ достигается при сжатии столба плазмы до поперечных размеров около 200 мкм. На рисунке 3 приведен пример наблюдаемых в столбе разряда вакуумной искры перетяжек-микропинчей.

Наблюдается (часто последовательное во времени) образование нескольких микропинчей, излучающих в EUV-диапазоне. Этот эффект "скольжения" излучающей области вдоль оси разряда определяет интегральный во времени аксиальный размер источника.

Возникает любопытный вопрос: как можно надеяться на стабильность дозы EUV-излучения, если оно возбуждается в разряде в процессе развития неустойчивости, в данном случае "перетяжечной" неустойчивости, хорошо известной в физике плазмы? Тем более, если речь идет о вакуумной искре — разряде с довольно неустойчивыми начальными параметрами, в первую очередь с плохо воспроизводимым начальным распределением рабочего вещества в межэлектродном промежутке. Оказалось, однако, что существует такая область параметров (начальный радиус и полное количество испаренного вещества), для которой траектория развития неустойчивости мало от них зависит [4]. Это обстоятельство проиллюстрировано на рис. 4а. Эксперименты с EUV-источником хорошо подтверждают этот факт: на рис. 4б показаны наложенные друг на друга (и хорошо совпадающие между собой) осциллографические сигналы тока и EUV-излучения 256 разрядов вакуумной искры с лазерным поджигом и током в максимуме около 10 кА.

Переход к плазме олова как излучателю EUV с коэффициентом конверсии СЕ до 2–3 % позволяет снизить требования к величине выделяемой в разряде электрической мощности до 100 кВт. Для разряда с размерами в несколько миллиметров это все еще остается

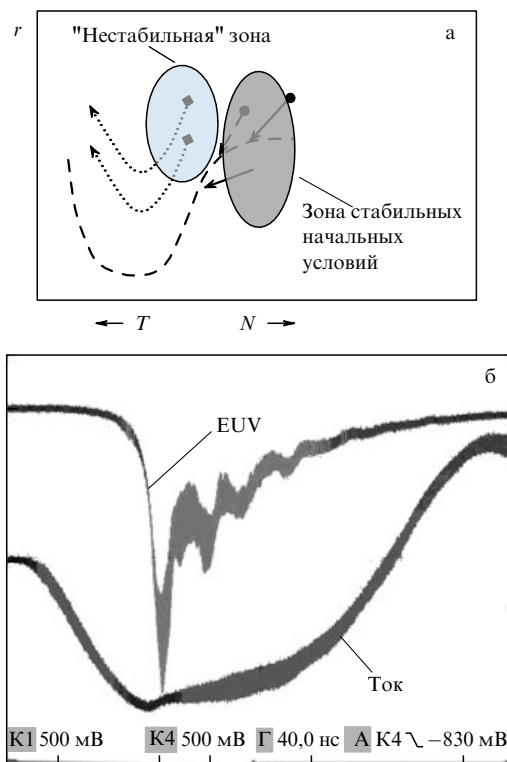


Рис. 4. (а) Стабильные (штриховые кривые) и нестабильные (пунктирные кривые) траектории развития микропинчей в координатах радиуса пинча r и погонного числа частиц N . (б) Наложенные друг на друга осциллографические сигналы тока и EUV-излучения 256 разрядов вакуумной искры с лазерным поджигом и током в максимуме около 10 кА.

ся немыслимо высоким значением. Возможное решение проблемы — так называемое "мультиплицирование" источника, т.е. создание множества источников, для того чтобы распределить между ними электрическую и тепловую нагрузку. Однако требование постоянства положения излучателя в пространстве и высокая рабочая частота (до 10 кГц) практически исключают "револьверную" систему с механическим повторением большого числа вакуумных искр с аксиально симметричной системой электродов и изоляторов. Именно поэтому мультипликация ксенонового источника представлялась практически невозможной.

Использование олова в сочетании с лазерной инициацией открывает особые возможности. Подача вещества в межэлектродный промежуток путем испарения поверхности электрода под воздействием лазерного импульса непосредственно обеспечивает аксиальную начальную симметрию независимо от формы электродов — начальная плазма разлетается в виде конуса с осью, перпендикулярной поверхности электрода. Один из вариантов системы с вращающимися электродами, нижний из которых покрыт жидким оловом (для облегчения возобновления поверхности), схематично изображен на рис. 5.

В случае вращения электродов при каждом новом выстреле лазер, положение фокуса которого не изменяется, испаряет олово с нового участка катодного кольца. Таким образом, возникает последовательность элементарных вакуумных искр, находящихся в одной и той же точке пространства, но относящихся к различным участкам плоских электродов — катода и анода. Жела-

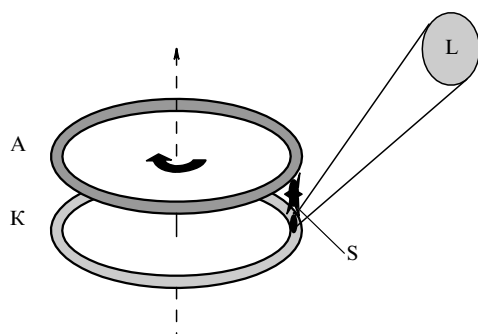


Рис. 5. Принципиальная схема "колесной" мультипликации.

тельно только, чтобы в промежутке между импульсами предыдущее положение фокуса лазера смещалось относительно нового на расстояние в 1–2 мм — размер зоны временно "испорченной" разрядом поверхности. При частоте повторения 10^4 Гц это соответствует минимально необходимой линейной скорости вращения порядка 10 м с^{-1} . Эксперименты и расчеты показывают, что подобные системы способны выдерживать электрические мощности до 50 кВт, а возможно, и до 100 кВт.

Дальнейшее развитие идея "непрерывной мультипликации" получила в струйном варианте источника. В качестве электродов предложено использовать две струи жидкого металла или сплава с невысокой температурой плавления, вытекающие с большой скоростью из металлических сопел. Насосы поддерживают в системе давление жидкого металла в несколько десятков атмосфер, что заставляет струи двигаться со скоростями в несколько десятков метров в секунду, обеспечивая тем самым охлаждение сопел и отвод тепла.

К струям приложено напряжение, и разряд между ними возникает при фокусировке лазерного излучения на одной из них (рис. 6). Струи не только уносят тепло, выделяющееся в разряде, но и эффективно охлаждают ближайшие к разряду металлические элементы — сопла. Струи попадают в теплообменник и после охлаждения возвращаются с помощью насосов в систему. Ресурс мощности такого технического решения 200 кВт.

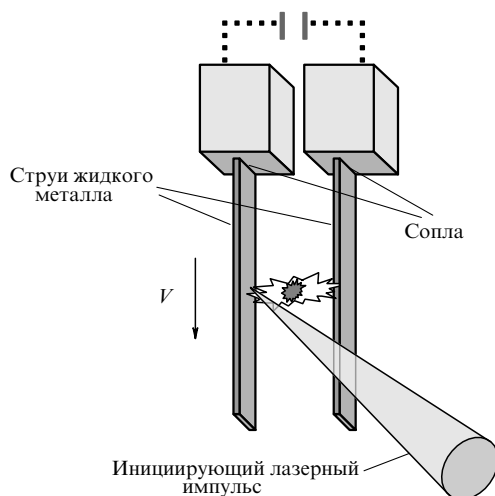


Рис. 6. Схематическое изображение "струйного" источника EUV-излучения.

Выше мы описали некоторые подходы к решению двух проблем — увеличения мощности излучения (тепловой нагрузки) и повышения стабильности дозы излучения. За рамками доклада остались такие важные аспекты создания литографической машины, как время жизни электродов и элементов оптики, в первую очередь коллектора излучения. Последняя проблема непосредственно связана с физикой источника излучения, так как возникает в результате корпускулярных потоков (атомы, ионы, капли материала электродов) из области разряда, так называемых "debris".

Демонстрационный (так называемый "альфа-тул") EUV-литографический аппарат уже создан и осваивается индустрией. Но его основные параметры еще в десять и более раз хуже параметров, соответствующих HVM-требованиям. Индустрия дает исследователям сравнительно короткий срок в два года для преодоления этой пропасти.

Список литературы

1. Banine V, Moors R *J. Phys. D: Appl. Phys.* **37** 3207 (2004)
2. Churilov S S, Ryabtsev A N *Phys. Scripta* **73** 614 (2006)
3. Koshelev K N, Pereira N R *J. Appl. Phys.* **69** R21 (1991)
4. Antsiferov P S et al. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **22** 1073 (1989)
5. Koshelev K N et al., in *EUV Sources for Lithography* (Ed. V Bakshi) (Bellingham, Wash.: SPIE Press, 2006) p. 175
6. Borisov V M et al., in *EUV Sources for Lithography* (Ed. V Bakshi) (Bellingham, Wash.: SPIE Press, 2006) p. 477

PACS numbers: **81.07. – b**, **81.16. – c**, **81.16.Ta**

Атомно-проекционная параллельная фабрикация наноструктур

В.И. Балыкин

1. Введение

Существуют два принципиально разных подхода к развитию нанотехнологии. Эти подходы условно принято называть технологиями "сверху – вниз" и "снизу – вверх". Подход сверху – вниз основан на уменьшении размеров физических тел вплоть до получения объектов с нанометрическими параметрами. Например, полупроводниковые приборы микроэлектроники создаются с помощью метода оптической литографии, в котором заготовка подвергается обработке лазерным лучом и минимальный размер элементов создаваемой схемы определяется длиной волны лазерного излучения. Отметим, что стандартная оптическая литография имеет дифракционный предел разрешения порядка 65 нм. Существуют несколько других подходов в технологии сверху – вниз, каждый из которых обладает как достоинствами, так и недостатками: литография пучков заряженных частиц имеет проблемы, связанные с серийным производством структур и значительной ролью кулоновского отталкивания; самоорганизующаяся фабрикация все еще требует лучшего понимания физических процессов.

Технология снизу – вверх заключается в том, что создаваемый нанообъект "собирается" из индивидуальных атомов, молекул, биологических клеток и т.п. На возможность и перспективность такого подхода впервые указал Ричард Фейнман [1] в выступлении на ежегодном собрании Американского физического общества в 1959 г. Практическая реализация технологии снизу – вверх стала

возможной с развитием техники зондовой микроскопии, позволившей не только наблюдать нанообъекты с атомным разрешением, но и манипулировать единичными атомами и молекулами. Впервые это удалось сделать сотрудникам лаборатории ИБМ, которые сумели выложить на поверхности монокристалла никеля название своей фирмы (IBM) из 35 атомов ксенона [2]. Такая техника открывает много возможностей для манипуляции на уровне отдельных атомов и молекул, однако методы, основанные на использовании сканирующих зондов, вообще говоря, обладают низкой производительностью и высокой стоимостью.

Создание наноструктур размером порядка 10 нм является сложной технологической задачей, имеющей как практическое, так и фундаментальное значение, поскольку такие структуры образуют мост между классическим и квантово-механическим миром.

2. Атомная оптика и атомная нанооптика

Альтернативным подходом для нанотехнологии по принципу снизу – вверх является *атомная оптика*. Атомная оптика представляет собой оптику материальных частиц (наряду с электронной, ионной и нейтронной оптикой) и занимается проблемами формирования ансамблей и пучков нейтральных атомов, управления ими, а также вопросами их применения. Термин *атомная оптика* аналогичен терминам *световая оптика* или *оптика фотонов*. Атомная оптика построена на трех главных методах, первый из которых основан на взаимодействии атомов с веществом, второй — на взаимодействии атомов, имеющих магнитный или электрический дипольный момент со статическим электрическим или магнитным полем и третий — на резонансном (или квазирезонансном) взаимодействии между атомом и оптическим полем.

В результате интенсивного развития за последние 10–15 лет атомная оптика стала важной областью атомной, молекулярной и оптической физики, дающей вклад в различные технологии [3–10]. Одним из важных направлений атомной оптики является разработка основных элементов, подобных известным элементам обычной световой оптики, таких как атомные линзы, зеркала, расщепители пучков, интерферометры, и при-

менение этих элементов в практических приборах. В частности, одно из многих применений атомно-оптических элементов — *атомная литография* — представляет значительный интерес для микро- и нанофабрикации материальных структур. В атомной литографии внутренние и (или) внешние степени свободы индивидуальных атомов контролируются с нанометровой точностью внешними электромагнитными полями, что позволяет создавать структуры на поверхности. Благодаря тому, что в этом методе используются нейтральные атомы, он обладает рядом преимуществ по сравнению с другими методами. Прежде всего, в данном методе весьма малым является фундаментальный предел пространственного разрешения, накладываемый дифракцией, поскольку атомы имеют относительно большие массы и соответственно малые де-бройлевские длины волн. Кроме того, при использовании нейтральных атомов отсутствуют кулоновские силы отталкивания. Наконец, манипулирование атомами может быть реализовано параллельно, что позволяет проводить одновременную обработку относительно больших поверхностей. Впервые на возможность осаждения атомов на поверхность с атомарной точностью с помощью методов атомной оптики было указано в работах Балыкина и Летохова [11, 12].

Рассмотрим основные методы фабрики наноструктур в атомной оптике.

2.1. Атомная фабрикация наноструктур на основе бегущих и стоячих световых волн

В последние годы сделан ряд предложений и выполнены эксперименты по нанофабрикации атомных структур сфокусированными атомными пучками с помощью бегущих и стоячих световых волн [11–26]. В целом, можно указать две основные идеи фокусировки атомов лазерным светом бегущих и стоячих световых волн. Одной из них является фокусировка атомов *одиночным лазерным пучком*, впервые реализованная с использованием пучка атомов натрия [13, 14] и гауссова лазерного луча, который играл роль атомной линзы. Данный метод был распространен на другие атомы и лазерные лучи с иной конфигурацией, включая так называемые пустотелые лучи [11, 12, 15, 16]. На рисунке 1а показана схема фокусировки атомов в область размером порядка не-

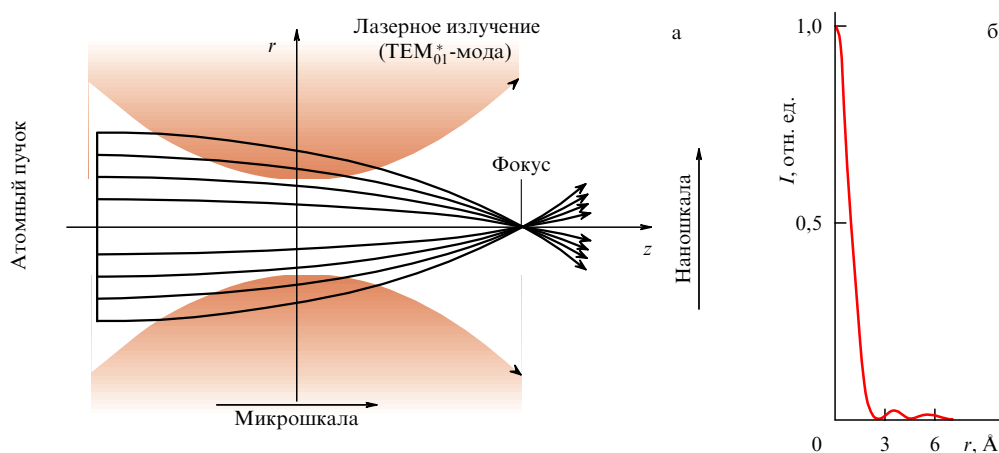


Рис. 1. (а) Фокусировка атомов в ангстремную область с помощью лазерной моды TEM_{01}^* . (б) Распределение плотности атомов с шириной порядка 1 Å в фокальной плоскости атомной линзы.

