

# Электромеханический нанотермометр, основанный на тепловых колебаниях слоев углеродной нанотрубки

© А.М. Попов, Ю.Е. Лозовик, Е. Бичутская\*, Г.С. Иванченко\*\*, Н.Г. Лебедев\*\*, Е.К. Криворотов\*\*\*

Институт спектроскопии Российской академии наук,  
Троицк, Московская обл., Россия

\* Department of Chemistry, University of Nottingham,  
Nottingham, U.K.

\*\* Волгоградский государственный университет,  
Волгоград, Россия

\*\*\* Московский государственный педагогический университет,  
Москва, Россия

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

(Поступила в Редакцию 11 марта 2008 г.  
В окончательной редакции 19 мая 2008 г.)

Предложена новая концепция электромеханического нанотермометра. Измерения температуры осуществляются с помощью измерения проводимости наносистемы, которая сильно зависит от температуры в результате относительных тепловых колебаний нанообъектов, составляющих наносистему. Возможность реализации предложенной концепции нанотермометра показана на примере двухслойных углеродных нанотрубок. Зависимость энергии межслойного взаимодействия от относительного смещения слоев нанотрубок рассчитана с помощью метода функционала плотности. Проводимость нанотрубок рассчитана в рамках двухзонной модели Хаббарда. Расчеты энергии взаимодействия слоев и проводимости использованы для оценки размеров нанотермометров, основанных на различных двухслойных углеродных нанотрубках. Показано, что рассмотренный нанотермометр может быть использован для измерения температуры в локализованных областях с размерами порядка сотен нанометров.

Работа поддержана грантами РФФИ № 08-02-90049-Бел, 08-02-00685 и 07-03-96604-а.

PACS: 73.63.Fg, 85.35.Kt

## 1. Введение

Интенсивное развитие нанотехнологии в последние десятилетия сделало возможным создания нанoeлектро-механических систем (НЭМС), в которых элементами электрической цепи являются все меньшие нанообъекты, включая одиночные молекулы. Принципы работы ряда таких НЭМС основаны на изменении характеристик системы при изменении относительных положений нанообъектов в субнанометровом масштабе относительно других элементов электрической цепи [1]. Уникальные электронные свойства углеродных нанотрубок [2], а также возможность контролируемого с помощью атомно-силового микроскопа [3,4] относительного движения слоев углеродных нанотрубок делает их перспективными для использования в НЭМС одновременно в качестве подвижных элементов и элементов электрической цепи. Предложен ряд НЭМС, основанных на взаимодействии и относительном движении слоев углеродных нанотрубок, а также проведены расчеты рабочих характеристик этих НЭМС: переменного нанорезистора [5,6], наносенсора напряжения [7], ячейки энергонезависимой памяти [8,9]. Более того, были изготовлены наномоторы, основанные на относительном вращении слоев углеродных нанотрубок [10,11].

В настоящей публикации мы предлагаем новую концепцию электромеханического нанотермометра. Работа предлагаемого нанотермометра основана на измерении

проводимости системы нанообъектов в случае, когда эта проводимость существенным образом зависит от относительного положения нанообъектов в субнанометровом масштабе и, следовательно, изменяется с ростом температуры в результате тепловых колебаний этих нанообъектов. Возможность реализации данной концепции рассмотрена на примере электромеханического нанотермометра, основанного на  $(n, n)@(m, m)$ -двухслойных углеродных нанотрубках (ДУНТ). Сделаны оценки изменения проводимости ДУНТ в результате относительных тепловых колебаний слоев. Расчет размеров нанотермометров, предназначенных для измерений температуры в различных условиях, показывает, что их размеры составляют всего лишь десятки нанометров.

Температурная зависимость проводимости системы с учетом вклада тепловых колебаний составляющих ее нанообъектов определяется следующим выражением:

$$G(T) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} G(\mathbf{q}, T) \exp(-U(\mathbf{q})/kT) d\mathbf{q}}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-U(\mathbf{q})/kT) d\mathbf{q}}, \quad (1)$$

где  $G(\mathbf{q}, T)$  — проводимость системы при фиксированном относительном положении нанообъектов, которое описывается координатами  $\mathbf{q}$ ,  $U(\mathbf{q})$  — потенциальная энергия системы. Система может быть использована для

создания нанотермометра, основанного на относительных тепловых колебаниях составляющих ее нанообъектов в случае, когда выполняются следующие условия.

1) Проводимость  $G(\mathbf{q}, T)$  слабо зависит от температуры при фиксированном относительном положении нанообъектов (условие *A*).

2) Проводимость  $G(\mathbf{q}, T)$  существенным образом зависит от координат  $\mathbf{q}$  (условие *B*).

3) Характерная амплитуда тепловых колебаний нанообъектов должна быть достаточно велика, такой, чтобы тепловые колебания вносили основной вклад в зависимость проводимости  $G(\mathbf{q}, T)$  от температуры (условие *C*).

4) Характерная амплитуда тепловых колебаний нанообъектов должна быть достаточно мала для того, чтобы относительные смещения нанообъектов не привели к нарушению работы нанотермометра (условие *D*).

Кроме того, желательно, но не обязательно, чтобы минимум потенциальной энергии  $U(\mathbf{q})$  системы, вблизи которого происходят относительные колебания нанообъектов, соответствовал экстремуму в зависимости проводимости системы от координат  $\mathbf{q}$  (условие *E*). В этом случае любые малые смещения нанообъектов от равновесного положения приведут к изменениям проводимости одного знака (либо к уменьшению, либо к увеличению проводимости), и, следовательно, вклад в изменение проводимости от тепловых колебаний, соответствующих различным смещениям, не будет компенсироваться. Отметим, что совпадение минимума  $U(\mathbf{q})$  и экстремума  $G(\mathbf{q})$  возможно, в частности, в том случае, когда это равновесное положение соответствует более высокой симметрии системы.

Согласно расчетам, проводимость ДУНТ существенным образом зависит от относительного положения их слоев [12,13]. Далее мы показываем, что все перечисленные условия могут быть выполнены для предложенной схемы нанотермометра, основанного на ДУНТ с нехиральными соизмеримыми слоями. Мы рассматриваем два случая относительного положения слоев ДУНТ.

