

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 наномеханических 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], нанопереключател [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 наноструктурах, 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 – нагоайка": "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].

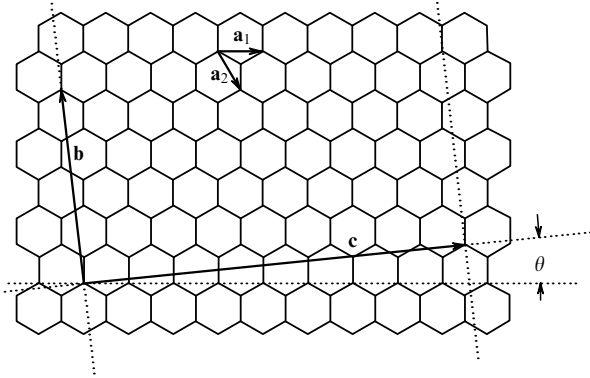
Углеродные нанотрубки весьма перспективны для применения в НЭМС, основанных не только на относительном движении слоев нанотрубок, но и на изгибе нанотрубок. Среди таких НЭМС прежде всего следует отметить наноосцилляторы, в которых измерение частоты поперечных колебаний нанотрубки используется для измерения 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  $5 \times 10^{-18}$  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,  $\theta$  — 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  $\theta$ , 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  $60^\circ$ , 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 конформенту (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,  $\tau$  — модуль сдвига слоев, включающий в себя динамический и статический модули сдвига,

$\gamma$  — энергия взаимодействия слоев, приходящаяся на единицу площади поверхности перекрытия слоев,  $F_e$  — 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  $\gamma$  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  $\phi$  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,  $\Delta U_\phi$  и  $\Delta U_z$  — барьеры для относительного вращения слоев и их скольжения вдоль оси ДУНТ соответственно. При этом  $U_0$ ,  $\Delta U_\phi$  и  $\Delta U_z$  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

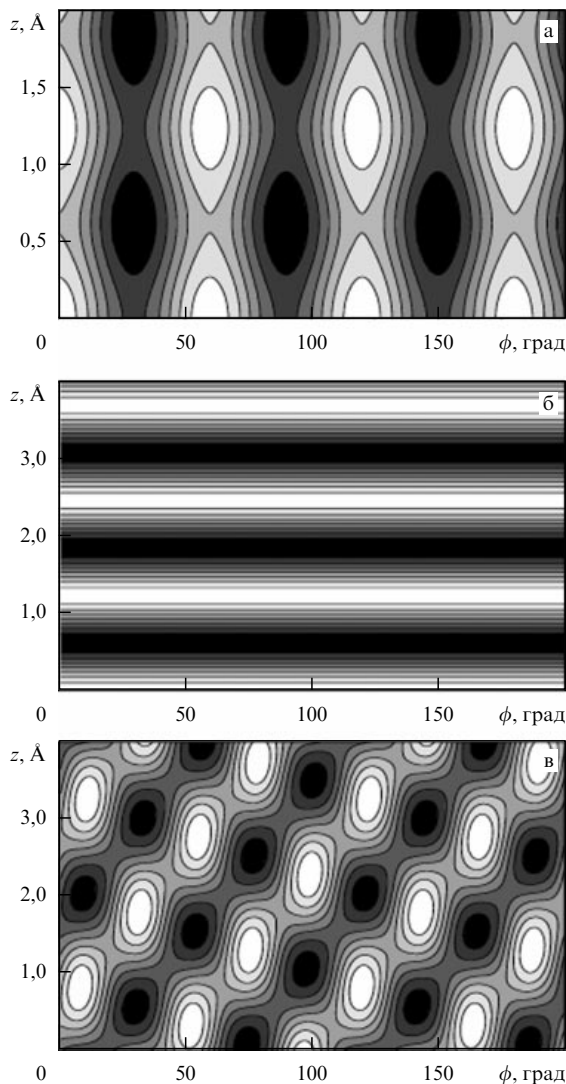
слоев. По этой причине для таких ДУНТ период по углу  $\delta_\phi = 2\pi m/N$  энергии  $U(z, \phi)$  мал и, следовательно, мал барьер  $\Delta U_\phi$  для относительного вращения слоев (менее 0,005 мэВ на атом по расчетам методом функционала плотности [63] и менее  $10^{-11}$  мэВ на атом по расчетам 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  $5 \times 10^{-12}$  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 Кресси 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  $\phi$  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  $\Delta U$  для относительного движения слоев определяется выражением  $\Delta U = \Delta U_u N_u$ , где  $\Delta U_u$  — 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,  $\delta$  — 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,