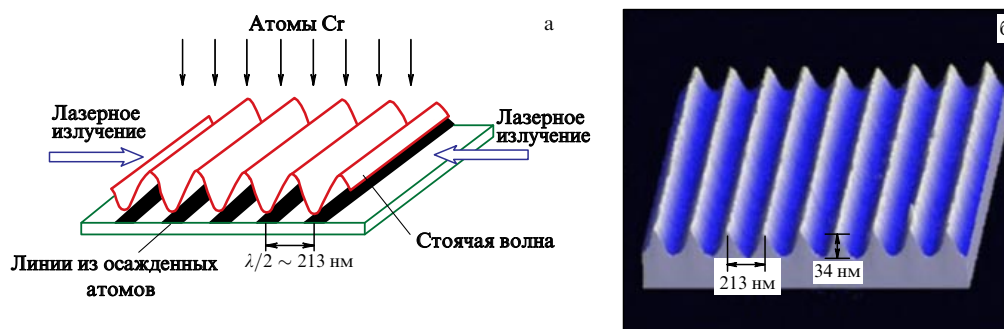


Рис. 2. (а) Схема фокусировки атомов стоячей световой волной. (б) Напыленные полосы атомов хрома с субмикронными ширинами.

скольких ангстрем с помощью лазерной моды TEM_{01}^* . При распространении атомов внутри пустотелого лазерного луча происходит их фокусировка под действием градиентной силы светового давления. Распределение плотности атомов (рис. 16) в фокальной плоскости такой атомной линзы имеет ширину порядка одного ангстрема, т.е. сравнимую с размером атома [11, 12].

Другая идея построения наноструктур состоит в фокусировке атомов стоячей волной лазерного излучения [17–26], что представляет особенный интерес для создания периодических субмикронных структур. Первая демонстрация напыления атомных структур стоячей световой волной была осуществлена с атомами натрия [17]. McClelland с соавторами напылили полосы атомов хрома с субмикронной шириной [21]. На рисунке 2а приведена схема фокусировки атомов стоячей световой волной, а на рис. 2б показаны напыленные полосы атомов хрома, ширина которых существенно меньше длины волны излучения.

2.2. Атомная фабрикация наноструктур на основе лазерных нанополей

Атомная оптика на основе бегущих и стоячих лазерных полей имеет ряд ограничений как принципиального, так и технического характера, обусловленных пространственной "нелокализovanностью" лазерных световых полей. Нелокализация лазерного светового поля приводит к нелокализации элементов атомной оптики. Следствием этого является несовершенство элементов атомной оптики: aberrации атомных линз, низкая эффективность дифракции атомных волн, ограничения на контраст интерференционных полос в атомных интерферометрах и т.д.

Из общих физических соображений ясно, что для построения элементов атомной оптики, в частности атомной линзы, предпочтительным является использование пространственно локализованных потенциалов взаимодействия атома с полем. Сейчас известно только три типа лазерных полей, достаточно хорошо локализованных в пространстве: а) поверхностная световая волна, которая появляется при полном внутреннем отражении света (одномерная локализация света); б) световое поле, возникающее при дифракции света на структурах, меньших длины волны света (двумерная локализация света); в) световое поле, локализованное в частично открытых волноводах, — "фотонная точка" и "фотонная дырка" (трехмерная локализация света). Два последних типа лазерных нанополей нашли применение в атомной литографии.

2.2.1. Атомная линза на основе отверстия Бете (Bethe hole). Наиболее известный пример двумерной локализации света — это апертура Бете: отверстие в тонком проводящем экране с диаметром, меньшим длины волны излучения [27–30]. Возможность применения такого нанолокализованного поля для задач фокусировки атомных пучков исследовалась в работах [31–34]. Показано [32–35], что набор ближнеполевых микролинз может быть использован для создания микро- и наноструктур на поверхностях.

Схема одиночной ближнеполевой атомной линзы приведена на рис. 3а. Лазерный свет падает на проводящий экран с отверстием, имеющим диаметр, меньший длины волны света. Поле на верхней стороне экрана состоит из бегущей волны и ближнеполевой компоненты. Последняя обладает следующими замечательными особенностями: 1) величина ближнеполевой компоненты в непосредственной близости от отверстия имеет порядок величины падающего поля, 2) ближнеполевая компонента затухает вне экрана на характерной длине порядка размера отверстия, 3) ближнеполевая компонента обладает аксиальной симметрией в плоскости, параллельной экрану, а ее величина изменяется приблизительно как квадрат расстояния от оси отверстия. Точное формальное решение задачи дифракции плоской волны на круглой апертуре в бесконечно тонкой металлической плоскости получено в работах [27–30]. На рисунке 3б показано распределение светового поля в ближней зоне.

Анализ ближнеполевой атомной фокусировки показал [32–35], что эффективная фокусировка может быть достигнута для относительно медленного атомного пучка. При высокой скорости атомов малое время взаимодействия атома с полем ограничивает эффект воздействия поля на атом, а при малой скорости атомов дифракция ограничивает размер атомного пучка в фокусе. Минимальный размер пятна в фокусе определяется рядом факторов, включающих: 1) сферические aberrации; 2) хроматические aberrации; 3) дифракцию атомов на апертуре; 4) конечную расходимость падающего атомного пучка; 5) взаимодействие атомов между собой при достаточно высокой плотности; 6) спонтанное излучение. Размер фокального пятна с учетом вышеприведенных факторов составляет 0,1 оптической длины волны.

2.2.2. Атомная линза на основе "фотонной точки" и "фотонной дырки". Существенным недостатком поля, которое локализовано вблизи одиночного отверстия,

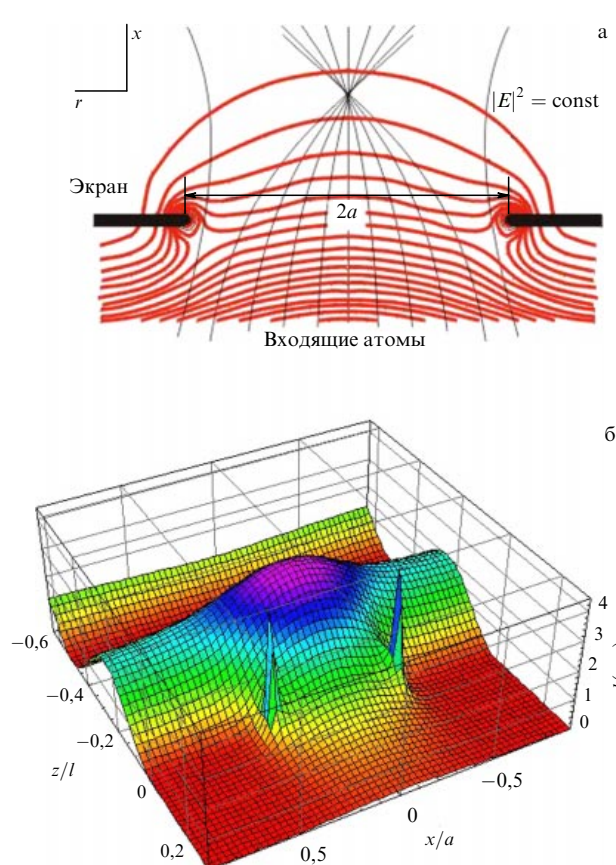


Рис. 3. (а) Атомная линза на основе дифракции света на отверстии Бете. (б) Распределение интенсивности светового поля в ближней зоне при дифракции света на отверстии Бете.

используемого в качестве атомной микролинзы, является тот факт, что такое поле неразрывно связано с полем сопутствующей стоячей волны. При движении атома в этой области возможны процессы спонтанного распада, которые обычно являются нежелательными в задачах атомной литографии. Нами были исследованы новые типы пространственно локализованных лазерных световых полей с характерным пространственным размером, лежащим в нанометровом диапазоне, которые свободны от указанного недостатка [34, 36].

Схема получения такого пространственно локализованного светового нанополя изображена на рис. 4а. Два плоских проводящих экрана с расстоянием между ними порядка или меньшим длины волны света, образуют плоский двумерный волновод для вводимого в него сбоку лазерного излучения. Как известно, для волновода, состоящего из двух параллельных идеально проводящих плоскостей, существуют решения уравнений Максвелла, допускающие распространение излучения в волноводе при сколь угодно малой его толщине d , в том числе существенно меньшей длины волны излучения.

Если в проводящих экранах имеются два малых соосных отверстия с радиусом a , существенно меньшим длины волны вводимого излучения, $a \ll \lambda$, то излучение практически не выходит через эти отверстия, но вблизи каждого из них излучение, распространяющееся вдоль волновода, окажется сильно модифицированным. Фактически, вблизи отверстий происходит уменьшение поля в области с характерным пространственным размером

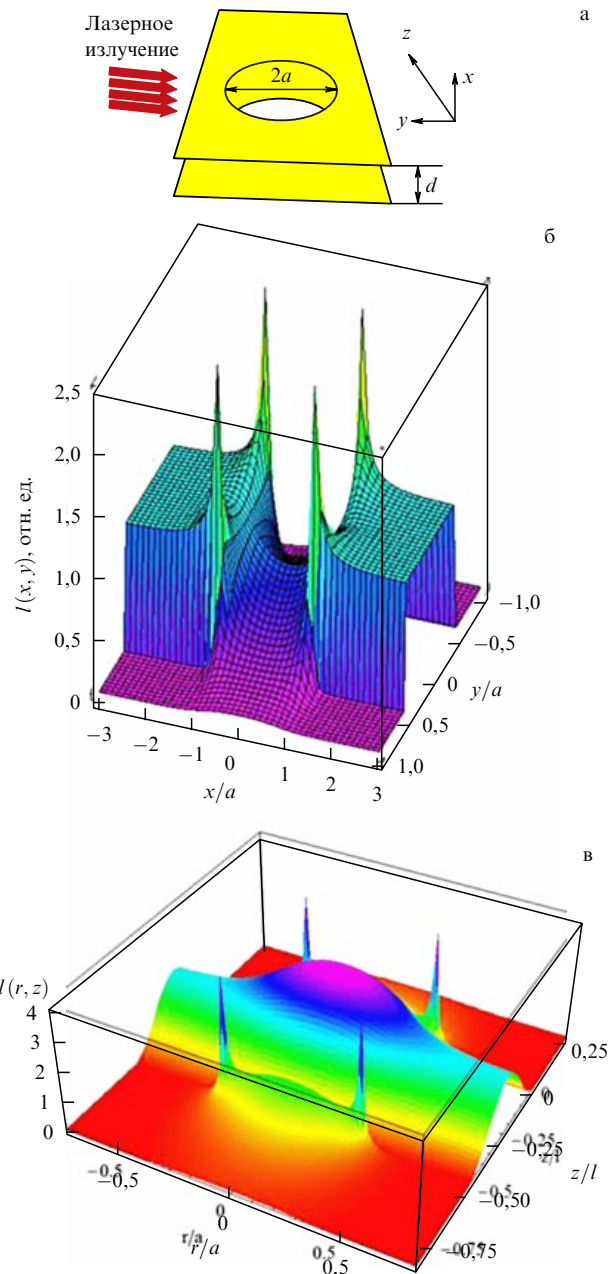


Рис. 4. Трехмерная нанолокализация света. (а) Схема получения пространственно-локализованного светового нанополя: два проводящих экрана с расстоянием d между их плоскостями порядка или меньшим длины волны света образуют плоский двумерный волновод для вводимого в него сбоку лазерного излучения. (б) Распределение плотности энергии электрического поля "фотонной дырки". (в) Распределение плотности энергии электрического поля "фотонной точки".

порядка диаметра отверстия, т.е. существенно меньшим длины волны излучения. Объем такой области $V \ll \lambda^3$. Модификация поля вблизи отверстий зависит от поляризации лазерного поля внутри волновода. Распределение плотности энергии для излучения с вектором электрического поля, перпендикулярным плоскости волновода, показано на рис. 4б. Такого рода модификацию поля назвали "фотонной дыркой" [34]. Видно, что в окрестности отверстий образуется "фотонная дырка" с характерными размерами, определяемыми размерами отверстий и толщиной волновода.

На рисунке 4в показано распределение интенсивности поля вблизи отверстия плоского волновода и внутри волновода в случае, когда вектор электрического поля лазерного излучения параллелен плоскости волновода, толщина волновода равна половине длины волны, а радиус отверстия $a = \lambda/2$. Как видно из рисунка, поле спадает достаточно быстро вне волновода в направлении, перпендикулярном плоскости волновода, и имеет максимум в середине волновода, т.е. образуется "фотонная точка". Характерный объем такой "фотонной точки" также меньше λ^3 . Острые пики интенсивности поля вблизи края апертуры обусловлены предположением о бесконечной проводимости стенок волновода. Важно отметить, что величина максимума вдвое превышает величину максимума в случае одного отверстия. Это обстоятельство, обусловленное конструктивной интерференцией полей, рассеянных отверстиями, позволяет использовать поля меньшие, чем в случае одиночного отверстия.

"Фотонная точка" и "фотонная дырка" могут использоваться для фокусировки атомных пучков градиентной силой, которая пропорциональна интенсивности электрического поля [34, 36]. Атом при положительной расстройке частоты лазерного излучения относительно частоты излучения атома выталкивается в область более слабых полей, а при отрицательной втягивается в область более сильных полей.

2.3. Атомная наноперьевая литография

Наноперьевая литография — это способ построения произвольных структур на поверхности, аналогичный нанесению на бумагу чернильных линий с помощью перьевой ручки. Для проведения таких линий в наномасштабе необходима наноручка. В первых наноручках (разработанных в Нортвестернском университете, США) в качестве пера использовались зонды атомного силового микроскопа. В таком методе нанолитографии резервуар атомов-чернил находится на кончике сканирующего зонда, который, передвигаясь по поверхности, оставляет за собой линии, имеющие атомный размер. Серьезным недостатком метода является большая длительность процесса создания наноструктур.

Атомное перо [37] представляет собой нанометровое отверстие в экране, на который падает атомный пучок. Атомы, прошедшие через наноотверстие, создают на поверхности за экраном нанопятно. Перемещение наноотверстия позволяет создавать наноструктуры произвольного профиля. Число отверстий может быть очень большим ($\sim 10^7$), что дает возможность осуществлять параллельную нанофабрикацию атомов. На рисунке 5 показана одна из наноструктур, созданная с помощью атомного нанопера из атомов Сг [37]. Ширина этих наноструктур на полувысоте составляет 170 нм.

2.4. Атомная камера-обскура с нанометровым разрешением

Несмотря на многочисленность предложений по фокусировке атомных пучков лазерным излучением, данная проблема с экспериментальной точки зрения остается сложной. Основная трудность заключается в создании потенциала взаимодействия атома с электромагнитным полем, который по свойствам был бы близким к "идеальной" линзе для атомов.

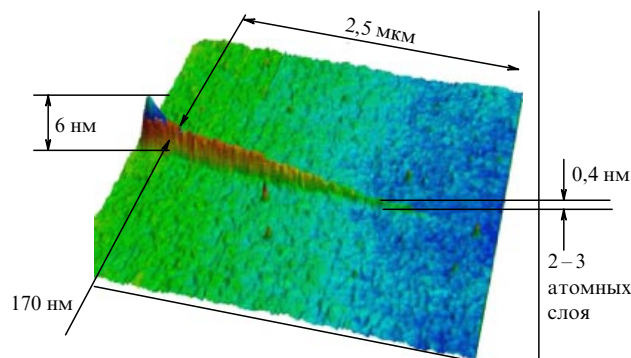


Рис. 5. Наноструктура из атомов Сг в виде полоски с переменной высотой, созданная атомным нанопером. Ширина наноструктуры 170 нм [36].

Нами [38] впервые экспериментально реализован иной подход к проблеме фокусировки и построения изображения в атомной оптике, основанный на хорошо известной идее камеры-обскуры, используемой как в световой оптике, так и в современной экспериментальной физике в тех случаях, когда создание фокусирующего потенциала затруднительно [39]. В оптике камера-обскура — это камера без линзы. Формирующее изображение свет проходит через отверстие, которое должно быть достаточно малым для получения четкого изображения.