1) Телескопическая система, в которой внутренний слой входит во внешний слой только на часть своей длины. При этом длина перекрытия слоев меньше, чем длина каждого из слоев.

2) Система с челноком, когда короткий слой (челнок) перекрывается с длинным слоем, внутренним или внешним, по всей своей длине. При этом длина перекрытия слоев равна длине короткого слоя.

Согласно расчетам, как для телескопической системы, так и для системы с челноком зависимость проводимости  $G(z)$  от относительного положения  $z$  слоев вдоль оси ДУНТ является периодической функцией с большей амплитудой колебаний величины проводимости [12,13]. Этот результат означает выполнение условия *A*. Для телескопической системы проводимость зависит также от длины перекрытия слоев [13]. Измерения температурной зависимости проводимости однослойных нанотрубок показывают, что их проводимость не зависит

от температуры для  $T > 80$  К [14]. Слабая зависимость проводимости от температуры объясняется тем, что движение электронов в нанотрубках на мезоскопических расстояниях происходит в баллистическом режиме [15]. Расчеты, представленные в настоящей работе, показывают, что проводимость ДУНТ с фиксированным относительным положением слоев слабо зависит от температуры для  $T > 80$  К. Эти результаты означают выполнение условия *B*. Относительное положение слоев изменяется в результате тепловых колебаний слоев. Следовательно, проводимость ДУНТ может существенно зависеть от температуры главным образом в результате относительных колебаний слоев. В настоящей работе зависимость энергии  $U$  взаимодействия слоев ДУНТ от относительного положения  $z$  слоев вдоль оси ДУНТ рассчитана с помощью метода функционала плотности. Эта зависимость использована для оценки возможностей выполнения условий *C* и *D*, а также для расчета минимальных размеров нанотермометров, основанных на ДУНТ с соизмеримыми нехиральными слоями, при которых относительная диффузия слоев ДУНТ не нарушает работу нанотермометра. Анализ симметрии ДУНТ с соизмеримыми нехиральными слоями показывает, что для них выполняется также дополнительное условие *E*. Общая концепция нанотермометра, предложенная в настоящей работе, может стимулировать поиск других наносистем, которые могут быть использованы в качестве электромеханического нанотермометра.

В разделе 2 приведены результаты расчетов энергии взаимодействия слоев ДУНТ методом функционала плотности. В разделе 3 представлены расчеты проводимости ДУНТ с фиксированным положением слоев. В разделе 4 рассмотрены принципиальные схемы нанотермометров на основе ДУНТ; приведены оценки, которые показывают, что тепловые колебания слоев вносят основной вклад в проводимость нанотермометров, а также рассчитаны рабочие характеристики нанотермометров. В разделе 5 обсуждаются преимущества предложенных схем электромеханических нанотермометров по сравнению с нанотермометрами, основанными на тепловом расширении жидкости, и успехи в развитии методов нанотехнологии, необходимых для изготовления электромеханических нанотермометров на основе ДУНТ.

## 2. Расчет взаимодействия слоев нанотрубки

Энергия взаимодействия  $U$  двух соседних слоев ДУНТ зависит от координат, которые описывают относительное положение слоев: угла  $\phi$  относительного вращения слоев вокруг оси нанотрубки и относительного смещения  $z$  слоев вдоль этой оси. Симметрия функции  $U(\phi, z)$  однозначно определяется симметрией ДУНТ [16,17]. Как показывают расчеты энергии взаимодействия слоев и анализ симметрии ДУНТ, для функции  $U(\phi, z)$  возможны два принципиально различных

случая. Для ДУНТ с несоизмеримыми слоями [5,6] или с соизмеримыми слоями, из которых хотя бы один слой хиральный [17–20], барьеры между минимумами энергии взаимодействия  $U(\phi, z)$  слоев пренебрежимо малы (см. также обзор [21]). Поэтому в таких ДУНТ возможна относительная диффузия слоев даже при низких температурах, и, следовательно, они не могут быть использованы для создания электромеханического нанотермометра, основанного на относительных тепловых колебаниях слоев. Для ДУНТ с соизмеримыми нехиральными слоями  $((n, n)@(m, m)$  и  $(n, 0)@(m, 0)$ ) барьеры между минимумами энергии взаимодействия  $U(\phi, z)$  слоев велики. В настоящей работе мы рассматриваем работу электромеханического нанотермометра на примере  $(n, n)@(m, m)$  ДУНТ. Для таких ДУНТ получено выражение для разложения энергии взаимодействия слоев в ряд Фурье [16]

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

где  $N$  — наибольший общий делитель  $n$  и  $m$ ,  $l_c$  — длина единичной ячейки ДУНТ. Четные члены всегда присутствуют в разложении (2), а нечетные члены присутствуют в (2) только в случае, когда оба отношения,  $n/N$  и  $m/N$ , нечетны.

Амплитуды гармоник в разложении (2) экспоненциально спадают с увеличением номеров гармоник  $M$  и  $K$  [17,18,22]. Поэтому энергия  $U(\phi, z)$  взаимодействия слоев для ДУНТ с соизмеримыми нехиральными слоями может быть интерполирована только двумя первыми членами разложения (2)

$$U(\phi, z) = U_0 - \frac{\Delta U_\phi}{2} \cos\left(\frac{2\pi}{\delta_\phi} \phi\right) - \frac{\Delta U_z}{2} \cos\left(\frac{2\pi}{\delta_z} z\right), \quad (3)$$

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,  $\delta_\phi = \pi N/nm$  и  $\delta_z = l_c/2$  — периоды  $U(\phi, z)$  для относительного вращения слоев и их относительного смещения вдоль оси ДУНТ соответственно. Полуэмпирические расчеты на примере нескольких десятков ДУНТ с соизмеримыми нехиральными слоями показывают, что энергия  $U(\phi, z)$  может быть интерполирована выражением (3) с точностью около 1% [19].