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

$\Omega$  — предэкспоненциальный множитель в формуле Аррениуса для частоты перескока слоев между эквивалентными минимумами потенциального рельефа, находящимися на линии резьбы (по порядку величины  $\Omega$  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–напогайка 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  $\Phi$  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 нанoeлектромеханической 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  $Bg_2$  [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. Нанoeлектромеханические 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.

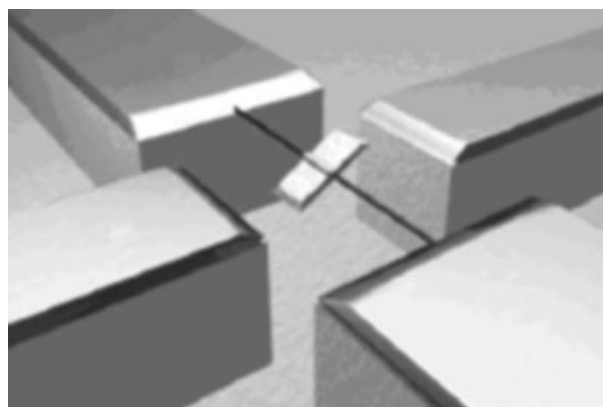


Рис. 3. Схема наномотора, основанного на относительном вращении слоев углеродной нанотрубки [26].

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.

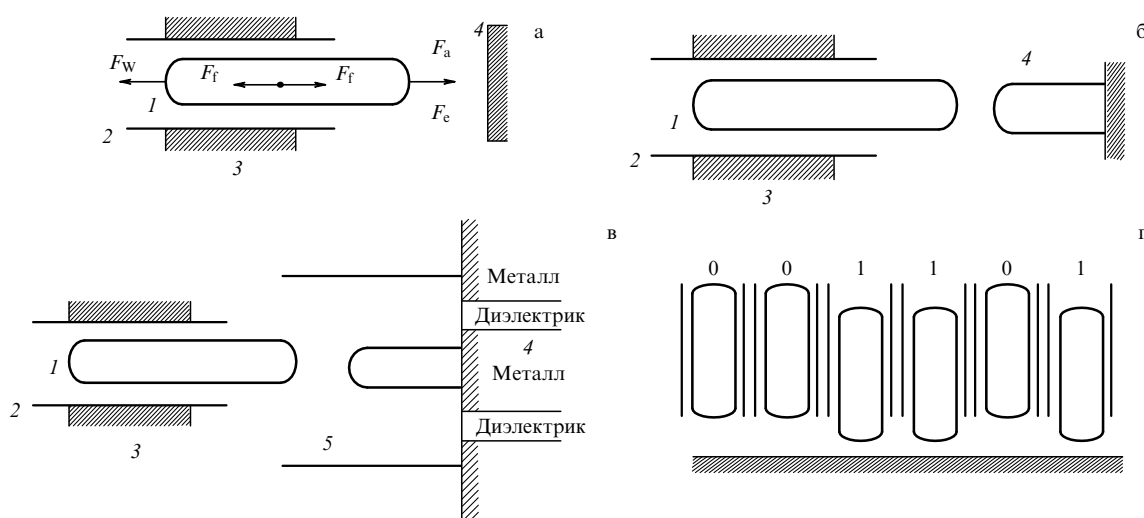
## 5.2. Нанореле и ячейка памяти

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 ( $\pm 3$  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  $\Delta U$ , 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  $\Omega$  — предэкспоненциальный множитель. Согласно результатам моделирования методом молекулярной динамики переориентаций оболочек наночастицы  $C_{60}@C_{240}$ , предэкспоненциальный множитель  $\Omega$  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