Принципиальная схема эксперимента с атомной камерой-обскурой показана на рис. 6. Пучок атомов, который пропускается через набор отверстий в металлической маске, формирует, по аналогии с оптикой, "светящийся объект" с заданной геометрией. Атомы, прошедшие через отверстия в маске, распространяясь в вакууме по прямолинейным траекториям, подобно световым лучам, попадают на тонкую пленку с большим количеством отверстий конической формы, размещенную на расстоянии L от маски. Каждое отверстие пленки является для атомов камерой-обскурой, формирующей индивидуальное изображение объекта на поверхности подложки, находящейся на малом расстоянии l за пленкой. В такой геометрии на подложке создается набор уменьшенных примерно в $m = L/l$ раз изображений объекта, образованных напыленными на поверхность атомами. В эксперименте формирующий объект металлическая маска помещалась в непосредственной близости от атомного источника. В качестве тонкой пленки с

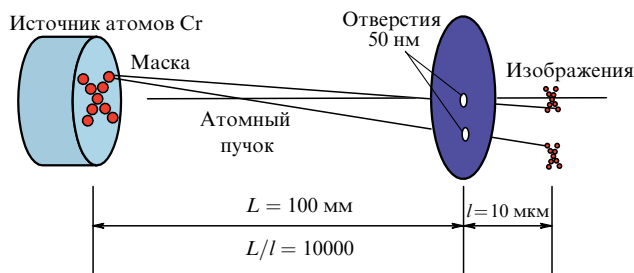


Рис. 6. Схема атомной камеры-обскуры. Пучок атомов Сг, пропускаемый через набор отверстий в металлической маске, формирует "светящийся объект" заданной геометрии. Атомы, проходя через отверстия в маске и распространяясь по прямолинейным траекториям в вакууме, попадают на тонкую пленку с отверстиями. Каждое отверстие пленки является для атомов камерой-обскурой, формирующей инвертированное изображение объекта на подложке.

отверстиями использовалась трековая мембрана с асимметричной структурой [40], имеющая толщину 5 мкм и диаметр отверстий $d = 20 - 1000$ нм.

В рассматриваемом эксперименте каждая из камер-обскур создает в плоскости поверхности подложки "точку" изображения радиусом $a = (d/2)(1 + 1/m)$. Приближение геометрической атомной оптики реализуется при следующем ограничении дифракционного размера для атомов с длиной волны де Бройля λ_{dB} : $1,22 (\lambda_{dB}/d) l \ll d(1 + 1/m)$. В таком случае изображение, являясь инвертированной копией объекта, уменьшенной в m раз, имеет разрешение порядка d , что позволяет создавать структуры нанометрового размера.

В эксперименте средняя скорость атомов Сг в пучке составляла примерно 900 м с^{-1} , что соответствует длине волны де Бройля $\lambda_{dB} = 0,08 \text{ Å}$. При такой длине волны дифракцией атомов в атомной камере-обскуре можно пренебречь.

На рисунке 7а,б представлены наноструктуры из атомов Сг на поверхности стекла, полученные с помощью атомной камеры-обскуры и "маски-объекта" в виде креста. Показаны участки подложки площадью 2×2 мкм (рис. 7а) и 800×800 нм (рис. 7б). Наноструктуры исследовались с помощью сканирующего атомно-силового микроскопа. Наряду с почти полностью сформированными изображениями креста, на рисунке видны также структуры с изображением только его части. Это происходит вследствие частичного блокирования атомов, формирующих изображения креста, что обусловлено непараллельностью осей различных отверстий трековой мембраны.

На рисунке 7б приведено детальное, наиболее полное изображение одного из крестов. Ширина наноструктур по основанию составляет примерно 110 нм, что соответствует прямолинейному прохождению атомов пучка через отверстия камер-обскур и определяется суммой их входного диаметра $d = 50$ нм и диаметра изображения отверстия $d_0 = 0,5 \text{ мм}/8000 = 62$ нм. Ширина на полувысоте составляет 70 нм.

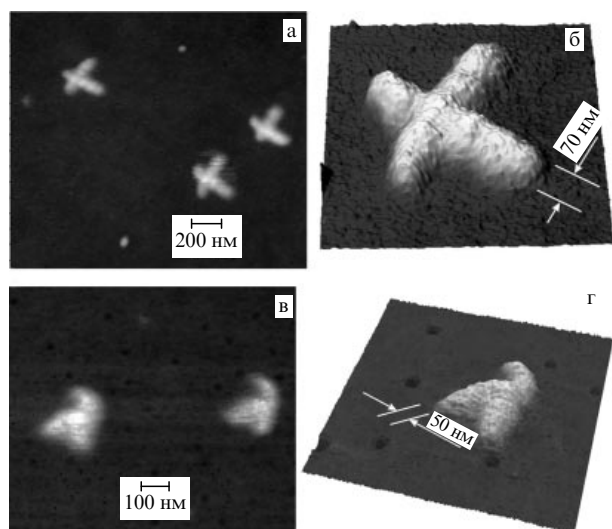


Рис. 7. Наноструктуры атомов Сг на поверхности стекла, полученные с помощью атомной камеры-обскуры и маски-объекта в виде креста: площадь участков подложки (а) 2×2 мкм, (б) 800×800 нм. Наноструктуры атомов Сг для маски-объекта в виде буквы λ : площадь участков подложки (в) 1×1 мкм, (г) 500×500 нм.

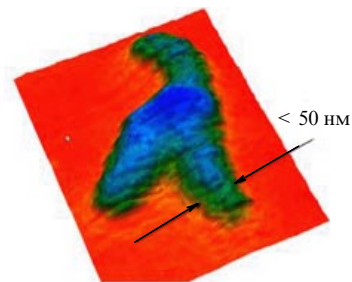


Рис. 8. Наноструктура из атомов Сг в виде буквы лямбда, являющейся символом Института спектроскопии РАН.

На рисунке 7в, г представлены результаты эксперимента с использованием маски в форме греческой буквы лямбда. Размеры этой маски меньше, чем маски типа "крест", что привело к увеличению доли полных, неинвертированных изображений. Как видно из рисунка, ширина образованных наноструктур на полувысоте составляет 50 нм.

Рисунок 8 показывает наноструктуру из атомов Сг в виде буквы лямбда, являющейся символом Института спектроскопии РАН.

3. Заключение

Исследованы подходы к нанотехнологии по принципу снизу – вверх, в которых создаваемый нанообъект "собирается" из индивидуальных атомов, молекул, биологических клеток и т.п. Возможность реализации технологии снизу – вверх появилась с развитием техники зондовой микроскопии. Однако с практической точки зрения методы, основанные на использовании сканирующих зондов, мало привлекательны, поскольку обладают низкой производительностью и высокой стоимостью. Альтернативным методом для нанотехнологии по принципу снизу – вверх является атомная оптика. В этом методе внутренние или внешние степени свободы индивидуальных атомов контролируются с нанометровой точностью лазерными полями, что позволяет создавать на поверхности структуры с нанометровой точностью.

Список литературы

1. Feynman R, <http://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html>
2. Eigler D M, Schweizer E K *Nature* **344** 534 (1990)
3. Berggren K K et al. *Science* **269** 1255 (1995)
4. Rempe G, Schleich W (Eds) *Appl. Phys. B* **60** (2–3, Special Issue) 129 (1995)
5. Balykin V I, Letokhov V S *Atom Optics with Laser Light* (Laser Sciences and Technology, Vol. 18) (Chur: Harward Acad. Publ., 1995)
6. Arimondo E, Bachor H -A (Eds) *Quantum Semiclass. Opt.* **8** (3, Special Issue) 495 (1996)
7. Meystre P *Atom Optics* (Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics, Vol. 33) (New York: AIP Press/Springer, 2001)
8. Meschede D, Mlynek J (Eds.) *Appl. Phys. B* **70** (5, Special Issue) (2000)
9. McClelland J J "Nanofabrication via atom optics", in *Handbook of Nanostructured Materials and Technology* (Ed. H Nalwa) Vol. 1 (Cambridge: Academic Press, 1999)
10. Balykin V I, Klimov V V, Letokhov V S "Atom nano-optics", in *Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology* (Eds M Rieth, W Schommers) Vol. 7 (Amsterdam: Elsevier, 2006) p. 1
11. Balykin V I, Letokhov V S *Opt. Commun.* **64** 151 (1987)
12. Балькин В И, Летохов В С *ЖЭТФ* **94** 140 (1988)

13. Bjorkholm J E et al. *Phys. Rev. Lett.* **41** 1361 (1978)
14. Bjorkholm J E et al. *Opt. Lett.* **5** 111 (1980)
15. Gallatin G M, Gould P L *J. Opt. Soc. Am. B* **8** 502 (1991)
16. McClelland J J, Scheinfein M R *J. Opt. Soc. Am. B* **8** 1974 (1991)
17. Prentiss M et al. *Appl. Phys. Lett.* **60** 1027 (1992)
18. Cohen J L, Dubetsky B, Berman P R *Phys. Rev. A* **60** 4886 (1999)
19. Sleator T et al. *Appl. Phys. B* **54** 375 (1992)
20. Timp G et al. *Phys. Rev. Lett.* **69** 1636 (1992)
21. McClelland J J et al. *Science* **262** 877 (1993)
22. McGowan R W, Giltner D M, Lee S A *Opt. Lett.* **20** 2535 (1995)
23. Gupta R et al. *Phys. Rev. Lett.* **76** 4689 (1996)
24. Celotta R J et al. *J. Appl. Phys.* **79** 6079 (1996)
25. Drodofsky U et al. *Microelectron. Eng.* **30** 383 (1996)
26. Mützel M, Haubrich D, Meschede D *Appl. Phys. B* **70** 689 (2000)
27. Bethe H A *Phys. Rev.* **66** 163 (1944)
28. Meixner J, Andrejewski W *Ann. Phys. (Leipzig)* **59** 3318 (1950)
29. Nomura Y, Katsura S *J. Phys. Soc. Jpn.* **10** 285 (1955)
30. Levitan Y J. *Appl. Phys.* **60** 1577 (1986)
31. Klimov V V, Letokhov V S *Opt. Commun.* **106** 151 (1994)
32. Balykin V I, Klimov V P, Letokhov V S *J. Phys. II (France)* **4** 1981 (1994)
33. Балькин В И, Климов В В, Летохов В С *Письма в ЖЭТФ* **59** 219 (1994)
34. Балькин В И, Климов В В, Летохов В С *Письма в ЖЭТФ* **78** 11 (2003)
35. Balykin V, Klimov V, Letokhov V *Opt. & Photon. News* **16** (3) 44 (2005)
36. Балькин В И, Миногин В Г, Руднев С Н *ЖЭТФ* **130** 784 (2006)
37. Балькин В И и др. *ЖЭТФ* (в печати)
38. Балькин В И и др. *Письма ЖЭТФ* **84** 544 (2006)
39. Li Y T et al. *Phys. Rev. E* **69** 036405 (2004)
40. Apel P Yu et al. *Nucl. Instrum. Meth. B* **209** 329 (2003)

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

Свойства и нанотехнологические применения нанотрубок

Ю.Е. Лозовик, А.М. Попов

1. Введение

В последнее десятилетие достигнут значительный прогресс в развитии наномеханики. В частности, продемонстрирована возможность манипуляции объектами нанометрового размера [1], рассмотрены принципиальные схемы наноэлектромеханических систем (НЭМС), в которых может быть реализовано управляемое движение нанообъектов [2]. Поиск нанообъектов, которые могут использоваться в качестве подвижных элементов НЭМС, является сейчас весьма актуальной задачей. Возможность произвольного [3, 4], контролируемого с помощью атомно-силового микроскопа [5, 6] относительного движения слоев в многослойных углеродных нанотрубках [7] и экстраординарные упругие свойства слоев углеродных нанотрубок [8–12] делают перспективным использование слоев углеродных нанотрубок в качестве элементов НЭМС. Предложен ряд наномеханизмов, основанных на относительном скольжении или вращении слоев нанотрубки: наноподшипник [13], наношестеренка [14], нанопереклюатель [15], нанореле [16, 17], гигагерцевый осциллятор [18, 19] и броуновский наномотор [20, 21]. Уникальные электронные свойства углеродных нанотрубок [22] находят применение в таких экспериментально реализованных электронных наноустройствах, как нанотранзисторы [23], нанодиоды [24], наномодулятор тока [25] и др. Более того, недавно соз-

даны наномоторы, основанные на относительном вращении слоев углеродных нанотрубок [26, 27]. В указанных нанорезисторе, нанореле и наномоторе слои нанотрубки являются одновременно и подвижными элементами НЭМС, и элементами электрической цепи. Недавно к этому ряду применений углеродных нанотрубок в НЭМС добавилось новое уникальное и перспективное применение, а именно было показано, что двухслойная нанотрубка (ДУНТ) может представлять собой пару с эффективной "винтовой резьбой" [28–32]. В связи с этим были предложены принципиальные схемы НЭМС, основанных на углеродных нанотрубках, устройство которых включает в себя пару "наноболт – наногайка": "нанодрель" для нанолокальной модификации поверхности [28–30, 32] и наноактуатор, в котором сила, направленная вдоль оси нанотрубки, преобразуется в относительное вращение ее слоев [17, 32, 33]. Согласно расчетам проводимость нанотрубки существенно изменяется при незначительном (на несколько долей ангстрема) относительном смещении ее слоев вдоль оси нанотрубки [34–36] или при относительном повороте слоев [37]. Это свойство нанотрубок мы предложили использовать в таких НЭМС, как переменный нанорезистор [28–30], нанодатчик натяжения [38] и электромеханический нанотермометр [17, 39].

Углеродные нанотрубки весьма перспективны для применения в НЭМС, основанных не только на относительном движении слоев нанотрубок, но и на изгибе нанотрубок. Среди таких НЭМС прежде всего следует отметить наноосцилляторы, в которых измерение частоты поперечных колебаний нанотрубки используется для измерения свойств системы. Так, например, по данным измерения частоты колебаний нанотрубки, закрепленной с одного конца, определена масса наночастицы и даже отдельной молекулы, находящихся на другом конце нанотрубки [11]; осуществлено наноустройство, в котором посредством измерения частоты колебаний нанотрубки, закрепленной с обоих концов, можно измерить силу, действующую на нанотрубку, с точностью 5×10^{-18} Н [40]. Кроме того, изготовлены нанопинцет, в котором захват наночастиц и манипуляция ими осуществляется с помощью изгиба концов двух нанотрубок электростатическими силами [41, 42] и ячейка памяти из двух пересекающихся нанотрубок [43].

Данный доклад посвящен НЭМС, основанным на углеродных нанотрубках с подвижными слоями. В разделе 2 описаны структура и свойства нанотрубок. В разделе 3 рассмотрены взаимодействие и относительное движение слоев нанотрубок. В разделе 4 обсуждаются способы управления движением слоев нанотрубок и режимы работы НЭМС. Раздел 5 посвящен принципиальным схемам и принципам работы НЭМС, основанных на углеродных нанотрубках. Наконец, в разделе 6 рассмотрено развитие методов нанотехнологии, которые могут использоваться для изготовления НЭМС на основе углеродных нанотрубок.

2. Структура и свойства нанотрубок

2.1. Структура однослойных нанотрубок

Однослойную углеродную нанотрубку (ОУНТ) можно представить как свернутую одиночную плоскость графита (графен). Структура ОУНТ определяется парой

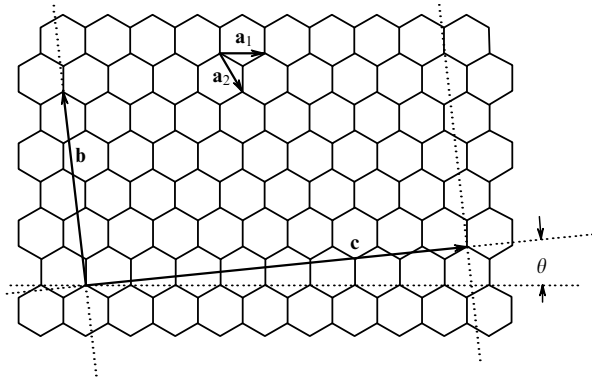


Рис. 1. Плоскость графита (графен), сворачиваемая в слой нанотрубки; $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$ — единичные векторы плоскости графита. Слой однозначно определяется вектором $\mathbf{c}$: длина окружности слоя становится равной $|\mathbf{c}|$. Величина вектора $\mathbf{b}$ определяет длину элементарной ячейки, θ — угол хиральности слоя.