Барьер  $\Delta U_\phi$  для относительного вращения слоев — это барьер между эквивалентными минимумами  $U(\phi, z)$ , которые отстоят друг от друга на период  $\delta_\phi$ . Для большинства ДУНТ с соизмеримыми нехиральными слоями наибольший общий делитель  $n$  и  $m$  имеет значение  $N = 1$  [19]. Для таких ДУНТ мал период  $\delta_\phi$  и, согласно расчетам, мал барьер  $\Delta U_\phi$  для относительного вращения слоев (менее 0.005 meV/atom для расчетов методом

функционала плотности [20] и менее  $10^{-11}$  meV/atom для расчетов с использованием полуэмпирических потенциалов [19]). Существенный барьер  $\Delta U_\phi$  имеют только ДУНТ  $(5, 5)@(10, 10)$  и  $(9, 0)@(18, 0)$  [7,17,19], для которых  $N = 5$  и 9 соответственно. Для ДУНТ с  $N = 1$  зависимостью энергии взаимодействия слоев  $U(\phi, z)$  от угла  $\phi$  можно пренебречь, и эта энергия приближенно определяется выражением

$$U(z) = U_0 - \frac{\Delta U_z}{2} \cos\left(\frac{2\pi}{\delta_z} z\right). \quad (4)$$

Выражение (4) используется в разделе 4 для оценок вклада относительных тепловых колебаний слоев ДУНТ в зависимость проводимости нанотермометра от температуры. В настоящей работе мы проверяем адекватность выражения (4) с помощью расчетов методом функционала плотности на примере  $(6, 6)@(11, 11)$  ДУНТ.

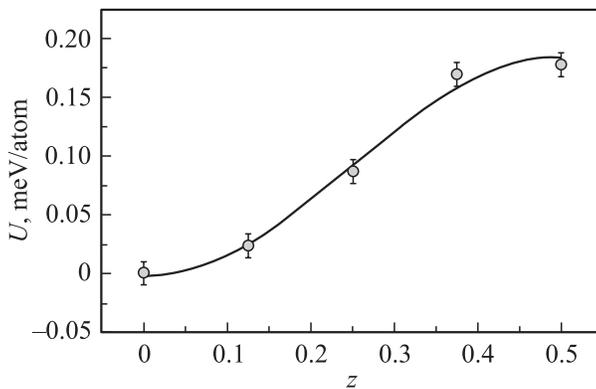
Энергия взаимодействия слоев ДУНТ рассчитана с помощью метода функционала плотности в приближении локальной плотности с использованием программы AIMPRO [23]. При квантово-механическом описании каждого атома углерода в качестве псевдоволновых функций используются 5 функций Гаусса, которые расположены в центре атома и определены суммой сферических гармоник. Максимальный угловой момент, учитываемый в разложении экспонент функций Гаусса,  $l = 1$  (т.е. учитываются  $d$ -орбитали включительно), и только экспоненты с наибольший и наименьшей величиной коэффициента сжимаемости разложены до углового момента  $l = 1$  (т.е. включают лишь  $s$ - и  $p$ -орбитали). Зона Бриллюэна описана с помощью 18  $k$ -точек в направлении главной оси нанотрубки. В этой работе использовались псевдопотенциал Бачелета, Хамана и Шлутера [24] и функционал, описывающий обменное взаимодействие электронов и их корреляцию [25]. Элементарная ячейка  $(6, 6)@(11, 11)$  ДУНТ содержит 68 атомов углерода. Структура каждого слоя была оптимизирована отдельно. При расчете энергии взаимодействия слоев структура слоев была фиксирована. Точность расчетов полной энергии ДУНТ определяется выбором способа оптимизации системы и в данных расчетах достигает величины 1  $\mu$ eV/atom.

Хорошо известно, что стандартный метод функционала плотности непригоден для описания слабых ван-дер-ваальсовых и дисперсионных взаимодействий, а именно эти взаимодействия и определяют физическую природу взаимодействия соседних слоев графита и углеродных нанотрубок. При изучении свойств наноструктур со структурой графитовых слоев метод расчета должен учитывать и сильное взаимодействие между атомами углерода внутри слоя, и слабое взаимодействие между слоями. Достичь удовлетворительных результатов с помощью метода функционала плотности можно, например, модифицируя функционал плотности. Однако такой подход представляет собой серьезную и трудоемкую квантово-механическую проблему. В наших расчетах мы не модифицируем функционал плотности,

а оптимизируем базисный набор (функции Гаусса) таким образом, чтобы воспроизвести с хорошей точностью не только энергетические, но и упругие свойства графита. Полученные с помощью оптимизированного базисного набора [26] энергия взаимодействия между слоями графита 35 meV/atom, а также коэффициент упругости  $C_{44} = 4.20$  GPa, отвечающий относительному сдвигу слоев графита, находятся в отличном согласии с экспериментальными значениями этих величин:  $35 \pm 10$  meV/atom [27] и  $5.05 \pm 0.35$  GPa [28] соответственно. Отметим, что расчеты с помощью данного метода дают значения энергии взаимодействия слоев в пределах 23–25 meV/atom для ряда ДУНТ с расстоянием между слоями 3.4 Å, которое соответствует многослойным углеродным нанотрубкам. Эти значения энергии находятся в отличном соответствии с экспериментальными данными 23–33 meV/atom для многослойных нанотрубок [4].

Энергия взаимодействия слоев (6, 6)@(11, 11) ДУНТ рассчитана для пяти различных значений относительного смещения  $z$  слоев вдоль оси ДУНТ (включая относительное положение слоев, соответствующее минимуму энергии их взаимодействия) при фиксированном угле  $\phi$  относительного вращения слоев вокруг оси. Рассчитанная зависимость энергии взаимодействия слоев  $U(z)$ , которая представлена на рис. 1, показывает, что выражение (4) адекватно в пределах точности расчетов.

Отметим, что выражения (2)–(4) справедливы для любых физических величин, зависящих от относительного положения нехиральных соизмеримых слоев ДУНТ, в частности для проводимости  $G(\phi, z)$ . Это означает, что обе функции  $U(\phi, z)$  и  $G(\phi, z)$  имеют совпадающие экстремумы и периоды  $\delta_\phi$  и  $\delta_z$ . Таким образом, для ДУНТ с соизмеримыми нехиральными слоями выполняется дополнительное условие  $E$ .



