

## Моделирование нанодвигателей и исследование их свойств

С.Г. Псахье, К.П. Зольников, Ив.С. Коноваленко

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, 634021, Россия

Исследован процесс формирования незамкнутых наноразмерных структур из двухслойных алюминийно-медных пленок. Моделирование проводилось на основе метода молекулярной динамики. Межатомные взаимодействия описывались потенциалами, полученными в рамках метода погруженного атома. Изучено поведение незамкнутых наноструктур при тепловом воздействии. Показана возможность преобразования моделируемыми наноструктурами тепловой энергии в энергию механического движения. Рассчитана зависимость частоты колебаний незамкнутой наноструктуры от ее размера и изменения массы колеблющихся краев.

## Simulation of nanoengines and investigation of their properties

S.G. Psakhie, K.P. Zolnikov, and Iv.S. Konovalenko

Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, 634021, Russia

The formation of open nanosized structures consisting of two-layer aluminum-copper films is studied. Simulation is performed on the basis of a molecular dynamics method. Interatomic interactions are described by potentials obtained in the framework of the embedded atom method. The behavior of the open nanostructures under thermal action is studied. We demonstrate that the simulated structures can transform thermal energy into mechanical motion energy. The dependence of the oscillation frequency of an open nanostructure on its size and mass variation of oscillating ends is calculated.

### 1. Введение

В настоящее время изучению формирования наноструктур и возможности их использования в наноразмерных устройствах различного функционального назначения уделяется пристальное внимание [1–3]. Тем не менее, открытыми остаются вопросы, связанные с атомными механизмами, ответственными за процессы образования наноструктур, не достаточно исследованы способы контроля над движением таких структур, а также их способность к эффективному преобразованию подводимой к ним энергии. Изучение данных вопросов является краеугольным камнем в решении многих фундаментальных проблем и важным шагом в направлении практического использования наноразмерных структур, например в наномашинах и при проектировании нанороботов и наноразмерных устройств.

### 2. Постановка задачи

Целью настоящей работы является исследование закономерностей процесса формирования наноразмерных незамкнутых структур различной конфигурации из

двухслойной металлической пленки и трансформации подводимой к ним тепловой энергии в энергию механического движения. Будет изучена возможность использования моделируемых наноструктур в качестве источников и приемников высокочастотного электромагнитного излучения.

Все расчеты в работе проводились в рамках метода молекулярной динамики [4] с использованием многочастичных потенциалов межатомного взаимодействия, рассчитанных методом погруженного атома [5, 6].

### 3. Результаты моделирования

Исходным материалом для моделирования формирования незамкнутых структур являлись двухслойные металлические пленки, один слой которых состоял из атомов Al, а другой из атомов Cu. Такие пленки формировались следующим образом. Из бесконечного во всех направлениях идеального монокристалла Al выделялась тонкая пленка, толщина которой составляла несколько параметров решетки. В одном из ее направлений задавались периодические граничные условия, в других на-

Таблица 1

Частоты колебаний незамкнутых наноструктур в зависимости от длины медных включений							
Форма наноструктуры	Рис. 1, а			Рис. 1, б			
	$L_i/L$	1:6	1:5	1:3	1:5	1:4	1:3
$\nu$ , ГГц		42.3	38.3	36.1	19.4	20.8	23.4

$L_i/L$  — отношение длины медных включений  $L_i$  к общей длине рассматриваемой пленки  $L$ .

правлениях моделировались свободные поверхности. На основе метода искусственного демпфирования определялась равновесная атомная структура тонкой пленки. Полученная таким образом структура делилась на два равных по толщине слоя. Один из ее слоев состоял из атомов исходного монокристалла (Al), а другой слой полностью (или только определенные его участки) полагался состоящим из атомов Cu. Созданная таким образом двухслойная структура вновь релаксировалась методом искусственного демпфирования. В процессе релаксации в моделируемой пленке вследствие несогласования параметров решеток элементов (равновесный параметр решетки Al равен 7.619 ат. ед., а Cu — 6.831 ат. ед.) возникали угловые моменты, пленка начинала самопроизвольно сворачиваться и формировать некоторую наноструктуру.

В качестве примера рассмотрим случай алюминиевой пленки с внесенными в нее двумя медными слоями, длины которых меньше размеров, необходимых для сворачивания пленки в замкнутую конфигурацию. При релаксации нанопленки в зависимости от взаимного расположения медных включений формируются стабильные наноструктуры, показанные на рис. 1. При термическом воздействии на такие структуры их края начинают совершать колебательные движения. Это связано с тем, что коэффициенты теплового расширения слоев различны по величине. Результаты расчетов показали, что частоты колебаний полученных наноструктур слабо зависят от температуры нагревания. В то же время, длина медных включений и их взаимное расположение в алюминиевой пленке оказывают существенное влияние на частоту колебаний моделируемой наноструктуры (табл. 1).

Так, варьируя геометрию расположения и размеры медных включений, можно менять отклик моделируемой незамкнутой наноструктуры на внешнее воздействие.

Изменение поведения незамкнутого нанообъекта при его нагреве может быть осуществлено путем увеличения массы его колеблющихся частей. На рис. 2, а показана исходная наноструктура, на свободный край которой были нанесены дополнительные атомные слои (рис. 2, б). При формировании этих структур использовались следующие граничные условия: вдоль оси  $OY$  задавались периодические граничные условия, а вдоль  $OX, OZ$  моделировались свободные поверхности. Плоский участок (правая половина наноструктур на рис. 2) был составлен из жестко закрепленных атомов пленки, в то время как значения координат атомов другого края пленки определялись из решения уравнений движения.