целых чисел (n, m) — индексами хиральности, которые являются координатами вектора решетки графена $\mathbf{c} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$ (где $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$ — единичные векторы плоскости графена). Соответствующий вектору $\mathbf{c}$ отрезок при сворачивании фрагмента плоскости графена в ОУНТ становится ее окружностью (рис. 1) [22, 44]. Радиус R слоя определяется выражением

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

где $a_0 = 0,246$ нм — длина единичного вектора плоскости графита. Типичный радиус ОУНТ составляет величину порядка нескольких нанометров; наименьший полученный радиус ОУНТ — примерно 0,4 нм. Длина элементарной ячейки ОУНТ выражается как

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

где $\text{GCD}(u, w)$ — наибольший общий делитель чисел u и w . Угол хиральности θ , определяется как угол между векторами $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{c}$:

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

Так как плоскость графита имеет симметрию шестого порядка, только ОУНТ, определяемые векторами $\mathbf{c}$, лежащими внутри угла 60° , т.е. с $m > 0$ и $n > 0$, неэквивалентны. Однослойные углеродные трубки с индексами хиральности (n, n) — "кресло" и $(n, 0)$ — "зигзаг" являются нехиральными, а все остальные ОУНТ — хиральными. При этом ОУНТ с индексами хиральности (n, m) и (m, n) зеркально симметричны, т.е. имеют левоспиральную при $n > m$ и правоспиральную при $m > n$ структуру.

2.2. Электронные свойства нанотрубок

Как известно, лист графена имеет электронную структуру с линейным законом дисперсии в зоне проводимости и валентной зоне (т.е. эффективные массы электронных и дырочных возбуждений равны 0) и энергетической щелью, равной нулю. Сворачивание листа графена

приводит к конфайменту (складыванию) зон, в результате которого в зависимости от индексов хиральности возникают подзоны "поперечного квантования". В результате ОУНТ с индексами хиральности (m, n) являются металлическими, если выполняется условие $m + n = 3q$, где q — целое число [22], а в остальных случаях — полупроводниковыми.

2.3. Упругие свойства нанотрубок

Получены как ОУНТ [45, 46], так и многослойные углеродные нанотрубки (МУНТ) длиной вплоть до 30 мкм [47], содержащие несколько десятков слоев [7]. Многослойные углеродные нанотрубки имеют структуру из вложенных соосных слоев, аналогичную структуре графита, с расстоянием между слоями около 0,34 нм [7], близким к расстоянию между слоями графита. По этой причине графит и нанотрубки имеют схожие упругие свойства. Так, для графита экспериментальные значения модуля упругости для сжатия вдоль слоев составляет 1,24 ТПа [48], что примерно в пять раз больше модуля упругости стали.

Упругие свойства нанотрубок, включая их пластическую деформацию при больших нагрузках, подробно рассмотрены в обзоре [49], поэтому в данном докладе мы ограничимся кратким перечислением основных результатов. Многочисленные эксперименты дают значение модуля Юнга нанотрубок около 1 ТПа, а именно при измерении силы, необходимой для изгиба МУНТ, ОУНТ и связок ОУНТ, получены значения модуля Юнга $1,28 \pm 0,59$ ТПа [9], 1,2 ТПа [50] и $1,18 \pm 0,4$ ТПа [51] соответственно. Измерение силы, необходимой для растяжения нанотрубок, дает значение модуля Юнга 0,27–0,95 ТПа для МУНТ [3] и 0,32–1,47 ТПа для связок ОУНТ [52]. На основе анализа тепловых колебаний нанотрубок, закрепленных с одного конца, получены значения модуля Юнга $1,8 \pm 1,4$ ТПа для МУНТ [8] и 0,32–1,47 ТПа для связок ОУНТ [10]. Исследование электромеханических колебаний МУНТ, закрепленных с одного конца, показывает, что при уменьшении диаметра нанотрубок их модуль изгиба возрастает от 0,1 до 1 ТПа [11].

Экспериментальные значения модуля Юнга хорошо согласуются с теоретическими оценками. Значения модуля Юнга для различных ОУНТ, полученные в результате расчетов, основанных на теории функционала плотности, находятся в диапазоне 0,94–1,09 ТПа [53–57]. Значения модуля Юнга, близкие к 1 ТПа, получены также с помощью полуэмпирических методов [58–61].

3. Взаимодействие и относительное движение слоев нанотрубок

Сила, необходимая для относительного движения слоев нанотрубки, определяется выражением

$$F = F_f + F_w = \pi D \tau L_{ov} + \gamma \pi D + F_c, \quad (4)$$

где F_f — сила статического и динамического трения, F_w — сила Ван-дер-Ваальса, которая при телескопическом выдвигании внутреннего слоя втягивает его во внешний, D — диаметр подвижного слоя, L_{ov} — длина перекрытия слоев, τ — модуль сдвига слоев, включающий в себя динамический и статический модули сдвига,

γ — энергия взаимодействия слоев, приходящаяся на единицу площади поверхности перекрытия слоев, F_c — сила статического трения, связанная со взаимодействием края одного слоя и поверхности другого слоя. В результате исследований силы взаимодействия слоев с помощью атомно-силовой микроскопии [6] установлено, что значение энергии γ взаимодействия слоев для различных нанотрубок составляет от 22 до 33 мэВ на атом. Это значение согласуется с оценками, полученными из геометрических характеристик сплюснутых нанотрубок: $\gamma = 35 \pm 10$ мэВ на атом [62], и с результатами расчетов методом функционала плотности для различных нанотрубок: $\gamma = 18-21$ мэВ на атом [63] и $\gamma = 23-24$ мэВ на атом [12]. Такая энергия взаимодействия слоев соответствует значениям силы Ван-дер-Ваальса от 0,5 до 20 нН, в зависимости от диаметра подвижного слоя. Силы данного диапазона типичны для атомно-силовой микроскопии (см. обзор [64]), и, следовательно, можно управлять относительным движением слоев с помощью наноманипулятора.

В указанных выше экспериментах [6] не обнаружено диссипации энергии при относительном движении слоев и показано, что сила, необходимая для телескопического выдвижения внутреннего слоя, не зависит от длины перекрытия слоев. Эти результаты дают верхние оценки для динамического и статического модулей сдвига — 0,05 и 0,04 МПа соответственно. Экспериментальное значение модуля сдвига слоев графита составляет около 1 МПа [65]. Существенно меньшее значение модуля сдвига для слоев нанотрубок по сравнению с модулем сдвига слоев графита объясняется следующей причиной: слои графита всегда соизмеримы, в то время как слои нанотрубок могут быть как соизмеримыми, так и несоизмеримыми.

Слои нанотрубки соизмеримы, если отношение длин элементарных ячеек слоев b_1/b_2 является рациональной дробью. Теоретический анализ характеристик взаимодействия и относительного движения соизмеримых и несоизмеримых слоев нанотрубок проведен ниже на примере двухслойных углеродных нанотрубок (ДУНТ). В случае соизмеримых слоев ДУНТ является одномерным кристаллом с длиной элементарной ячейки, равной наименьшему общему кратному длин элементарных ячеек слоев.

Недавно предложена классификация ДУНТ с соизмеримыми слоями [66, 67]. Согласно этой классификации такие двухслойные нанотрубки образуют семейства. Все нанотрубки каждого семейства имеют одинаковые длины элементарных ячеек, расстояния между слоями и углы хиральности внутреннего и внешнего слоев. Данная классификация является одновременно классификацией возможных пар соизмеримых соседних слоев МУНТ и может быть использована для отбора таких пар, перспективных с точки зрения применения в НЭМС (например для отбора соседних слоев в наноактуаторе [33]). Таблица с полным списком всех возможных семейств ДУНТ с соизмеримыми слоями приведена в работе [66].

Для того чтобы исследовать характеристики относительного движения слоев нанотрубки, необходимо рассчитать зависимость энергии взаимодействия U двух соседних слоев от координат, которые описывают относительное положение слоев: угла ϕ относительного вращения слоев вокруг оси нанотрубки и длины z относительного перемещения слоев вдоль этой оси.

Удобно визуализировать потенциальный рельеф энергии взаимодействия слоев $U(z, \phi)$ в виде развертки цилиндрической поверхности. Преобразования симметрии функции $U(z, \phi)$ включают в себя все преобразования симметрии обоих слоев. Возможны четыре случая сочетания пар соседних слоев с принципиально различными потенциальными рельефами энергии их взаимодействия: 1) соизмеримые нехиральные слои, 2) соизмеримые слои, из которых хотя бы один хиральный, 3) несоизмеримые слои, 4) соизмеримые слои, из которых хотя бы один хиральный, а во втором имеются периодически расположенные дефекты атомной структуры слоя.

Для ДУНТ с соизмеримыми нехиральными слоями $((n, n)@(m, m))$ и $(n, 0)@(m, 0)$ получено выражение для разложения энергии взаимодействия слоев в ряд Фурье [68]:

$$U(z, \phi) = \sum_{M, K(\text{odd})=1}^{\infty} \alpha_K^M \cos\left(\frac{2\pi}{b} Kz\right) \cos\left(\frac{nm}{N} M\phi\right) \sin^2\left(\frac{\pi nm}{2N^2}\right) + \sum_{M, K(\text{even})=0}^{\infty} \beta_K^M \cos\left(\frac{2\pi}{b} Kz\right) \cos\left(\frac{nm}{N} M\phi\right), \quad (5)$$

где N — наибольший общий делитель n и m , b — длина единичной ячейки ДУНТ. Четные члены в разложении (5) присутствуют всегда, а нечетные — только в случае, когда оба отношения, n/N и m/N , нечетны. Согласно топологической теореме [69] критические точки энергии $U(z, \phi)$ взаимодействия слоев соответствуют относительным положениям слоев, для которых оси U_2 симметрии второго порядка обоих слоев совпадают. Оси U_2 , перпендикулярные главной оси слоя, проходят через эту ось и середину связи или центр шестиугольника структуры слоя. Элементарная ячейка функции $U(z, \phi)$ для ДУНТ с соизмеримыми нехиральными слоями содержит четыре критических точки: минимум, максимум и два седла. Описание относительных положений слоев, соответствующих критическим точкам, дано в работе [12].

Амплитуды гармоник в разложении (5) экспоненциально спадают с увеличением номеров гармоник M и K [69–71]. Поэтому энергия $U(z, \phi)$ взаимодействия слоев для ДУНТ с соизмеримыми нехиральными слоями может быть аппроксимирована только двумя первыми членами разложения (5):

$$U(z, \phi) = U_0 - \frac{\Delta U_\phi}{2} \cos\left(\frac{2nm}{N} \phi\right) - \frac{\Delta U_z}{2} \cos\left(\frac{4\pi}{b} z\right), \quad (6)$$

где U_0 — средняя энергия взаимодействия слоев, ΔU_ϕ и ΔU_z — барьеры для относительного вращения слоев и их скольжения вдоль оси ДУНТ соответственно. При этом U_0 , ΔU_ϕ и ΔU_z определяются с помощью интерполяции по значениям $U(z, \phi)$ в четырех критических точках. Полуэмпирические расчеты на примере нескольких десятков ДУНТ с соизмеримыми нехиральными слоями показывают, что энергия $U(z, \phi)$ может быть аппроксимирована выражением (6) с точностью около 1% [67]. Этот результат подтвержден данными расчетов методом функционала плотности для ДУНТ (5,5)@(10,10) с точностью около 5% [63].

Большинство ДУНТ с соизмеримыми нехиральными слоями имеет несовместимые вращательные симметрии

слоев. По этой причине для таких ДУНТ период по углу $\delta\phi = 2\pi m/N$ энергии $U(z, \phi)$ мал и, следовательно, мал барьер ΔU_ϕ для относительного вращения слоев (менее 0,005 мэВ на атом по расчетам методом функционала плотности [63] и менее 10^{-11} мэВ на атом по расчетам с использованием полумпирических потенциалов [67]). В этом случае энергия взаимодействия слоев приближенно определяется выражением

$$U(z, \phi) \approx U_0 - \frac{\Delta U_z}{2} \cos\left(\frac{4\pi}{b} z\right). \quad (7)$$

Исключением являются только ДУНТ (5,5)@(10,10) [12, 31, 63, 67, 71–73] и ДУНТ (9,0)@(18,0) [12, 67, 71], имеющие значительные барьеры для относительного вращения слоев. Потенциальные рельефы энергии $U(z, \phi)$ взаимодействия слоев для ДУНТ (5,5)@(10,10) и (6,6)@(11,11), имеющих совместимые и несовместимые вращательные симметрии слоев, показаны на рис. 2а и 2б соответственно. Отметим, что выражение (5) справедливо для любых физических величин, зависящих от относительного положения нехиральных соизмеримых слоев ДУНТ, в частности для проводимости.

Потенциальный рельеф для любых ДУНТ с соизмеримыми слоями, из которых хотя бы один хиральный, является весьма плоским. Этот факт объясняется тем, что из-за несовместимости винтовых симметрий слоев только очень высокие гармоники преобразования Фурье взаимодействия U_a между атомом одного слоя и другим целым слоем дают вклад в барьеры [70]. Например, барьер для относительного вращения слоев ДУНТ (8,2)@(16,4), рассчитанный на основе потенциала Леннарда–Джонса, составляет около 5×10^{-12} мэВ на атом, и это единственный обнаруженный пример, в котором барьер для относительного движения хиральных соизмеримых слоев превышает предел точности (!) вычислений [67]. Величина других барьеров для нескольких десятков рассмотренных ДУНТ с хиральными соизмеримыми слоями меньше точности вычислений [67]. Расчет на основе потенциала Креспи и Колмогорова [74] также показывает, что для всех рассмотренных ДУНТ с соизмеримыми слоями без дефектов, из которых хотя бы один хиральный, потенциальный рельеф является экстремально плоским [71]. Этот результат подтвержден с помощью расчетов методом функционала плотности для ДУНТ (8,2)@(16,4) [63].