**Рис. 1.** Зависимость энергии  $U$  взаимодействия слоев (6, 6)@(11, 11) ДУНТ (в meV на атом внешнего слоя) от относительного смещения  $z$  слоев вдоль оси нанотрубки. Смещение  $z$  выражено в единицах периода  $\delta_z$  функции  $U(z)$ . Рассчитанные значения энергии показаны точками, сплошной линией показана интерполяция энергии с помощью выражения (4). Энергия взаимодействия и относительное смещение слоев отсчитываются от минимума энергии взаимодействия (т.е.  $U(0) = 0$ ).

### 3. Расчет проводимости двухслойных нанотрубок

В настоящем разделе мы рассматриваем температурные зависимости проводимости  $(n, n)@(m, m)$  ДУНТ, на которых может быть основан нанотермометр, при фиксированном относительном положении слоев. Однослойные нанотрубки указанного типа в отдельности обладают металлической проводимостью [2], поэтому следует ожидать, что для температурной зависимости проводимости ДУНТ также будет обнаружена металлическая проводимость. Однако при этом не исключена возможность проявления квантовых эффектов в некоторых интервалах температур, что в свою очередь может привести к фазовым переходам типа металл–полупроводник.

Для моделирования электронной структуры использована двухзонная модель Хаббарда, модифицированная для учета перескока электронов между слоями ДУНТ. Гамильтониан модели применительно к ДУНТ со слоями  $A$  и  $B$  можно записать в следующем виде [29]:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & - \sum_{j, \Delta, \sigma} t_{\Delta}^a (a_{j\sigma}^+ a_{j+\Delta, \sigma} + a_{j-\Delta, \sigma}^+ a_{j\sigma}) - \mu^a \sum_{j, \sigma} a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} \\ & + U \sum_j a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} a_{j, -\sigma}^+ a_{j, -\sigma} - \sum_{j, \Delta, \sigma} t_{\Delta}^b (b_{j\sigma}^+ b_{j+\Delta, \sigma} + b_{j+\Delta, \sigma}^+ b_{j\sigma}) \\ & - \mu^b \sum_{j, \sigma} b_{j\sigma}^+ b_{j\sigma} + U \sum_j b_{j\sigma}^+ b_{j\sigma} b_{j, -\sigma}^+ b_{j, -\sigma} \\ & - \sum_{j, \xi, \sigma} t_{\xi}^{ab} (a_{j\sigma}^+ b_{j+\xi, \sigma} + b_{j+\xi, \sigma}^+ a_{j\sigma}), \end{aligned} \quad (5)$$

где  $t_{\Delta}^a, t_{\Delta}^b$  и  $t_{\xi}^{ab}$  — интегралы перескока электрона атомами слоя  $A$ , атомами слоя  $B$  и между слоями ДУНТ соответственно;  $\mu^a$  и  $\mu^b$  — химические потенциалы слоев  $A$  и  $B$  соответственно;  $U$  — энергия кулоновского взаимодействия электронов, находящихся на одном атоме,  $a_{j\sigma}^+, a_{j\sigma}, b_{j\sigma}^+, b_{j\sigma}$  — операторы рождения и уничтожения электрона с координатами  $\mathbf{r}_j$  и спином  $\sigma$  для слоев  $A$  и  $B$  соответственно,  $\Delta$  — расстояние между соседними атомами углерода в соответствующих слоях ДУНТ,  $\xi$  — расстояние между слоями. Для описания взаимного расположения атомов двух слоев ДУНТ использовалась упаковка, в которой половина атомов одного слоя находится непосредственно над атомами другого слоя, а вторая половина атомов находится над центрами шестиугольников, образованных структурой атомов соседнего слоя.

Тензор статической удельной проводимости в терминах функций Грина имеет вид [30,31]

$$G_{\alpha\beta} = \frac{i\pi V}{kT} \langle\langle j_{\alpha} | j_{\beta} \rangle\rangle, \quad (6)$$

где  $V$  — объем ДУНТ,  $\langle\langle j_{\alpha} | j_{\beta} \rangle\rangle$  — функция Грина для вектора плотности тока  $\hat{\mathbf{j}}$ . Векторы поляризации  $\hat{\mathbf{D}}$  и

плотности тока  $\hat{\mathbf{j}}$  имеют вид

$$\hat{\mathbf{D}} = \frac{e}{V} \sum_{j\sigma} (\mathbf{r}_j a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} + \mathbf{r}_j b_{j\sigma}^+ b_{j\sigma}), \quad (7)$$

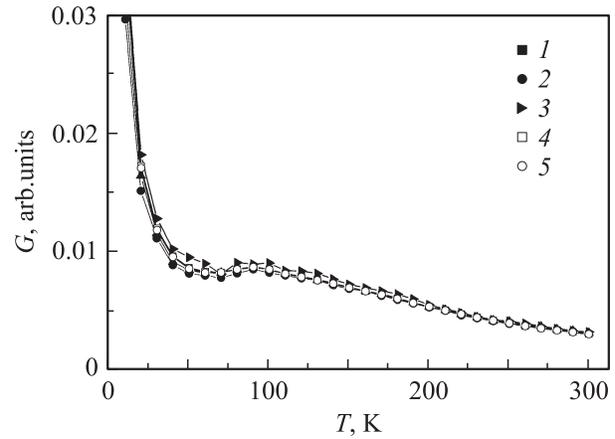
$$\hat{\mathbf{j}} = \frac{ie}{V} \sum_{k\sigma} [(\mathbf{v}^a a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \mathbf{v}^b b_{k\sigma}^+ b_{k\sigma}) + \mathbf{v}^{ab} (b_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + a_{k\sigma}^+ b_{k\sigma})], \quad (8)$$

где  $\mathbf{v}^a$ ,  $\mathbf{v}^b$  и  $\mathbf{v}^{ab}$  — скорости электрона в зонах  $a$ ,  $b$  и  $ab$  соответственно,