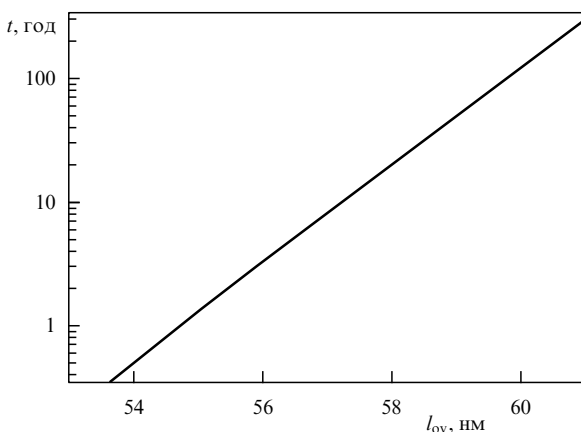


Рис. 5. Зависимость времени жизни  $t$  в положении "включено" при температуре 300 К от длины  $l_{ov}$  перекрытия слоев, рассчитанная для нанореле со вторым электродом — нанотрубкой (5,5) и первым электродом на основе ДУНТ (5,5)@(10,10).

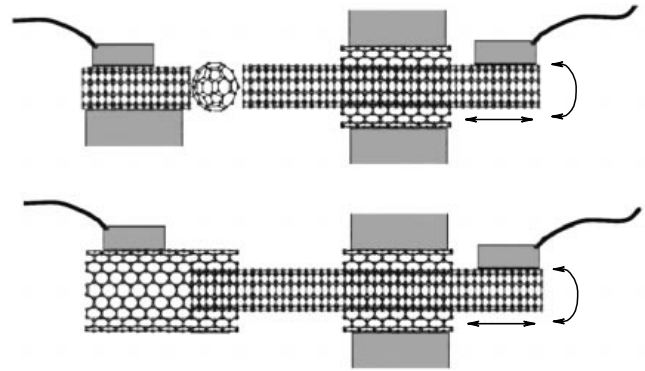


Рис. 6. Принципиальные схемы нанорезисторов, основанных на углеродных нанотрубках.

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).

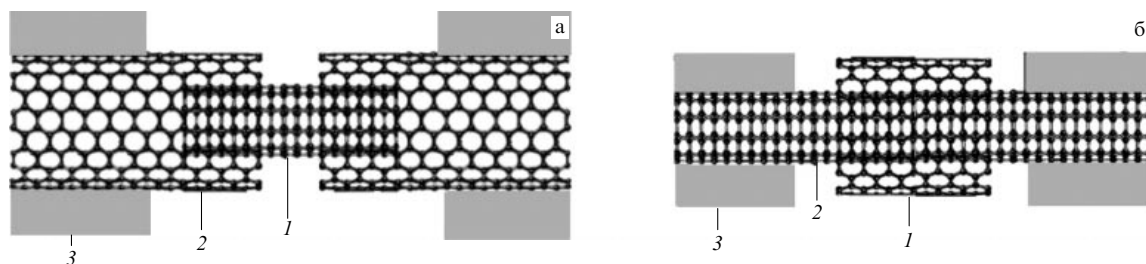


Рис. 7. Схемы электромеханических нанотермометров на основе ДУНТ: (а) телескопический нанотермометр с подвижным внутренним слоем, (б) нанотермометр с подвижным челноком из внешнего слоя; 1 — подвижный слой, 2 — фиксированный слой, 3 — электроды.

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  $\gamma$ , 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.