В общем случае слой нанотрубки имеет винтовую симметрию (см., например, [75]), поэтому энергия взаимодействия слоев $U(z, \phi)$ также обладает винтовой симметрией. Следовательно, в потенциальном рельефе могут существовать долины, направленные по винтовой линии, аналогичные резьбе на боковой поверхности болта. Такие потенциальные рельефы далее мы называем рельефами типа резьбы. Двухслойные углеродные нанотрубки с потенциальными рельефами типа резьбы могут быть использованы в НЭМС в качестве пары наноболт–наногайка. К количественным характеристикам такой резьбы относятся потенциальные барьеры E_1 и E_2 для относительного движения слоев ДУНТ вдоль линии резьбы и для срыва резьбы (движения поперек резьбы) соответственно, а также пороговые силы для приведения слоев в относительное движение вдоль линии резьбы и для срыва резьбы. Качественно резьба может характеризоваться не только потенциальными

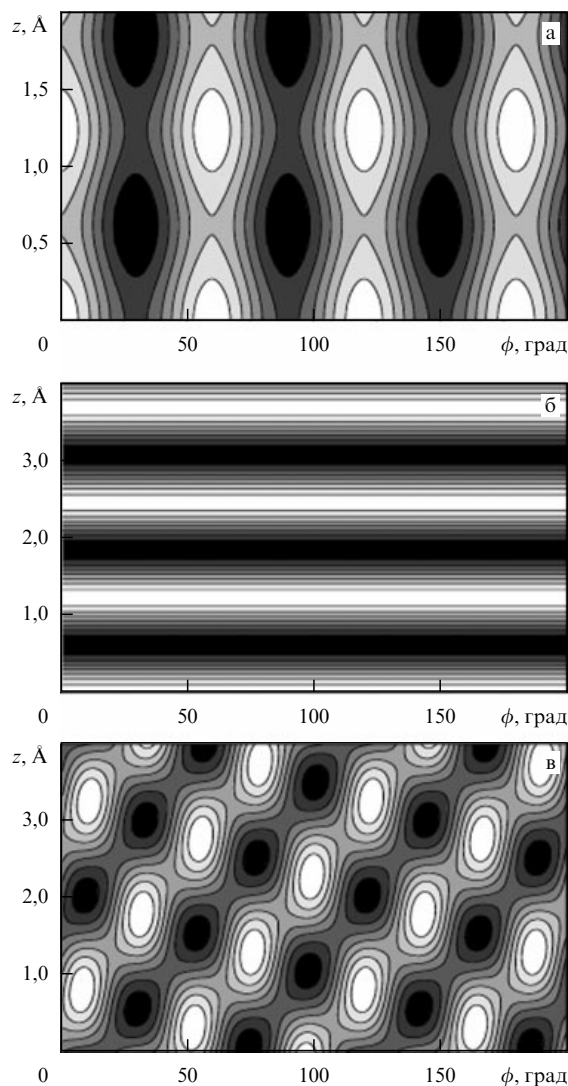


Рис. 2. Потенциальные рельефы энергии $U(z, \phi)$ взаимодействия слоев двухслойной нанотрубки как функция относительного перемещения z слоев вдоль оси нанотрубки и угла ϕ относительного вращения слоев вокруг оси для (а) ДУНТ (5,5)@(10,10), (б) ДУНТ (6,6)@(11,11), (в) ДУНТ с вакансией в каждой элементарной ячейке внутреннего слоя. Энергия измеряется от своего минимума. Эквипотенциальные линии на рис. а, б и в проведены с интервалами $4,0 \times 10^{-3}$, $1,0 \times 10^{-3}$ и $4,0 \times 10^{-3}$ мэВ на атом соответственно.

барьерами, но и их отношением $\beta = E_2/E_1$, которое называется относительной глубиной резьбы [28, 29]. Тем не менее было обнаружено, что в тех случаях, когда ДУНТ со слоями без дефектов могут иметь рельеф типа резьбы, характеристики этой резьбы не позволяют использовать такие ДУНТ в качестве пары наноболт–наногайка в НЭМС. Первоначально рельеф типа резьбы был найден для ряда ДУНТ с несоизмеримыми слоями, причем для упрощения один из слоев предполагался предельно коротким — имеющим длину равную длине одной элементарной ячейки слоя (обычно составляющей несколько нанометров или десятков нанометров) [31]. Однако детальное исследование показало, что для ДУНТ с несоизмеримыми слоями глубина резьбы потенциального рельефа и, следовательно, сила, необходимая для срыва резьбы, мала при любой длине слоев [28, 29]. Более того, глубина резьбы значительно варьируется с

изменением длины короткого подвижного слоя, а при некоторых значениях длины этого слоя возможно даже исчезновение рельефа типа резьбы [28, 29]. Таким образом, ДУНТ с несоизмеримыми слоями может быть использована в качестве пары наноболт–наногайка с желаемой глубиной резьбы только в случае, когда длина короткого слоя соответствует заданной с точностью до нескольких ангстрем. Изготовление такой ДУНТ весьма проблематично. Так как нехиральные слои имеют плоскости зеркальной симметрии, проходящие через главную ось слоя [68], потенциальный рельеф этих ДУНТ также имеет подобные плоскости зеркальной симметрии и, следовательно, не может быть рельефом типа резьбы [32, 76]. Как указано выше, в случае ДУНТ с соизмеримыми слоями, из которых хотя бы один является хиральным, потенциальный рельеф вследствие несовместимости симметрий слоев сильно сглажен, и поэтому все барьеры для относительного движения слоев экстремально малы. Кроме того, детальное рассмотрение симметрии потенциальных рельефов таких ДУНТ показывает, что большинство из них в принципе не могут иметь потенциальный рельеф типа резьбы [32, 76].

Как оказывается, наличие дефектов атомной структуры слоя кардинальным образом меняет ситуацию, а именно в результате появления дефектов даже первая гармоника фурье-преобразования взаимодействия U_a между атомом одного слоя и другим целым слоем дает ненулевой вклад в барьеры. Согласно ряду расчетов это приводит к увеличению соответствующих барьеров на 8–10 порядков (!) величины [32, 67, 76, 77]. Данное свойство ДУНТ с дефектами атомной структуры может быть использовано для получения ДУНТ с рельефом типа резьбы, характеристики которой позволяют использовать такую ДУНТ в качестве пары наноболт–наногайка в НЭМС. Было предложено создавать одинаковые искусственные дефекты в идентичных положениях в большом числе элементарных ячеек ДУНТ с соизмеримыми слоями [32, 67, 76, 77]. В этом случае любой барьер ΔU для относительного движения слоев определяется выражением $\Delta U = \Delta U_u N_u$, где ΔU_u — барьер для одной ячейки нанотрубки, N_u — число ячеек с дефектами. Таким образом, "атомный дизайн" структуры ДУНТ позволяет в случае достаточно длинных нанотрубок получать пару наноболт–наногайка с желаемыми (достаточно большими) значениями барьера, который предотвращает срыв резьбы. Было проведено теоретическое исследование влияния структуры дефекта "замененный атом" и параметров потенциала взаимодействия атома, соответствующего дефекту, с атомами слоя без дефектов на характеристики резьбы [32, 76]. Обнаружено, что относительная глубина резьбы $\beta = E_2/E_1$ (которая характеризует ее качество) слабо зависит от указанных величин и, следовательно, определяется структурой слоя без дефекта. Пример потенциального рельефа типа резьбы для ДУНТ с соизмеримыми нехиральными слоями и периодически расположенными дефектами приведен на рис. 26.

4. Нанoeлектромеханические системы: режимы работы и способы управления

4.1. Режимы работы нанoeлектромеханических систем
С целью исследования возможного использования пары наноболт–наногайка в НЭМС был проведен анализ

относительного движения коаксиальных слоев ДУНТ вдоль винтовой линии резьбы [28–30]. (Результаты этого анализа справедливы также для частных случаев винтового движения — относительного вращения слоев и их относительного скольжения вдоль оси ДУНТ.) Был рассмотрен случай, когда один слой является фиксированным, а другой — подвижным, а силы, действующие на подвижный слой, не вызывают его деформации и смещения его оси относительно оси фиксированного слоя. Например, это возможно в случае, когда на каждый атом подвижного слоя действует сила F_a , состоящая из двух компонент, одинаковых для каждого атома: силы F_z , направленной параллельно оси ДУНТ, и силы F_l , направленной по проходящей через атом касательной к окружности слоя. Легко показать, что в рассмотренном случае движение подвижного слоя с массой M относительно фиксированного слоя эквивалентно двумерному движению частицы с массой M в потенциальном поле энергии взаимодействия слоев $U(R\phi, z)$, где R — радиус подвижного слоя, под действием силы $F = (N_a F_z, N_a F_l)$. При этом движение слоя вдоль винтовой линии резьбы эквивалентно движению частицы по прямой.

Анализ показывает, что в случае, когда 1) барьер для срыва резьбы существенно больше барьера для относительного движения слоев вдоль линии резьбы, $E_2 \gg E_1$, 2) энергия теплового движения слоев существенно меньше барьеров для их относительного движения, $kT \ll E_1, E_2$ и 3) сила, действующая на подвижный слой, мала, $F_x \delta/2 \ll kT$ (где F_x — проекция силы F на линию резьбы, δ — расстояние между минимумами потенциального рельефа вдоль линии резьбы), относительное движение слоев вдоль линии резьбы является дрейфом и описывается уравнением Фоккера–Планка

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial n}{\partial x} B F_x, \quad (8)$$

где x — координата, определяющая относительное положение слоев вдоль линии резьбы, $n(x, t)$ — функция распределения вероятности относительного положения слоев, D — коэффициент диффузии,

$$D = \frac{1}{2} \Omega \delta^2 \exp \left(-\frac{U_1}{kT} \right), \quad (9)$$

B — подвижность,

$$B = \frac{\Omega \delta^2}{2kT} \exp \left(-\frac{U_1}{kT} \right), \quad (10)$$

Ω — предэкспоненциальный множитель в формуле Аррениуса для частоты перескока слоев между эквивалентными минимумами потенциального рельефа, находящимися на линии резьбы (по порядку величины Ω равен средней частоте относительных колебаний слоев вдоль линии резьбы). Отметим, что выполняется соотношение Эйнштейна $D = kTB$.

Режим работы НЭМС, основанных на относительном движении слоев нанотрубок, в случае, когда это движение описывается уравнением Фоккера–Планка, назовем стохастическим режимом [28–30]. Устойчивое направленное движение слоя в режиме работы Фоккера–Планка возможно тогда, когда среднее расстояние

$x_{dr} = BF_x t$, которое слой проходит вдоль линии резьбы за время t в результате дрейфа под действием силы F , больше, чем расстояние $x_{di} = \sqrt{2Dt}$, на которое он смещается вдоль этой линии в результате диффузии:

$$BF_x t \gg \sqrt{2Dt}. \quad (11)$$

Подставляя в условие (11) соотношение Эйнштейна $D = kTB$, получим, что стохастический режим имеет смысл использовать в НЭМС для времен работы

$$t > \frac{2k^2 T^2}{F_x^2 D} \quad (12)$$

и перемещений x_{dr} слоя вдоль линии резьбы в результате дрейфа

$$x_{dr} \gg \frac{2kT}{F_x}. \quad (13)$$

Подставляя в условие (13) максимальную силу $F_x \approx 2kt/\delta$, для которой относительное движение слоев адекватно описывается уравнением Фоккера–Планка, получим, что стохастический режим целесообразно использовать в НЭМС при $x_{dr} \gg \delta$, т.е. при нескольких десятках относительных перескоков слоя между минимумами потенциального рельефа вдоль линии резьбы. Такое перемещение слоя соответствует примерно одному повороту вокруг оси нанотрубки и смещению вдоль ее оси на несколько нанометров. Стохастический режим может использоваться в таких рассмотренных в разделе 5 НЭМС, как наномоторы и наноактуаторы.

Для сил, удовлетворяющих условию $F_x \delta/2 \gg kT$, стохастической составляющей в относительном движении слоев можно пренебречь. В этом случае движение оболочек является ускоренным и достаточно точно описывается уравнением движения. Режим работы НЭМС на основе относительного движения слоев нанотрубки, соответствующий таким силам, мы назовем динамическим. В этом режиме возможно контролируемое относительное перемещение слоев вдоль линии резьбы на любое расстояние. Такой режим работы может быть использован, например, в переменных нанорезисторах.

Силу F , приводящую в движение подвижный слой относительно неподвижного слоя, можно разложить на две составляющие: силу, направленную вдоль оси нанотрубки (сила 1-го типа), и силу, направленную по касательной к окружности подвижного слоя (сила 2-го типа). В случае, когда неровности потенциального рельефа не влияют на относительное движение слоев, тип относительного движения слоев соответствует типу приложенных сил. А именно, силы 1-го типа вызывают относительное скольжение слоев вдоль оси нанотрубки, а силы 2-го типа вызывают относительное вращение слоев. Однако если неровности потенциального рельефа оказывают существенное влияние на относительное движение слоев, то такое соответствие в общем случае отсутствует. Так, для потенциального рельефа типа резьбы относительное движение слоев вдоль винтовой линии резьбы может быть вызвано действием сил обоих типов (или их суперпозиции), приложенных к подвижному слою. Относительное движение слоев вдоль винтовой линии резьбы является одновременно и относительным вращением, и относительным скольжением вдоль

оси нанотрубки. Следовательно, сила 1-го типа вызывает не только относительное скольжение слоев вдоль оси нанотрубки, но и их относительное вращение, а сила 2-го типа — не только относительное вращение слоев, но и их относительное скольжение вдоль оси. В первом случае возможно создание НЭМС, работающих аналогично юле. Такой способ приведения слоев в относительное вращение может быть использован в описанных в разделе 5.6 наноактуаторах, состоящих из пары наноболт–наногайка и наноподшипников на основе нанотрубок. Во втором случае возможно изготовление НЭМС, работающих аналогично крану, в котором вращение рукоятки преобразуется в поступательное движение стержня.

4.2. Способы управления наноэлектромеханическими системами

Управление НЭМС, основанными на относительном движении слоев нанотрубок, может осуществляться с помощью: 1) наноманипулятора, 2) давления нагреваемого газа, заключенного между подвижным и фиксированным слоями, 3) магнитного поля, 4) электрического поля.

Возможность управления относительным движением слоев нанотрубок посредством наноманипулятора, присоединенного к атомно-силовому микроскопу, была продемонстрирована экспериментально [5, 6]. Недостатком этого способа управления движением НЭМС являются большие размеры наноманипулятора и системы управления движением наноманипулятора по сравнению с размерами самой НЭМС.

Возможность относительного движения слоев нанотрубок под действием давления нагреваемого газа, заключенного между подвижным и фиксированным слоями, показана с помощью моделирования методом молекулярной динамики [78]. В работе [78] предложено осуществлять быстрый нагрев газа внутри НЭМС с помощью импульсного лазера. Однако такой способ управления не может быть использован для непрерывной работы НЭМС, так как необходимо охлаждение НЭМС после каждого однократного приведения в движение подвижного слоя.

Для случая, когда подвижный слой металлический или заполненный внутри металлом, а остальные слои полупроводниковые, было предложено приводить в движение подвижный слой с помощью неоднородного магнитного поля [79]. Если такой слой движется со скоростью V в неоднородном магнитном поле B , то изменение магнитного потока Φ индуцирует в слое ток

$$i = -G \frac{d\Phi}{dt} = -GS \frac{dB}{dt} = -GSV \frac{dB}{dz}, \quad (14)$$

где G — проводимость, S — площадь сечения слоя. Энергия U_m слоя в магнитном поле определяется выражением

$$U_m = -\mu B = -SiB = -GS^2 V B \frac{dB}{dz}, \quad (15)$$

где $\mu = Si$ — магнитный дипольный момент слоя. Сила F_m , действующая на движущийся слой со стороны магнитного поля, выражается в виде

$$F_m = \frac{dU_m}{dz} = GS^2 V \left[\left(\frac{dB}{dz} \right)^2 + B \frac{d^2 B}{dz^2} \right]. \quad (16)$$

Однако пока отсутствуют эксперименты, результаты моделирования и численные оценки, доказывающие осуществимость этого способа управления движением слоев нанотрубок.

Движением внутреннего слоя, заполненного магнитным материалом, можно управлять с помощью магнитного поля. Разработан ряд методов получения МУНТ, содержащих внутри магнитные материалы [80–82]. Однако слои нанотрубок с магнитными материалами, полученные с помощью этих методов, имеют слишком много дефектов, что делает проблематичным относительно движение таких слоев.

Для управления движением подвижного слоя посредством электрического поля, необходимо зарядить этот слой или создать слой, имеющий электрический дипольный момент. Было высказано предположение, что подвижный слой может быть заряжен в результате допирования [18, 19]. Согласно расчетам валентный электрон изолированного атома калия в металлофуллерене $K@C_{60}$ полностью переносится на фуллерен C_{60} [83]. Аналогичный перенос заряда с атомов металла на нанотрубку происходит также в случае, когда металлофуллерены находятся внутри одностенной нанотрубки [84]. В наноэлектромеханической системе, основанной на таких нанотрубках, может происходить дальнейший перенос заряда на присоединенные к нанотрубке электроды. Таким образом атомы металла, заключенные в нанотрубке, могут становиться ионами, и внутренний слой, содержащий атомы металла, может приводиться в движение с помощью электрического поля [85]. Предложенная в [85] технология получения таких слоев, основанная на отжиге нанотрубки с металлофуллеренами внутри, позволяет получать только очень короткие слои с неконтролируемой длиной [86].