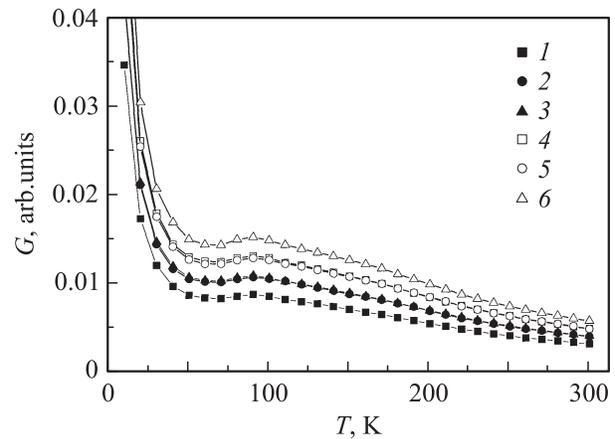
$$\mathbf{v}^a = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon^a(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}, \quad \mathbf{v}^b = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}, \quad \mathbf{v}^{ab} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon^{ab}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}, \quad (9)$$

где  $\varepsilon^a$ ,  $\varepsilon^b$ , и  $\varepsilon^{ab}$  — дисперсионные соотношения для электронов в зонах  $a$ ,  $b$  и  $ab$  соответственно,  $\mathbf{k}$  — волновой вектор вдоль оси ДУНТ.

Таким образом, задача расчета тензора проводимости сводится к нахождению двухчастичных функций Грина. Подробности методики расчета изотропной проводимости как функции температуры рассмотрены в работе [32]. В [32] было обнаружено, что температурная зависимость проводимости  $G(T)$  для всех рассмотренных ДУНТ имеет характерное поведение, присущее проводникам, другими словами, их проводимость монотонно уменьшается с увеличением температуры. Следует отметить, что этот результат был ожидаемым, так как по отдельности каждый из слоев ДУНТ обладает именно металлической проводимостью. При этом обнаружен эффект насыщения проводимости в области температур от 50 до 160 К, где зависимость проводимости  $G(T)$  становится более пологой и образует плато. Появление плато объясняется более сложным зонным строением ДУНТ по сравнению с однослойными углеродными нанотрубками [32]. Однако в работе [32] не рассмотрены эффекты, связанные с конечной длиной слоев ДУНТ. В настоящей публикации мы используем данную методику для расчета зависимостей проводимости  $G(T)$  для ряда  $(n, n)@(m, m)$  ДУНТ с конечной длиной внешнего слоя, на которых может быть основан нанотермометр. На рис. 2 представлены зависимости  $G(T)$  для  $(4, 4)@(10, 10)$  ДУНТ с бесконечным внутренним слоем и различными длинами внешнего слоя. Эти зависимости позволяют сделать следующие выводы: 1) аналогично случаю ДУНТ с бесконечным внешним слоем обнаружено плато в зависимости проводимости  $G(T)$  в области температур  $T = 50-160$  К; 2) проводимость ДУНТ слабо изменяется при изменении длины внешнего слоя на порядки величины. Эти выводы справедливы для всех рассмотренных ДУНТ. Зависимости проводимости  $G(T)$  для различных  $(n, n)@(m, m)$  ДУНТ сравниваются на рис. 3. Отметим, что зависимости  $G(T)$  для  $(5, 5)@(10, 10)$  и  $(5, 5)@(11, 11)$  ДУНТ, а также для  $(6, 6)@(11, 11)$  и  $(6, 6)@(12, 12)$  ДУНТ почти совпадают. Таким обра-



**Рис. 2.** Температурная зависимость проводимости  $(4, 4)@(10, 10)$  ДУНТ для различных длин  $L$  внешнего слоя (в длинах  $l_c$  элементарных ячеек ДУНТ).  $L = 10l_c$  (1),  $30l_c$  (2),  $50l_c$  (3),  $100l_c$  (4) и  $1000l_c$  (5).



**Рис. 3.** Температурная зависимость проводимости различных ДУНТ с длиной внешнего слоя в 100 элементарных ячеек. 1 —  $(4, 4)@(10, 10)$ , 2 —  $(5, 5)@(10, 10)$ , 3 —  $(5, 5)@(11, 11)$ , 4 —  $(6, 6)@(11, 11)$ , 5 —  $(6, 6)@(12, 12)$ , 6 —  $(7, 7)@(12, 12)$ .

зом, рис. 3 показывает, что проводимость  $(n, n)@(m, m)$  ДУНТ с конечной длиной внешнего слоя определяется радиусом внутреннего слоя и слабо зависит от расстояния между слоями. Эти результаты согласуются с результатами для бесконечных  $(n, n)@(m, m)$  ДУНТ, для которых проводимость  $G(T)$  увеличивается с увеличением радиуса ДУНТ [32].

Проведенные расчеты показывают, что при фиксированном относительном положении слоев проводимость  $G(T)$  для  $(n, n)@(m, m)$  ДУНТ с конечной длиной внешнего слоя слабо зависит от температуры для  $T > 50$  К, причем в области температур  $T = 50-160$  К зависимость  $G(T)$  имеет плато. Таким образом, мы показали, что для рассмотренной системы выполняется условие А для возможности использовать систему в качестве нанотермометра.

#### 4. Расчет характеристик нанотермометра

Схемы нанотермометров для системы с челноком с подвижным внешним слоем и телескопической системы с подвижным внутренним слоем показаны на рис. 4. Возможны также схемы нанотермометров для системы с челноком с подвижным внутренним слоем и телескопической системы с подвижным внешним слоем.

Вследствие симметрии ДУНТ с соизмеримыми нехиральными слоями экстремумы функций  $U(z)$  и  $G(z, T)$  совпадают. Как показано в разделе 2, энергия взаимодействия слоев  $U(z)$  может быть интерполирована вблизи минимума следующим выражением:

$$U(z') = U_1 + \frac{\pi \Delta U_z}{\delta_z^2} z'^2, \quad (10)$$

где  $U_1$  — минимум энергии взаимодействия слоев и  $z'$  — смещение подвижного слоя относительно положения, соответствующего этому минимуму. Зависимость проводимости от относительного положения слоев может быть интерполирована для малых величин  $z'$  выражением

$$G(z') = G_1(T)(1 + \gamma z'^2), \quad (11)$$

где  $G_1$  — значение проводимости ДУНТ, соответствующее минимуму энергии взаимодействия слоев (т.е. основному состоянию системы).