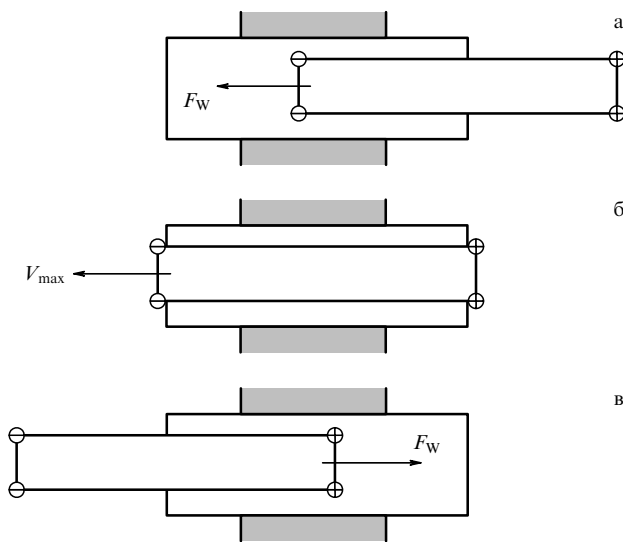
Условие Г выполняется в случае, когда смещение  $d$  подвижного слоя в результате диффузии оказывается меньше, чем расстояние  $L_e$  между подвижным слоем и электродом,

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

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 термопары, и поскольку он основан на измерении проводимости, то может быть достигнута такая же точность измерений, как и для термопары (точность измерения при комнатной температуре для термопар медь — константан и хромель — алюмель 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 выдвигании внутреннего слоя втягивает его во внешний, существенно зависит от относительного положения слоев только в случае, когда расстояние между краями

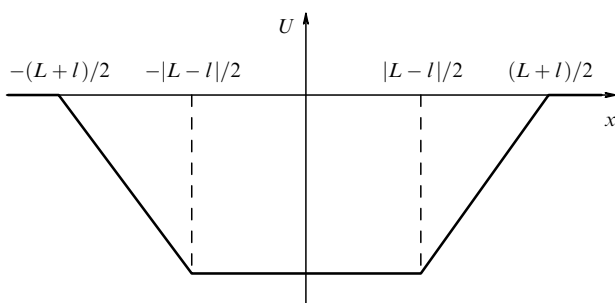


**Рис. 8.** Последовательные положения слоев гигагерцевого осциллятора в течение половины периода колебаний: (а) и (в) максимальное телескопическое выдвигание внутреннего слоя, сила Ван-дер-Ваальса  $F_W$  втягивает внутренний слой во внешний; (б) внутренний слой проходит по инерции с максимальной скоростью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

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  $\Delta E$  — 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  $\omega$  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-диполу 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  $E_\phi$  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,  $\chi$  — 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  $45^\circ$ .

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

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

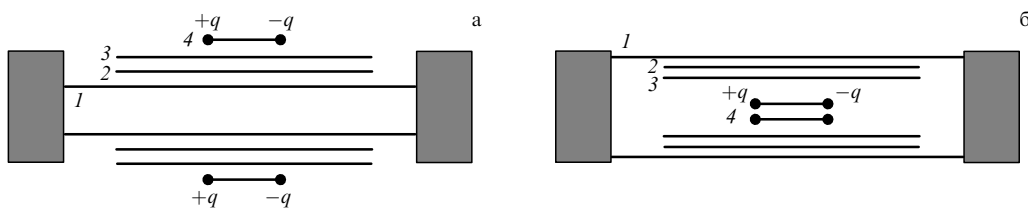


Рис. 10. Принципиальные схемы наноактуатора: (а) со статором — внутренним слоем; (б) со статором — внешним слоем. Фиксированный слой 1 — статор. Слои 2 и 3, вращающиеся совместно, — ротор. Слои 3 и 4 являются парой наноболт–наногайка. Заряды на краях слоя 4 могут быть получены в результате химической 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)
- Damjanović M et al. *Phys. Rev. B* **60** 2728 (1999)
- Damjanović M et al. *New J. Phys.* **5** 148 (2003)
- Damjanović M, Vuković T, Milošević I *Eur. Phys. J. B* **25** 131 (2002)
- Vuković T, Damjanović 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. Démoncy 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)