Согласно расчетам электростатические потенциалы на открытых и закрытых колпачками концах ОУНТ существенно различаются [87]. Следовательно, если слой сделать открытым с одного конца и закрытым с другого, то он будет обладать дипольным моментом. Расчеты распределения заряда показали появление дипольного момента при химической адсорбции молекул Br_2 [88] и H_2O [89] на краю одностенных нанотрубок. Более того, знак заряда, перемещенного к краю, зависит от того, какие атомы (доноры или акцепторы электронов) адсорбированы на открытых краях нанотрубки. Поэтому мы предлагаем увеличивать дипольный момент слоя за счет адсорбции доноров и акцепторов заряда на противоположных открытых краях слоя. Управлять движением такого слоя можно с помощью неоднородного электрического поля.

Электрические дипольные моменты были рассчитаны полуэмпирическим методом молекулярных орбиталей на примере ОУНТ (5,5) длиной 3,15 нм для двух случаев химической модификации концов нанотрубок [90]. В первом случае один конец нанотрубки закрывался колпачком, а на всех свободных связях открытого конца адсорбировались доноры электронов. Во втором случае оба конца нанотрубки были открыты, причем на всех свободных связях одного конца были адсорбированы доноры электронов, а на всех свободных связях другого — акцепторы электронов. В качестве доноров и акцепторов электронов выбирались атомы водорода и фтора соответственно. Наши расчеты показали, что электрические дипольные моменты слоев составляют

$4,536 \times 10^{-29}$ и $7,397 \times 10^{-29}$ Кл м для первого и второго случаев соответственно. Возможность управления с помощью неоднородного электрического поля движением НЭМС на основе нанотрубок, включающих слоидиполи, была показана на примере гигагерцевого осциллятора [90] (см. раздел 5.5).

5. Наноэлектромеханические системы, основанные на движении слоев нанотрубок

5.1. Наноподшипники и наномоторы

Идея о том, что МУНТ могут являться идеальными наноподшипниками с полным отсутствием износа [91], была высказана вскоре после открытия нанотрубок. С помощью моделирования методом молекулярной динамики была исследована диссипация энергии при работе наноподшипников на основе ДУНТ. Например, для наноподшипников на основе ДУНТ (9,9)@(14,14) и (9,9)@(22,4) с расстоянием между слоями около 3,4 Å при температуре 300 К и угловой скорости $3,1 \times 10^{11} \text{ с}^{-1}$ значения диссипации энергии за один оборот составляют 3,3 и 3,7 мэВ на атом соответственно [92]. Обнаружено, что скорость диссипации энергии увеличивается с возрастанием температуры и уменьшается с увеличением расстояния между слоями ДУНТ [13]. В спектре наноподшипников обнаружены низкочастотные продольные, дыхательные и скручивающие колебания слоев, средне-частотные колебания, соответствующие изменению углов между связями, и высокочастотные колебания, соответствующие изменению длин связей [13]. Все эти колебания дают вклад в диссипацию энергии.

Наноподшипники на основе МУНТ использованы в недавно изготовленных наномоторах [26, 27]. В обоих наномоторах металлическая пластинка (ротор) размером 200–500 нм присоединялась к середине подвижного слоя МУНТ, закрепленного между электродами (рис. 3). Управляющие электроды статора располагались вокруг МУНТ. Емкость такой системы, а следовательно, и соответствующая электростатическая энергия зависят от угла поворота пластинки, прикрепленной к внешнему слою МУНТ. Поэтому напряжение, приложенное к пластинке и электродам статора, создает момент электростатической силы, действующий на подвижный слой, тем самым заставляя его вращаться.

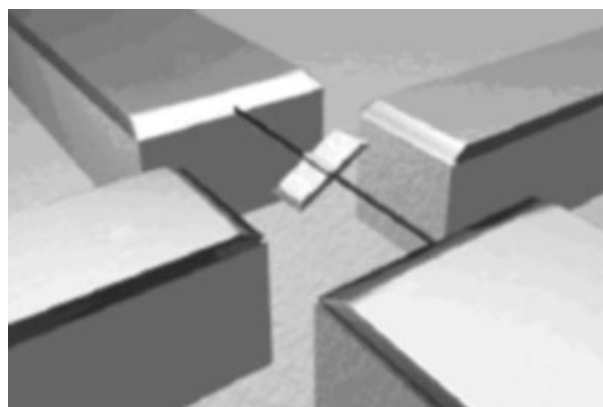


Рис. 3. Схема наномотора, основанного на относительном вращении слоев углеродной нанотрубки [26].

В первом из реализованных наномоторов пластинка присоединялась к внешнему слою МУНТ [26]. Чтобы получить возможность вращать этот слой, часть его в области между электродами ротора и пластинкой была разрушена посредством приложения к пластинке электростатической силы. В данной конструкции наномотора внутренние слои являются статором, а внешний слой служит ротором. Для приведения ротора во вращение к трем электродам статора и ротору были приложены напряжения $V_1 = V_0 \sin(\omega t)$, $V_2 = V_0 \sin(\omega t - \pi)$, $V_3 = V_0 \sin(2\omega t + \pi/2)$ и $V_r = -V_0$ соответственно.

Позднее был изготовлен наномотор с усовершенствованной конструкцией [26, 27]. При изготовлении этого наномотора 5–10 внешних слоев МУНТ в середине области между электродами ротора удалялись с помощью омического нагрева. После этого металлическая пластинка присоединялась к середине внешнего из сохранившихся слоев. В данной конструкции наномотора внутренние слои являются ротором, а участки внешних слоев, сохранившиеся у концов нанотрубки, — статором. При этом колпачки внешних слоев (удаленных в середине нанотрубки) препятствуют смещению подвижного слоя вдоль оси наномотора.

5.2. Нанореле и ячейка памяти

Недавно предложены нанореле, основанные на относительном движении слоев углеродных нанотрубок [16, 17]. Возможные схемы нанореле показаны на рис. 4. В таких нанореле ДУНТ присоединена к электроду 3. Подвижный внутренний слой 1 ДУНТ телескопически выдвигается из внешнего слоя 2 под действием электростатической силы F_e и притягивается к электроду 4 вандер-ваальсовой силой F_a взаимодействия между внутренним слоем и электродом 4 (включение нанореле). Внутренний слой втягивается обратно во внешний вандер-ваальсовой силой F_w взаимодействия между внутренним и внешним слоями (выключение нанореле). Второй электрод может быть либо металлическим (рис. 4а) [16], либо также являться однослойной углеродной нанотрубкой (рис. 4б) [17]. Предложена также схема

нанореле с третьим, управляющим электродом, сделанным из однослойной углеродной нанотрубки (рис. 4в) [17].

Как указано в разделе 3, в случае, когда внутренний подвижный слой первого электрода является нехиральным и соизмеримым с внешним слоем, в балансе сил, определяющих работу нанореле, необходимо также учитывать силу статического трения F_f , препятствующую относительному движению слоев. Для относительного движения несоизмеримых и соизмеримых хиральных пар слоев первого электрода силой F_f можно пренебречь. Условием, позволяющим системе работать в качестве реле, является бистабильность — существование двух минимумов потенциальной энергии. Анализ баланса сил во время работы нанореле показывает, что для нанореле со вторым металлическим электродом (рис. 4а) $F_a > F_w$, следовательно, оба минимума потенциальной энергии существуют в отсутствие управляющего напряжения [16, 17]. Такое нанореле может быть использовано в качестве ячейки энергонезависимой памяти для любой пары слоев первого электрода. Память, состоящая из таких ячеек, показана на рис. 4г. Для нанореле, основанного на несоизмеримой ДУНТ (8,2)@(12,8), со схемой, представленной на рис. 4а, были рассчитаны напряжения включения и выключения (± 3 В) и время переключения (10^{-11} с), что соответствует рабочей частоте 100 ГГц [16].

Нанореле, у которого оба электрода выполнены из углеродных нанотрубок, обладает рядом преимуществ по сравнению с нанореле, у которого второй электрод — нанопровод из металла. Использование нанотрубок в качестве электродов позволяет, во-первых, уменьшить размеры нанореле, во-вторых, достичь большей однородности размеров и характеристик поверхности электродов. Для нанореле со вторым электродом — нанотрубкой $F_a < F_w$, следовательно, для несоизмеримых и соизмеримых хиральных пар слоев первого электрода (в отсутствие силы трения F_f) нанореле может находиться в положении "включено" только в случае, когда подается управляющее напряжение [17]. Такое нанореле перспек-

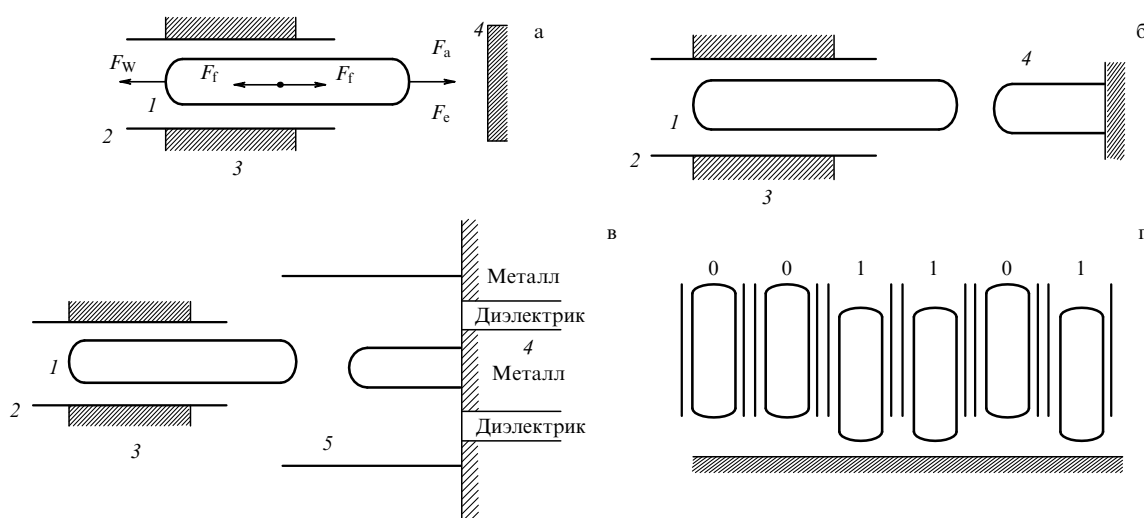


Рис. 4. Схемы электромеханических нанореле на основе ДУНТ (в положении "включено"): (а) нанореле со вторым плоским металлическим электродом, (б) нанореле со вторым электродом — углеродной нанотрубкой, (в) нанореле с управляющим электродом — углеродной нанотрубкой; 1 — подвижный внутренний слой, 2 — фиксированный внешний слой, 3 и 4 — электроды. (г) Пример устройства памяти из ячеек на основе ДУНТ.

тивно для использования в качестве ячейки оперативной памяти. Согласно оценкам, для нанореле со вторым и управляющим электродами, сделанными из нанотрубок и имеющими минимально возможные радиусы, напряжения включения и удержания во включенном состоянии составляют 6 и 4,8 В соответственно [17].

Для ДУНТ со соизмеримыми нехиральными слоями, в которых сила трения F_f существенна, можно подобрать длину внешнего слоя таким образом, чтобы выполнялось условие $F_a + F_f > F_w$. В этом случае нанореле со вторым электродом — нанотрубкой может быть использовано также в качестве ячейки постоянной памяти. Согласно расчетам, нанореле со вторым электродом — нанотрубкой и первым электродом на основе ДУНТ (5,5)@(10,10) может быть бистабильным в отсутствие управляющего напряжения, если длина l_{ov} перекрытия слоев ДУНТ (5,5)@(10,10) превышает критическое значение $l_c = 4$ нм [17]. Однако для адекватной работы нанореле в качестве ячейки энергонезависимой памяти недостаточно условия бистабильности $l_{ov} > l_c$, так как потенциальный барьер ΔU , разделяющий положения "включено" и "выключено", может быть преодолен в результате тепловой диффузии внутреннего слоя. Вероятность p этого события определяется формулой Аррениуса $p = \Omega \exp(-\Delta U/kT)$, где Ω — предэкспоненциальный множитель. Согласно результатам моделирования методом молекулярной динамики переориентаций оболочек наночастицы $C_{60}@C_{240}$, предэкспоненциальный множитель Ω на порядок величины больше, чем частота малых колебаний вблизи положения равновесия [93, 94]. Зависимость времени жизни $t = p^{-1}$ в положении "включено" от длины l_{ov} перекрытия слоев, рассчитанная для нанореле со вторым электродом — нанотрубкой и первым электродом на основе ДУНТ (5,5)@(10,10), приведена на рис. 5 [17]. Этот рисунок показывает возможность использования нанореле со вторым электродом — нанотрубкой в качестве ячейки энергонезависимой памяти.

5.3. Нанорезисторы

Согласно расчетам проводимость ряда углеродных наносистем, таких, как фуллерен, помещенный между

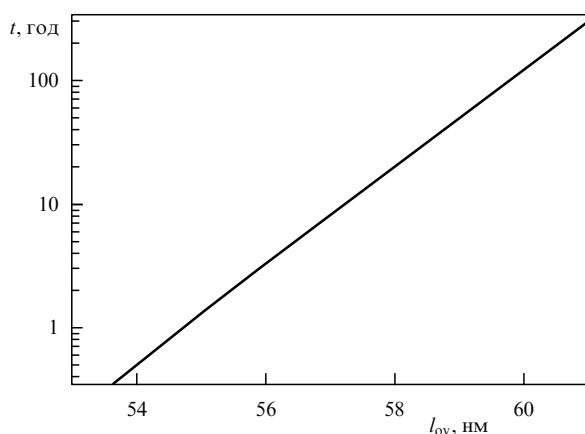


Рис. 5. Зависимость времени жизни t в положении "включено" при температуре 300 К от длины l_{ov} перекрытия слоев, рассчитанная для нанореле со вторым электродом — нанотрубкой (5,5) и первым электродом на основе ДУНТ (5,5)@(10,10).

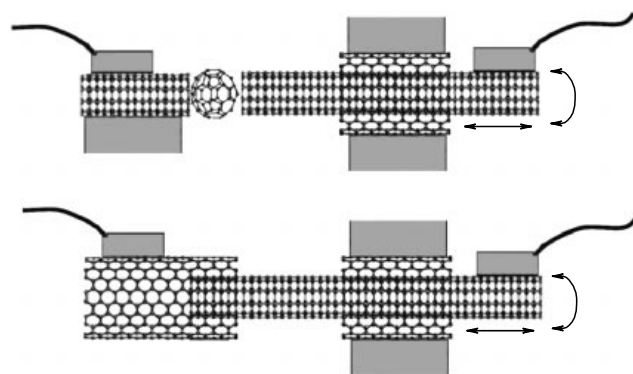


Рис. 6. Принципиальные схемы нанорезисторов, основанных на углеродных нанотрубках.

двумя ОУНТ [95], и ДУНТ с телескопическими выдвинутыми слоями [34–37], может изменяться на несколько порядков величины при относительном смещении частей наносистемы на расстояние около 1 Å. Мы предлагаем управлять относительным смещением частей обеих этих наносистем и, следовательно, проводимостью нанорезистора с помощью наноактуатора на основе ДУНТ [28–30]. В частности, возможно использование пары наноболт–наногайка для преобразования силы, направленной вдоль оси, во вращение проводящего слоя или силы, создающей момент вращения, в скольжение этого слоя вдоль оси. Принципиальные схемы нанорезисторов, основанных на указанных выше наносистемах, показаны на рис. 6.