Подставив (10) и (11) в (1), получим следующее выражение для зависимости проводимости нанотермометра от температуры:

$$G(T) = G_1(T) \left( 1 + \frac{\gamma \delta_z^2 k T}{\pi \Delta U_z} \right) = G_1(T)(1 + H \Delta T). \quad (12)$$

Условие успешной работы нанотермометра, означающее, что тепловые колебания слоев вносят основной вклад в зависимость проводимости от температуры, будет выполнено, если

$$H \Delta T \gg \frac{\Delta G_1(T)}{\langle G_1(T) \rangle}, \quad (13)$$

где  $\Delta G_1(T)$  — разница между максимальным и минимальным значениями проводимости системы в основном состоянии для рабочего диапазона температур  $\Delta T$  нанотермометра;  $\langle G_1(T) \rangle$  — средняя проводимость системы в основном состоянии в диапазоне температур  $\Delta T$ . С помощью рис. 2 и 3 получим оценку

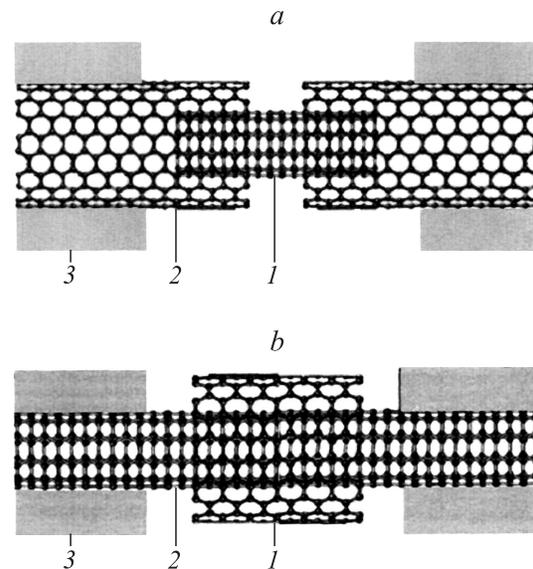
$$\frac{\Delta G_1(T)}{\langle G_1(T) \rangle} \sim 1 \quad (14)$$

для рабочего диапазона температур нанотермометра  $\Delta T = 250$  К от 50 до 300 К.

Для того чтобы оценить возможность выполнения условия  $G$  для нанотермометра на основе (6, 6)@(11, 11) ДУНТ, используем результаты расчета энергии взаимодействия слоев, представленные в разделе 2, и результаты расчета проводимости этой

ДУНТ из работы [12]. Мы интерполировали зависимости проводимости (6, 6)@(11, 11) ДУНТ от относительного положения слоев для телескопической системы, представленные на рис. 3 в работе [12], с помощью выражения (11) и получили следующие оценки коэффициента  $\gamma$ :  $\gamma = 855 \pm 124 \text{ \AA}^{-2}$  для длины перекрытия слоев в 10 элементарных ячеек ДУНТ и  $\gamma = 21 \pm 12 \text{ \AA}^{-2}$  для длины перекрытия слоев в 250 ячеек. В соответствии с расчетами из первых принципов (см. раздел 2) барьер для относительного движения слоев вдоль оси ДУНТ составляет  $\Delta U_z = 78.4 \text{ meV}$  и  $\Delta U_z = 1.96 \text{ eV}$  для длины перекрытия слоев 10 и 250 элементарных ячеек соответственно. Для рабочего диапазона температур нанотермометра  $\Delta T = 250$  К величина произведения  $H \Delta T$  принимает значения  $117 \pm 17$  и  $0.43 \pm 0.10$  для длины перекрытия слоев 10 и 250 элементарных ячеек соответственно. Таким образом, проведенные оценки демонстрируют выполнение условия  $C$  для небольших перекрытий слоев (десятки длин элементарных ячеек или несколько нанометров).

Сделаем оценки минимальных размеров электромеханических нанотермометров, основанных на ДУНТ с нехиральными соизмеримыми слоями, для которых возможно выполнение условия  $D$ . Условие  $D$  означает, что амплитуда тепловых колебаний короткого подвижного слоя достаточно мала, чтобы не нарушить работу нанотермометра. Очевидно, что чем короче подвижный слой, тем больше амплитуда тепловых колебаний этого слоя. С увеличением амплитуды тепловых колебаний возможна диффузия короткого подвижного слоя вдоль фиксированного длинного слоя. Такая диффузия является нежелательным процессом, который может нарушить работу нанотермометра.



**Рис. 4.** Схемы электромеханических нанотермометров на основе ДУНТ: телескопический нанотермометр с подвижным внутренним слоем (a) и нанотермометр с подвижным челноком из внешнего слоя (b). 1 — подвижный слой, 2 — фиксированный слой, 3 — электроды.

Характерные размеры нанотермометров с подвижным слоем — челноком — на основе  $(n, n)@(m, m)$  ДУНТ ( $L_{es}$  — величина зазора между челноком и электродом,  $L$  — длина челнока,  $L_{nt}$  — полная длина нанотермометра между электродами,  $t$  — время работы нанотермометра,  $T$  — рабочая температура нанотермометра)