5.4. Электромеханический нанотермометр

Мы предложили электромеханический нанотермометр, концепция которого основана на взаимодействии и относительном движении слоев углеродных нанотрубок, а измерение температуры осуществляется с помощью измерения проводимости [17, 39]. Относительное положение слоев нанотрубки изменяется при изменении температуры в результате относительных тепловых колебаний слоев. Вероятность $p(z)$ относительного смещения слоев на расстояние z вдоль оси нанотрубки зависит от энергии взаимодействия слоев $U(z)$ как $p(z) \sim \exp(-U(z)/kT)$. Полная проводимость нанотрубки при температуре T с учетом тепловых колебаний слоев определяется следующим выражением:

$$G_{\text{tot}}(T) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} G(z, T) \exp(-U(z)/kT) dz}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-U(z)/kT) dz}. \quad (17)$$

Для обеспечения работы электромеханического нанотермометра, основанного на взаимодействии слоев углеродной нанотрубки, должны выполняться следующие условия: проводимость $G(z, T)$ слабо зависит от температуры при фиксированном относительном положении слоев (условие А); проводимость $G(z, T)$ существенно зависит от координаты z , определяющей относительное положение слоев (условие Б); характерная амплитуда тепловых колебаний слоев достаточно велика для того, чтобы тепловые колебания давали основной вклад в зависимость проводимости от температуры (условие В), но достаточно мала для того, чтобы относительные смещения слоев не приводили к нарушению работы нанотермометра (условие Г).

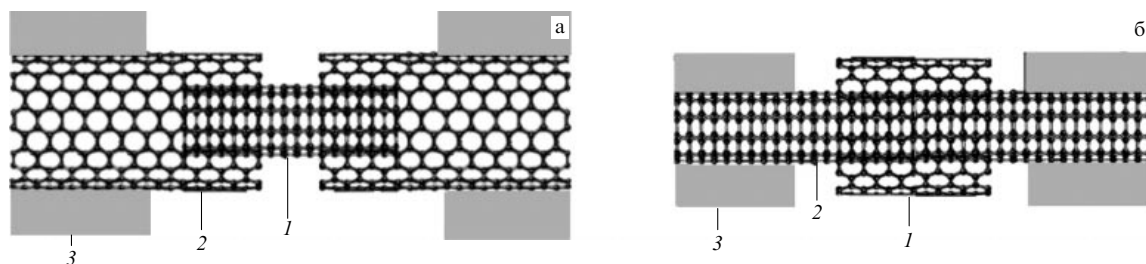


Рис. 7. Схемы электромеханических нанотермометров на основе ДУНТ: (а) телескопический нанотермометр с подвижным внутренним слоем, (б) нанотермометр с подвижным челноком из внешнего слоя; 1 — подвижный слой, 2 — фиксированный слой, 3 — электроды.

Возможные схемы электромеханического нанотермометра показаны на рис. 7. Реальность создания такого нанотермометра рассмотрена нами на примере ДУНТ (6,6)@(11,11). Проводимость ДУНТ (6,6)@(11,11) существенным образом зависит от относительного положения слоев для обеих приведенных на рис. 7 схем нанотермометра [35]. Следовательно, выполняется условие Б. Согласно результатам эксперимента проводимость однослойных нанотрубок слабо зависит от температуры при $T > 50$ К [97]. Расчеты показывают слабую температурную зависимость проводимости ДУНТ при $T > 100$ К [39, 96]. Таким образом, выполняется также условие А.

Зависимости проводимости $G(z)$ и энергии взаимодействия слоев $U(z)$ от относительного смещения слоев z определяются симметрией ДУНТ (6,6)@(11,11). Эти зависимости имеют общие свойства: их периоды и экстремумы совпадают. Кроме того, вследствие несовместимости вращательных симметрий слоев как проводимость, так и энергия взаимодействия слоев слабо зависят от угла относительного поворота слоев. Так как адекватная работа нанотермометра предполагает отсутствие диффузионного движения короткого слоя относительно длинного слоя, интегрирование в уравнении (17) можно провести только вблизи минимума энергии взаимодействия слоев. В этой области зависимость (7) энергии взаимодействия слоев от их относительного положения можно аппроксимировать выражением

$$U(z') = U_1 + \frac{\pi \Delta U_z}{b^2} z'^2, \quad (18)$$

где z' — смещение подвижного слоя относительно положения, соответствующего минимуму энергии взаимодействия слоев, U_1 — значение энергии взаимодействия слоев, соответствующее минимуму. Так как экстремумы зависимостей энергии взаимодействия слоев $U(z')$ и проводимости $G(z')$ совпадают, мы аппроксимировали зависимость $G(z')$ для малых смещений z' как

$$G(z') = G_1(T) (1 + \gamma z'^2), \quad (19)$$

где G_1 — значение проводимости, соответствующее минимуму энергии взаимодействия слоев. Значение параметра γ , оцененное из зависимости $G(z')$, приведенной на рис. 3 работы [35], составляет $\gamma \sim 850 \text{ \AA}^{-2}$ для перекрытия слоев 2,45 нм и схемы нанотермометра, представленной на рис. 7а.

Подставив (18) и (19) в выражение (17), мы получили следующее соотношение для зависимости полной про-

водимости нанотермометра от температуры:

$$G(T) = G_1(T) \left(1 + \frac{\gamma b^2 k T}{\pi \Delta U_z} \right) = G_1(T) (1 + HT). \quad (20)$$

Согласно результатам расчета методом функционала плотности величина барьера составляет $\Delta U_z = 1,96$ эВ при перекрытии слоев 2,45 нм [12]. Таким образом, при температуре $T = 300$ К величина $HT \approx 140$, что означает выполнение условия В.

Условие Г выполняется в случае, когда смещение d подвижного слоя в результате диффузии оказывается меньше, чем расстояние L_e между подвижным слоем и электродом,

$$d = \sqrt{2Dt} < L_e, \quad (21)$$

где D — коэффициент диффузии для подвижного слоя, t — время работы нанотермометра. Коэффициенты диффузии для относительного движения слоев ДУНТ недавно были рассчитаны с помощью метода функционала плотности [98]. Используя результаты этих расчетов для ДУНТ (6,6)@(11,11), мы получили, что длина между электродами для нанотермометра, который может проработать без сбоя около 100 лет, составляет около 40 нм для обеих, приведенных на рис. 7, схем. Таким образом, длина предложенного нанотермометра фактически определяется длиной, необходимой для присоединения электродов к нанотрубке, и его можно использовать для нанолокальных измерений температуры. Нанотермометр можно откалибровать с помощью термпары, и поскольку он основан на измерении проводимости, то может быть достигнута такая же точность измерений, как и для термпары (точность измерения при комнатной температуре для термпар медь — константан и хромель — алюминий составляет 0,1 К).

5.5. Гигагерцевый осциллятор

На основе МУНТ можно изготовить наномеханическое устройство, в котором периодическое движение происходит с очень высокой частотой — порядка 1–100 ГГц [85, 78]. Такие устройства, названные гигагерцевыми осцилляторами, предлагается использовать, в частности, в наноактуаторах [18, 19]. Схема и принцип действия гигагерцевого осциллятора показаны на рис. 8. Сила Ван-дер-Ваальса F_W , которая при телескопическом движении внутреннего слоя втягивает его во внешний, существенно зависит от относительного положения слоев только в случае, когда расстояние между краями

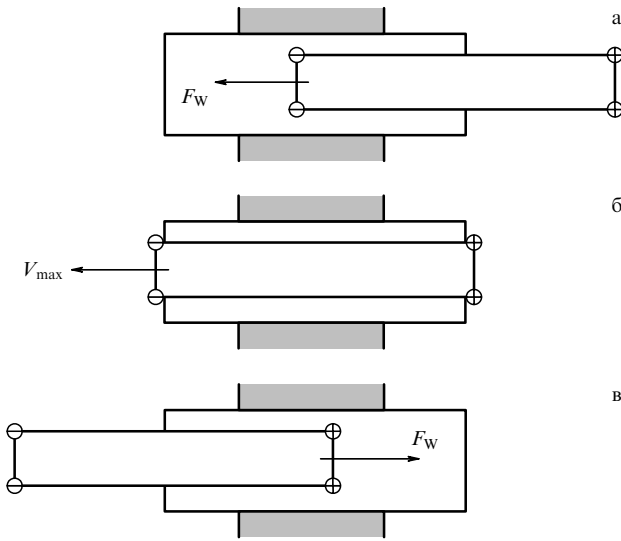


Рис. 8. Последовательные положения слоев гигагерцевого осциллятора в течение половины периода колебаний: (а) и (в) максимальное телескопическое выдвижение внутреннего слоя, сила Ван-дер-Ваальса F_W втягивает внутренний слой во внешний; (б) внутренний слой проходит по инерции с максимальной скоростью $V_{\max}$ положение с минимальной потенциальной энергией.

слоев имеет порядок межслойного расстояния. Поэтому в стандартной теории гигагерцевого осциллятора зависимость силы F_W от расстояния x между центрами слоев можно аппроксимировать следующим выражением [18, 19]:

$$F_W(x) = \begin{cases} F_W, & |x| > |L-l|/2, \\ 0, & |x| < |L-l|/2, \\ 0, & |x| > |L+l|/2, \end{cases} \quad (22)$$

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. 9. В системах с таким потенциалом отсутствует собственная частота малых колебаний, а частота колебаний с большой амплитудой (которые предполагается использовать в НЭМС) сильно зависит от амплитуды. По этой причине для того, чтобы частота колебаний гигагерцевого осциллятора на основе нанотрубки оставалась неизменной, необходимо поддерживать постоянную амплитуду этих колебаний. Период колебаний T определяется выраже-

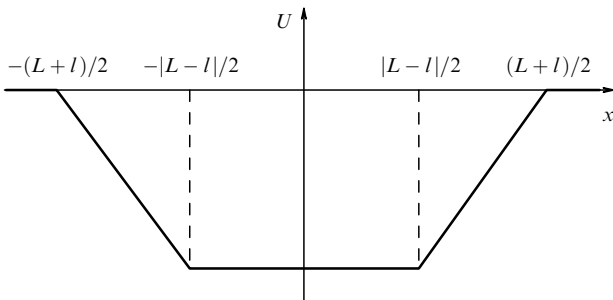


Рис. 9. Схематическое изображение зависимости потенциальной энергии U осциллятора от расстояния x между центрами слоев.

нием

$$T = 2(t_{\text{in}} + t_{\text{out}}) = 2[(L-l) + 4s] \sqrt{\frac{m}{2F_W s}}, \quad (23)$$

где m — масса 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 от одного конца внешнего слоя до другого, $t_{\text{out}} = 2\sqrt{2ms/F_W}$ — время движения внутреннего слоя, когда один его конец находится вне внешнего слоя.

Характеристики гигагерцевых осцилляторов подробно исследованы с помощью моделирования методом молекулярной динамики [79, 99–106]. В частности, показано, что в результате динамического трения происходит диссипация энергии колебаний, свободные колебания осциллятора совершаются с увеличивающейся со временем частотой и затухают за время порядка нескольких наносекунд [99, 100, 105] с добротностью $Q = \Delta E/E \sim 100-1000$, где E и ΔE — соответственно энергия колебаний осциллятора и потери этой энергии за период [104, 105]. Анализ результатов моделирования затухающих колебаний осциллятора показал, что зависимость силы динамического трения от скорости V внутреннего слоя можно аппроксимировать как $F = -aV - b \text{sign}(V) V^2$ [106]. Тогда за один период сила трения совершает работу

$$A_f = -2aV_{\max}^2 \left(\frac{t_{\text{out}}}{3} + t_{\text{in}} \right) - 2bV_{\max}^3 \left(\frac{t_{\text{out}}}{4} + t_{\text{in}} \right), \quad (24)$$

где $V_{\max} = \sqrt{2F_W s/m}$ — максимальная скорость внутреннего слоя [90].

Возможность компенсировать диссипацию энергии рассмотрена в случае, когда движение внутреннего слоя осциллятора управляется внешней гармонической силой $F(t) = F_0 \cos \omega t$, направленной вдоль оси слоя, причем ω соответствует частоте желаемых колебаний осциллятора [90]. Работа A_c силы $F(t)$ за период T определяется выражением

$$A_c = \frac{4F_W F_0}{m\omega^2} \cos \left(\frac{\omega t_{\text{in}}}{2} \right), \quad (25)$$

где $\omega = 2\pi/T$ — круговая 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 :

$$F_0 = \frac{ms\omega^2}{4Q \cos(\omega t_{\text{in}}/2)}. \quad (26)$$

Анализ выражения (26) показал, что F_0 минимальна для слоев с равной длиной, $L = l$. Частота колебаний в случае равных длин слоев выражается как $\omega = (\pi/2) \sqrt{F_W/2ms}$, соотношение для работы силы трения (24) принимает вид

$$A_f = -\frac{8a\sqrt{2F_W s}}{3\sqrt{m}} - \frac{4bF_W s^2}{m}, \quad (27)$$

а выражение (26) для амплитуды управляющей силы сводится к

$$F_0 = \frac{\pi^2 F_W}{32Q}. \quad (28)$$

Рабочие характеристики гигагерцевого осциллятора оценены на примере осциллятора на основе ДУНТ (5,5)@(10,10) с равной длиной слоев $L = l = 3,15$ нм (для такого осциллятора частота колебаний с амплитудой $s = 1$ нм составляет около 400 ГГц). Согласно расчетам из первых принципов энергия взаимодействия слоев в ДУНТ (5,5)@(10,10) составляет 23,83 мэВ на атом внешнего слоя [12], что соответствует значению силы, втягивающей внутренний слой, $F_W = 625$ пН. Для такого значения силы F_W , добротности $Q = 1000$ амплитуда управляющей силы составляет $F_0 = 0,193$ пН.

В частности, управляющая гармоническая сила может быть приложена к слою-диполю с помощью неоднородного электрического поля. Результаты расчетов дипольных моментов слоев-диполей, приведенные в разделе 4.2, использованы для оценки напряжения, необходимого для создания такого неоднородного электрического поля, которое будет управлять движением слоя-диполя, поддерживая стабильную частоту осциллятора [90]. Получено, что для сферического конденсатора с диаметром обкладок около 100 нм и расстоянием между обкладками 10 нм можно управлять движением слоя-диполя, прикладывая напряжение $U(t) = U_0 \cos \omega t$ с амплитудами $U_0 = 2,24$ и $2,77$ В в первом и втором случае слоев-диполей, описанных в разделе 4.2.

Оценки управляющего напряжения проведены 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.

5.6. Наноактуатор

Как указано в разделе 3, в случае, когда зависимость энергии взаимодействия слоев $U(\phi, z)$ от их относительного положения имеет винтовую симметрию, слои могут быть использованы в качестве пары наноболт – наногайка. Такую пару мы предлагаем использовать в наноактуаторе (рис. 10), предназначенном для преобразования поступательной силы, направленной вдоль оси нанотрубки, во вращение слоев [17, 32, 33]. В таком наноактуаторе слой 1 нанотрубки, закрепленный неподвижно, является статором. Слои 1 и 2 представляют собой наноподшипник вращения, т.е. для них выполняется условие: $E_\phi \ll E_z$, где E_ϕ и E_z — барьеры для относительного вращения этих слоев и их относительного скольжения вдоль оси нанотрубки соответственно. Это условие выполняется в том случае, когда слои 1 и 2

являются нехиральными и соизмеримыми (образующими ДУНТ $(n, n)@(m, m)$ или $(n, 0)@(m, 0)$). Для адекватной работы наноактуатора желательно, чтобы относительное положение слоев 2 и 3 было фиксированным. Относительное смещение слоев 2 и 3 вдоль оси нанотрубки будет предотвращено, если слой 3 будет нехиральным и соизмеримым со слоем 2. Для того чтобы избежать относительного вращения слоев 2 и 3 мы предлагаем создать в слое 3 дефекты атомной структуры. Такие же дефекты, периодически расположенные в идентичных местах элементарных ячеек слоя 3, могут быть использованы для создания пары наноболт – наногайка из слоев 3 и 4. Эта пара служит для преобразования силы, приложенной к слою 4 и направленной вдоль оси нанотрубки, во вращение ротора.