Нанотрубка	$L_{es}, \text{nm}$	$t = 10^{-6} \text{ s}$		$t = 100 \text{ лет}$	
		$L, \text{nm}$	$L_{nt}, \text{nm}$	$L, \text{nm}$	$L_{nt}, \text{nm}$
$T = 100 \text{ K}$					
(4, 4)@(10, 10)	$2.9 \pm 1.1$	$15.5 \pm 7.0$	$21.4 \pm 7.0$	$120 \pm 45$	$125 \pm 45$
(5, 5)@(11, 11)	$2.0 \pm 0.5$	$12.3 \pm 3.5$	$16.3 \pm 3.5$	$82 \pm 21$	$85 \pm 21$
(6, 6)@(12, 12)	$1.4 \pm 0.3$	$10.1 \pm 2.0$	$12.9 \pm 2.0$	$60 \pm 11$	$63 \pm 11$
(5, 5)@(10, 10)	$0.36 \pm 0.02$	$4.2 \pm 0.2$	$4.9 \pm 0.2$	$17.3 \pm 0.8$	$18.0 \pm 0.8$
(6, 6)@(11, 11)	$0.27 \pm 0.01$	$3.2 \pm 0.1$	$3.8 \pm 0.1$	$12.8 \pm 0.5$	$13.3 \pm 0.5$
(7, 7)@(12, 12)	$0.19 \pm 0.01$	$2.58 \pm 0.07$	$2.96 \pm 0.07$	$9.7 \pm 0.3$	$10.0 \pm 0.3$
$T = 300 \text{ K}$					
(4, 4)@(10, 10)	$9.0 \pm 3.5$	$27 \pm 15$	$45 \pm 15$	$340 \pm 130$	$360 \pm 130$
(5, 5)@(11, 11)	$5.9 \pm 1.5$	$25 \pm 8$	$36 \pm 8$	$240 \pm 60$	$245 \pm 60$
(6, 6)@(12, 12)	$4.2 \pm 0.8$	$21 \pm 5$	$29 \pm 5$	$170 \pm 30$	$180 \pm 30$
(5, 5)@(10, 10)	$1.1 \pm 0.05$	$10.2 \pm 0.5$	$12.4 \pm 0.5$	$49.5 \pm 2.5$	$51.5 \pm 2.5$
(6, 6)@(11, 11)	$0.8 \pm 0.02$	$7.9 \pm 0.3$	$9.5 \pm 0.3$	$36.6 \pm 1.3$	$38.2 \pm 1.3$
(7, 7)@(12, 12)	$0.6 \pm 0.2$	$6.4 \pm 0.2$	$7.6 \pm 0.2$	$27.8 \pm 0.7$	$29.0 \pm 0.7$

Рассмотрим такую диффузию на примере системы с челноком (рис. 4, *b*). Диффузия короткого подвижного слоя (челнока  $l$ ) вдоль фиксированного слоя  $2$  не будет нарушать работу нанотермометра только в случае, когда смещение  $d$  челнока в результате диффузии за время  $t$  работы нанотермометра будет меньше, чем расстояние  $L_{es}$  между челноком и электродом  $3$

$$d = \sqrt{2Dt} < L_{es}, \quad (15)$$

где  $D$  — коэффициент диффузии для движения челнока вдоль фиксированного слоя. Коэффициент диффузии для относительного движения слоев ДУНТ определяется следующим выражением [20]:

$$D = A \exp\left(-\frac{BL}{T}\right), \quad A = \pi \delta_z \sqrt{\frac{\Delta U_z}{2m}}, \quad B = \frac{\Delta U_z N_a}{l_m k}, \quad (16)$$

где  $m$  — масса атома углерода,  $N_a$  — число атомов в элементарной ячейке подвижного слоя,  $l_m$  — длина элементарной ячейки подвижного слоя,  $L$  — длина подвижного слоя. Подставляя (16) в (15), получим выражения для минимальной длины челнока

$$L = \frac{T}{B} \ln\left(\frac{2At}{L_{es}^2}\right) \quad (17)$$

и полной длины нанотермометра между электродами

$$L_{nt} = \frac{T}{B} \ln\left(\frac{2At}{L_{es}^2}\right) + 2L_{es}. \quad (18)$$

Полная длина нанотермометра между электродами минимальна при  $L_{es} = T/B$ . Это условие для минимума длины не зависит от времени работы нанотермометра.

Выражения (17) и (18) использованы нами для расчета полной длины нанотермометра и длин конструктивных элементов этой НЭМС. Для (6, 6)@(11, 11) ДУНТ использовано значение барьера  $\Delta U_z$ , полученное в настоящей работе экстраполяцией зависимости  $U(z)$  с помощью выражения (4). Для остальных рассмотренных ДУНТ взяты значения барьера  $\Delta U_z$ , рассчитанные нами с помощью метода функционала плотности в работе [33] как разницы между значениями энергии для относительных положений слоев, соответствующих экстремумам зависимости  $U(z)$ . Рассмотрена работа нанотермометра в двух режимах: импульсное измерение температуры за время  $10^{-6}$  с и работа без сбоев в течение 10 лет. Результаты расчета представлены в таблице.

## 5. Заключение

В настоящей статье рассмотрена работа электромеханического нанотермометра, основанного на взаимодействии слоев двуслойных углеродных нанотрубок. Показано, что нанотермометр может быть использован для измерения температуры в пространственно локализованных областях с размерами сотни нанометров. Так как измерение температуры в рассмотренном нанотермометре основано на измерении проводимости, нанотермометр может быть калиброван с использованием термодпары. В этом случае измерение температуры с помощью нанотермометра может иметь в принципе такую же точность, как и при измерении с помощью термодпары.

Отметим, что электромеханический нанотермометр, рассмотренный в настоящей работе, принципиально отличается от нанотермометра, основанного на нанотрубке, заполненной галлием [34,35]. В этом нанотермометре измерение температуры основано на измерении длины

колонки жидкого галлия внутри углеродной нанотрубки, которая растет с температурой в результате теплового расширения (при этом длина нанотрубки около  $10 \mu\text{m}$ ). Для измерения длины колонки галлия необходимы как предварительная калибровка, так и последующая идентификация нанотермометра с помощью просвечивающей электронной микроскопии, что делает проблематичным измерение температуры непосредственно во время эксперимента. Электромеханический нанотермометр не имеет указанного недостатка и может быть использован, в частности, в качестве составной части НЭМС для измерения температуры непосредственно во время их работы. Рассматривался также термометр с размером около  $1 \mu\text{m}$ , основанный на туннельном переходе сверхпроводник–диэлектрик–металл, который предназначен для измерения температур  $< 1 \text{ K}$  [36]. Это существенным образом отличается от рабочего диапазона температур нанотермометра, предложенного в настоящей работе.

Обсудим возможные применения электромеханического нанотермометра на основе нанотрубки. Такие нанотермометры могут быть использованы в медицинских нанороботах [37] для определения температуры индивидуальных клеток. Ряд нанотермометров, интегрированных в микросхему, может быть использован для контроля распределения температуры внутри микросхемы.

В настоящее время достигнут значительный прогресс в методах нанотехнологии, делающих возможным изготовление и работу НЭМС на основе углеродных нанотрубок (см. также обзор [21]): разработана методика измерения проводимости индивидуальных нанотрубок. Возможны перемещение одностенных нанотрубок и относительное движение слоев многостенных нанотрубок с помощью наноманипулятора, удаление с нанотрубок закрывающих концы колпачков, нарезка слоев нанотрубок на части желаемой длины и уменьшение длины нанотрубок. С помощью методики, основанной на омическом нагреве нанотрубок, получены нанотрубки с коротким внешним слоем (челноком). Разработаны методы однозначного определения индексов хиральности однослойных нанотрубок и слоев двухслойных нанотрубок. Разрабатываются методы получения нанотрубок с определенными индексами хиральности. Все это позволяет надеяться на то, что рассмотренный в настоящей работе нанотермометр может быть изготовлен с использованием нанотехнологий ближайшего будущего.

## Список литературы

- [1] H. Park, J. Park, A.K.L. Lim, E.H. Anderson, A.P. Alivisatos, P.L. McEuen. *Nature* **404**, 57 (2000).
- [2] R. Saito, M. Fujita, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. *Appl. Phys. Lett.* **60**, 2204 (1992).
- [3] J. Cumings, A. Zettl. *Science* **289**, 602 (2000).
- [4] A. Kis, K. Jensen, S. Aloni, W. Mickelson, A. Zettl. *Phys. Rev. Lett.* **97**, 025 501 (2006).
- [5] Yu.E. Lozovik, A.V. Minogin, A.M. Popov. *Phys. Lett. A* **313**, 112 (2003).
- [6] Ю.Е. Лозовик, А.В. Миногин, А.М. Попов. *Письма в ЖЭТФ* **77**, 759 (2003).
- [7] E. Bichoutskaia, M.I. Heggie, Yu.E. Lozovik, A.M. Popov. *Fullerenes, Nanotubes Carbon Nanostruct.* **14**, 131 (2000).
- [8] L. Maslov. *Nanotechnology* **17**, 2475 (2006).
- [9] A.M. Popov, E. Bichoutskaia, Yu.E. Lozovik, A.S. Kulish. *Phys. Status Solidi A* **204**, 1911 (2007).
- [10] A.M. Fennimore, T.D. Yuzvinsky, W.Q. Han, M.S. Fuhrer, J. Cumings, A. Zettl. *Nature* **424**, 408 (2003).
- [11] B. Bourlon, D.C. Glatti, L. Forro, A. Bachtold. *Nano Lett.* **4**, 709 (2004).
- [12] I.M. Grace, S.W. Bailey, C.J. Lambert. *Phys. Rev. B* **70**, 153 405 (2004).
- [13] M.A. Tunney, N.R. Cooper. *Phys. Rev. B* **74**, 075 406 (2006).
- [14] B. Gao, Y.F. Chen, M.S. Fuhrer, D.C. Glattli, A. Bachtold. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 196 802 (2005).
- [15] *Carbon Nanotubes: synthesis, structure, properties and applications* / Eds M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P. Avouris. Springer-Verlag, Berlin (2001).
- [16] M. Damnjanović, I. Milošević, T. Vuković, R. Sredanović. *Phys. Rev. B* **60**, 2728 (1999).
- [17] T. Vuković, M. Damnjanović, I. Milošević. *Physica E* **16**, 259 (2003).
- [18] M. Damnjanović, T. Vuković, I. Milošević. *Eur. Phys. J. B* **25**, 131 (2002).
- [19] A.V. Balikov, Yu.E. Lozovik, A.G. Nikolaev, A.M. Popov. *Chem. Phys. Lett.* **385**, 72 (2004).
- [20] E. Bichoutskaia, A.M. Popov, A. El-Barbary, M.I. Heggie, Yu.E. Lozovik. *Phys. Rev. B* **71**, 113 403 (2005).
- [21] Ю.Е. Лозовик, А.М. Попов. *УФН* **177**, 786 (2007).
- [22] M. Damnjanović, E. Dobardžić, I. Milošević, T. Vuković, B. Nikolić. *New J. Phys.* **5**, 148.1 (2003).
- [23] P.R. Briddon, R. Jones. *Phys. Status Solidi B* **217**, 131 (2000).
- [24] G.B. Bachelet, D.R. Hamann, M. Schlüter. *Phys. Rev. B* **26**, 4199 (1982).
- [25] J.P. Perdew, Y. Wang. *Phys. Rev. B* **45**, 13 244 (1992).
- [26] R.H. Telling, M.I. Heggie. *Phil. Mag. Lett.* **83**, 411 (2003).
- [27] L.X. Benedict, N.G. Chopra, M.L. Cohen, A. Zettl, S.G. Lonie, V.H. Crespi. *Chem. Phys. Lett.* **286**, 490 (1998).
- [28] C.S.G. Cousins, M.I. Heggie. *Phys. Rev. B* **67**, 024 109 (2003).
- [29] Ю.А. Изюмов, М.И. Кацнельсон, Ю.Н. Скрябин. *Магнетизм коллективизированных электронов*. Физматлит, М. (1994). 368 с.
- [30] С.В. Тябликов. *Методы квантовой теории магнетизма*. Наука, М. (1975). 528 с.
- [31] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. *Методы квантовой теории поля в статистической физике*. Добросвет, М. (1998). 514 с.
- [32] Г.С. Иванченко, Н.Г. Лебедев. *ФТТ* **49**, 183 (2007).
- [33] E. Bichoutskaia, A.M. Popov, M.I. Heggie, Yu.E. Lozovik. *Phys. Rev. B* **73**, 045 435 (2006).
- [34] Y. Gao, Y. Bando. *Nature* **415**, 599 (2002).
- [35] Y. Gao, Y. Bando, Z. Liu, D. Golberg, H. Nakanishi. *Appl. Phys. Lett.* **83**, 2913 (2003).
- [36] D.R. Schmidt, C.R. Yung, A.N. Cleland. *Appl. Phys. Lett.* **83**, 1002 (2003).
- [37] A.M. Popov, Yu.E. Lozovik, S. Fiorito, L'Hocine Yahia. *Int. J. Nanomedicine* **2**, 361 (2007).