Слой 4 придет в винтовое движение относительно слоя 3, если выполнены следующие условия: 1) начальная кинетическая энергия, соответствующая движению вдоль линии резьбы, больше барьера E_1 для такого движения:

$$\frac{MV^2 \sin^2 \chi}{2} > E_1, \quad (29)$$

где M и V — масса и скорость слоя 4, χ — угол резьбы; 2) начальная кинетическая энергия, соответствующая движению поперек линии резьбы, меньше барьера E_2 для срыва резьбы:

$$\frac{MV^2 \cos^2 \chi}{2} < E_2. \quad (30)$$

Легко показать, что условия (29) и (30) выполняются одновременно только в случае, когда

$$\cot^2 \chi < \frac{E_2}{E_1} = \beta. \quad (31)$$

Условие (31) определяет возможность создания наноактуатора на основе данной пары наноболт – наногайка. Отметим, что из условия (31) следует, что для изготовления наноактуатора подходят пары наноболт – наногайка с небольшой относительной глубиной резьбы, если угол резьбы превышает 45° .

Сохранение момента импульса наноактуатора определяет минимальную длину L_3 ротора, при которой в данном наноактуаторе может быть осуществлен поворот ротора на угол ξ :

$$L_3^{\min} = \frac{L_4^2 R_4^2}{L_4 R_4^2 + \xi(R_2^3 + R_3^3) \sin \chi}, \quad (32)$$

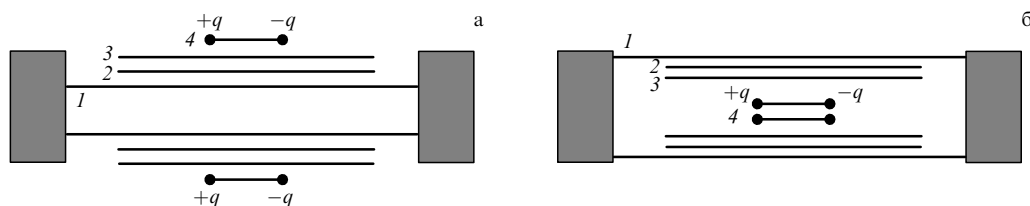


Рис. 10. Принципиальные схемы наноактуатора: (а) со статором — внутренним слоем; (б) со статором — внешним слоем. Фиксированный слой 1 — статор. Слои 2 и 3, вращающиеся совместно, — ротор. Слои 3 и 4 являются парой наноболт – наногайка. Заряды на краях слоя 4 могут быть получены в результате химической адсорбции и использованы для управления наноактуатором с помощью электрического поля.

где L_4 — длина слоя 4; R_2 , R_3 и R_4 — радиусы слоев 2, 3 и 4 соответственно.

В работе [33] приведен полный перечень четырехслойных нанотрубок, которые могут быть использованы для создания данного наноактуатора, а также рассмотрен наноактуатор на основе нанотрубки (11,2)@(12,12)@(19,19)@(26,26). Пара наноболт–наногайка (11,2)@(12,12), которая составляет внутренние слои в этом наноактуаторе, имеет достаточно большую относительную глубину резьбы: $\beta = 5,812$. Кроме того, для рассчитанного угла резьбы $\chi = 70,9^\circ$ этой пары наноболт–наногайка условие (31) выполняется при любой относительной глубине резьбы.

6. Заключение

В заключение перечислим результаты, достигнутые в развитии методов нанотехнологии, необходимых для изготовления наноэлектромеханических систем, основанных на нанотрубках. В настоящее время с помощью наноманипулятора можно перемещать ОУНТ [107, 108] и приводить в относительное движение слои многослойных нанотрубок [5]. Осуществлены также удаление колпачков, закрывающих концы нанотрубок [109–111], и нарезка слоев нанотрубок на части желаемой длины [112]. Ряд рассмотренных в данном докладе наноэлектромеханических систем, в частности нанотермометр и наноактуатор, могут быть изготовлены только из слоев с определенными индексами хиральности. Отметим в связи с этим, что недавно разработан способ однозначного определения индексов хиральности слоев [113].

Большинство наноэлектромеханических систем, которым посвящен этот доклад, рассмотрено на примере двухслойных нанотрубок. Такие нанотрубки могут быть получены с помощью различных методов синтеза: в стандартной дуге для получения углеродных нанотрубок [7, 114], в такой же дуге в присутствии водорода и катализатора [115, 116], при каталитическом разложении углеводородов [117–123], а также из однослойных нанотрубок, содержащих внутри цепочку фуллеренов, посредством их нагрева [86, 124, 125] или облучения электронами [126].

Таким образом, значительный прогресс в нанотехнологии вселяет в нас надежду, что рассмотренные в этом докладе наноэлектромеханические системы, основанные на углеродных нанотрубках, могут быть изготовлены в ближайшем будущем.

Работа поддержана грантами РФФИ 06-02-81036-Бел-а и 05-02-17864-а.

Список литературы

- Junno T et al. *Appl. Phys. Lett.* **66** 3627 (1995)
- Porto M, Urbakh M, Klafter J *Phys. Rev. Lett.* **84** 6058 (2000)
- Yu M-F et al. *Science* **287** 637 (2000)
- Yu M-F, Yakobson B I, Ruoff R S *J. Phys. Chem. B* **104** 8764 (2000)
- Cumings J, Zettl A *Science* **289** 602 (2000)
- Kis A et al. *Phys. Rev. Lett.* **97** 025501 (2006)
- Iijima S *Nature* **354** 56 (1991)
- Treacy M M J, Ebbesen T W, Gibson J M *Nature* **381** 678 (1996)
- Wong E W, Sheehan P E, Lieber C M *Science* **277** 1971 (1997)
- Krishnan A et al. *Phys. Rev. B* **58** 14013 (1998)
- Poncharal P et al. *Science* **283** 1513 (1999)
- Bichoutskaia E et al. *Phys. Rev. B* **73** 045435 (2006)
- Tuzun R E, Noid D W, Sumpter B G *Nanotechnology* **6** 64 (1995)
- Srivastava D *Nanotechnology* **8** 186 (1997)
- Forró L *Science* **289** 560 (2000)
- Maslov L *Nanotechnology* **17** 2475 (2006)
- Popov A M et al. *Phys. Status Solidi A* **204** 1911 (2007)
- Zheng Q, Jiang Q *Phys. Rev. Lett.* **88** 045503 (2002)
- Zheng Q, Liu J Z, Jiang Q *Phys. Rev. B* **65** 245409 (2002)
- Tu Z C, Ou-Yang Z C *J. Phys.: Condens. Matter* **16** 1287 (2004)
- Tu Z C, Hu X *Phys. Rev. B* **72** 033404 (2005)
- Saito R et al. *Appl. Phys. Lett.* **60** 2204 (1992)
- Tans S J, Verschueren A R M, Dekker C *Nature* **393** 49 (1998)
- Tamura R *Phys. Rev. B* **64** 201404(R) (2001)
- Menon M et al. *Phys. Rev. Lett.* **91** 145501 (2003)
- Fennimore A M et al. *Nature* **424** 408 (2003)
- Bourlon B et al. *Nano Lett.* **4** 709 (2004)
- Lozovik Yu E, Minogin A V, Popov A M *Phys. Lett. A* **313** 112 (2003)
- Lozovik Yu E, Minogin A V, Popov A M *Письма ЖЭТФ* **77** 759 (2003)
- Lozovik Yu E, Popov A M *Fullerenes, Nanotubes Carbon Nanostruct.* **12** 463 (2004)
- Saito R et al. *Chem. Phys. Lett.* **348** 187 (2001)
- Лозовик Ю Е, Николаев А Г, Попов А М *ЖЭТФ* **130** 516 (2006)
- Кузнецов С С, Лозовик Ю Е, Попов А М *ФТТ* **49** 951 (2007)
- Hansson A, Stafström S *Phys. Rev. B* **67** 075406 (2003)
- Grace I M, Bailey S W, Lambert C J *Phys. Rev. B* **70** 153405 (2004)
- Tunney M A, Cooper N R *Phys. Rev. B* **74** 075406 (2006)
- Kim D-H, Chang K J *Phys. Rev. B* **66** 155402 (2002)
- Bichoutskaia E et al. *Fullerenes, Nanotubes Carbon Nanostruct.* **14** 131 (2006)
- Bichoutskaia E et al. *Phys. Lett. A* (in print)
- Sazonova V et al. *Nature* **431** 284 (2004)
- Kim P, Lieber C M *Science* **286** 2148 (1999)
- Akita S et al. *Appl. Phys. Lett.* **79** 1691 (2001)
- Rueckes T et al. *Science* **289** 94 (2000)
- Jishi R A, Dresselhaus M S, Dresselhaus G *Phys. Rev. B* **47** 16671 (1993)
- Iijima S, Ichihashi T *Nature* **363** 603 (1993)
- Bethune D S et al. *Nature* **363** 605 (1993)
- Zhang X B et al. *Europhys. Lett.* **27** 141 (1994)
- Delhaes P (Ed.) *World of Carbon Vol. 1 Graphite and Precursors* (Gordon and Breach, Australia 2001)
- Srivastava D, Wei C, Cho K *Appl. Mech. Rev.* **56** 215 (2003)
- Tombler T W et al. *Nature* **405** 769 (2000)
- Salvetat J-P et al. *Phys. Rev. Lett.* **82** 944 (1999)
- Yu M-F et al. *Phys. Rev. Lett.* **84** 5552 (2000)
- Van Lier G et al. *Chem. Phys. Lett.* **326** 181 (2000)
- Hernández E et al. *Phys. Rev. Lett.* **80** 4502 (1998)
- Hernández E et al. *Appl. Phys. A* **68** 287 (1999)
- Sánchez-Portal D et al. *Phys. Rev. B* **59** 12678 (1999)
- Mielke S L et al. *Chem. Phys. Lett.* **390** 413 (2004)
- Popov V N, Van Doren V E, Balkanski M *Phys. Rev. B* **61** 3078 (2000)
- Lu J P *Phys. Rev. Lett.* **79** 1297 (1997)
- Li C, Chou T-W *Int. J. Solids Struct.* **40** 2487 (2003)
- Shen L, Li J *Phys. Rev. B* **69** 045414 (2004)
- Benedict L X et al. *Chem. Phys. Lett.* **286** 490 (1998)
- Bichoutskaia E et al. *Phys. Rev. B* **71** 113403 (2005)
- Giessibl F J *Rev. Mod. Phys.* **75** 949 (2003)
- Soule D E, Nezbeda C W J. *Appl. Phys.* **39** 5122 (1968)
- Лозовик Ю Е, Попов А М, Беликов А В *ФТТ* **45** 1333 (2003)
- Belikov A V et al. *Chem. Phys. Lett.* **385** 72 (2004)
- Damnjanović M et al. *Phys. Rev. B* **60** 2728 (1999)
- Damnjanović M et al. *New J. Phys.* **5** 148 (2003)
- Damnjanović M, Vuković T, Milošević I *Eur. Phys. J. B* **25** 131 (2002)
- Vuković T, Damnjanović M, Milošević I *Physica E* **16** 259 (2003)
- Charlier J-C, Michenaud J-P *Phys. Rev. Lett.* **70** 1858 (1993)
- Palser A H R *Phys. Chem. Chem. Phys.* **1** 4459 (1999)
- Kolmogorov A N, Crespi V H *Phys. Rev. Lett.* **85** 4727 (2000)
- White C T, Robertson D H, Mintmire J W *Phys. Rev. B* **47** 5485 (1993)
- Lozovik Yu E, Nikolaev A G, Popov A M *Int. J. Nanotechnol.* **2** 255 (2005)

77. Belikov A V et al. *Fullerenes, Nanotubes Carbon Nanostruct.* **12** 117 (2004)
78. Kang J W et al. *Nanotechnology* **16** 2670 (2005)
79. Legoas S B et al. *Nanotechnology* **15** S184 (2004)
80. Tsang S C et al. *Nature* **372** 159 (1994)
81. Zhang G L et al. *J. Appl. Phys.* **80** 579 (1996)
82. Demoncey N et al. *Eur. Phys. J. B* **4** 147 (1998)
83. Li Y S, Tománek D *Chem. Phys. Lett.* **221** 453 (1994)
84. Kwon Y-K, Tománek D, Iijima S *Phys. Rev. Lett.* **82** 1470 (1999)
85. Kang J W, Hwang H J J. *Appl. Phys.* **96** 3900 (2004)
86. Bandow S et al. *Chem. Phys. Lett.* **337** 48 (2001)
87. Peralta-Inga Z et al. *Nano Lett.* **3** 21 (2003)
88. Park N et al. *Chem. Phys. Lett.* **403** 135 (2005)
89. Hwang Y G, Lee Y H J. *Korean Phys. Soc.* **42** S267 (2005)
90. Ершова О В и др. *ФТТ* **49** 1914 (2007)
91. Drexler K E *Nanosystems: Molecular Machinery, Manufacturing, and Computation* (New York: Wiley, 1992) p. 297
92. Zhang S, Liu W K, Ruoff R S *Nano Lett.* **4** 293 (2004)
93. Lozovik Yu E, Попов А М *Chem. Phys. Lett.* **328** 355 (2000)
94. Лозовик Ю Е, Попов А М *ФТТ* **44** 180 (2002)
95. Gutierrez R et al. *Phys. Rev. B* **65** 113410 (2002)
96. Иванченко Г С, Лебедев Н Г *ФТТ* **49** 183 (2007)
97. Gao B et al. *Phys. Rev. Lett.* **95** 196802 (2005)
98. Bichoutskaia E et al. *Fullerenes, Nanotubes Carbon Nanostruct.* **14** 215 (2006)
99. Rivera J L, McCabe C, Cummings P T *Nano Lett.* **3** 1001 (2003)
100. Rivera J L, McCabe C, Cummings P T *Nanotechnology* **16** 186 (2005)
101. Legoas S B et al. *Phys. Rev. Lett.* **90** 055504 (2003)
102. Guo W et al. *Phys. Rev. Lett.* **91** 125501 (2003)
103. Servantie J, Gaspard P *Phys. Rev. Lett.* **91** 185503 (2003)
104. Zhao Y et al. *Phys. Rev. Lett.* **91** 175504 (2003)
105. Ma C-C et al. *Nanotechnology* **16** 1253 (2005)
106. Tangney P, Louie S G, Cohen M L *Phys. Rev. Lett.* **93** 065503 (2004)
107. Yu M et al. *Nanotechnology* **10** 244 (1999)
108. Shen Z et al. *Int. J. Nanosci.* **1** 575 (2002)
109. Tsang S C, Harris P J F, Green M L H *Nature* **362** 520 (1993)
110. Ajayan P M et al. *Nature* **362** 522 (1993)
111. Liu J et al. *Science* **280** 1253 (1998)
112. El-Hami K, Matsushige K *Int. J. Nanosci.* **2** 125 (2003)
113. Liu Z, Qin L-C *Chem. Phys. Lett.* **408** 75 (2005)
114. Ebbesen T W, Ajayan P M *Nature* **358** 220 (1992)
115. Hutchison J L et al. *Carbon* **39** 761 (2001)
116. Saito Y, Nakahira T, Uemura S J. *Phys. Chem. B* **107** 931 (2003)
117. Flahaut E et al. *J. Mater. Chem.* **10** 249 (2000)
118. Zhu H et al. *Carbon* **40** 2023 (2002)
119. Ren W et al. *Chem. Phys. Lett.* **359** 196 (2002)
120. Li W Z et al. *Chem. Phys. Lett.* **368** 299 (2003)
121. Ci L et al. *Chem. Phys. Lett.* **359** 63 (2002)
122. Wei J et al. *Chem. Phys. Lett.* **376** 753 (2003)
123. Zhu J, Yudasaka M, Iijima S *Chem. Phys. Lett.* **380** 496 (2003)
124. Smith B W, Luzzi D E *Chem. Phys. Lett.* **321** 169 (2000)
125. Abe M et al. *Phys. Rev. B* **68** 041405 (2003)
126. Sloan J et al. *Chem. Phys. Lett.* **316** 191 (2000)