Кинетическая температура полученной пленки была значительно ниже комнатной. Для исследования ее поведения при нагреве температура пленки повышалась до 300 К. При нагревании наноструктуры ее свободная часть начинала совершать колебательные движения. Первоначально проводилось исследование влияния длины свободной части на колебательные движения. Длина свободной части варьировалась в интервале от 40 до 55 % от исходной длины пленки вдоль оси  $OX$ . Частоты колебаний исследуемых наноструктур лежали в диапазоне от 17.1 до 28.3 ГГц. Расчеты показали, что при одинаковом значении кинетической температуры увеличение длины свободного элемента наноструктуры приводило к уменьшению частоты ее колебаний (рис. 3, а). Результаты расчетов хорошо согласуются с выражением для резонансной частоты балки, закрепленной одним концом [2].

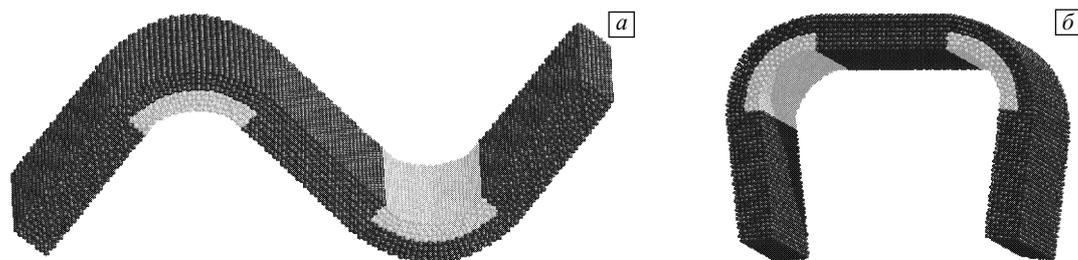


Рис. 1. Различные формы незамкнутых наноструктур. Медные включения (серый цвет) расположены: по разные стороны пленки (а), по одну сторону пленки (б)

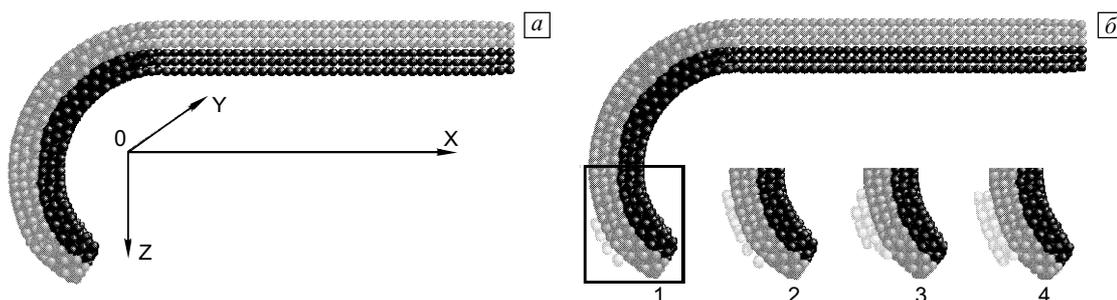


Рис. 2. Наноструктура, сформированная из двухслойной пленки (а); та же структура, содержащая дополнительные присоединенные атомные цепочки Al (б): 1 (1), 2 (2), 3 (3), 4 % (4) от веса свободного края наноструктуры (черные кружки — атомы Cu, темно-серые — Al, светло-серые — дополнительные присоединенные атомы Al)

Увеличение веса свободного края наноструктуры достигалось добавлением на его поверхность цепочек атомов алюминия (рис. 2, б). Масса дополнительных слоев варьировалась от 1 до 4 % массы колеблющейся части наноструктуры. Анализ расчетов показал, что увеличение массы свободного элемента приводит к увеличению амплитуды и практически не влияет на частоту колебаний нанобалки (рис. 3, б). В процессе колебаний амплитуда увеличивается, вследствие того что моделируемая система не является замкнутой и к ней периодически подводится тепловая энергия.

В настоящей работе исследовалась возможность трансформации подводимой энергии незамкнутыми наноструктурами и использования их в качестве нано-

двигатель. Для этого проводилось моделирование преобразования тепловой энергии в механическую наноструктурой, изображенной на рис. 1, б. Температурный интервал, в котором выполнялись расчеты, варьировался от 130 до 230 К. В изучаемой модели работа вязких сил среды, окружающей наноструктуру, не учитывалась, а диссипация энергии механического движения (как и сообщение тепловой энергии) осуществлялась за счет

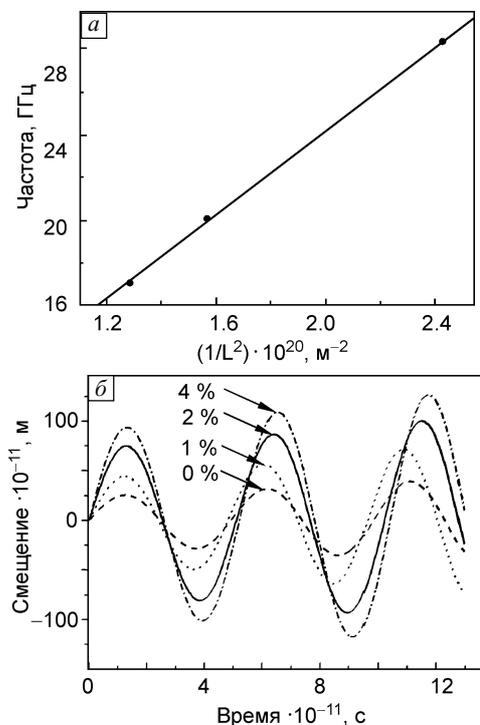


Рис. 3. Зависимость частоты колебаний наноструктуры от длины  $L$  ее свободного края (а) и зависимости смещения свободного края наноструктуры от времени при изменении его массы на 1, 2, 4 % (б)

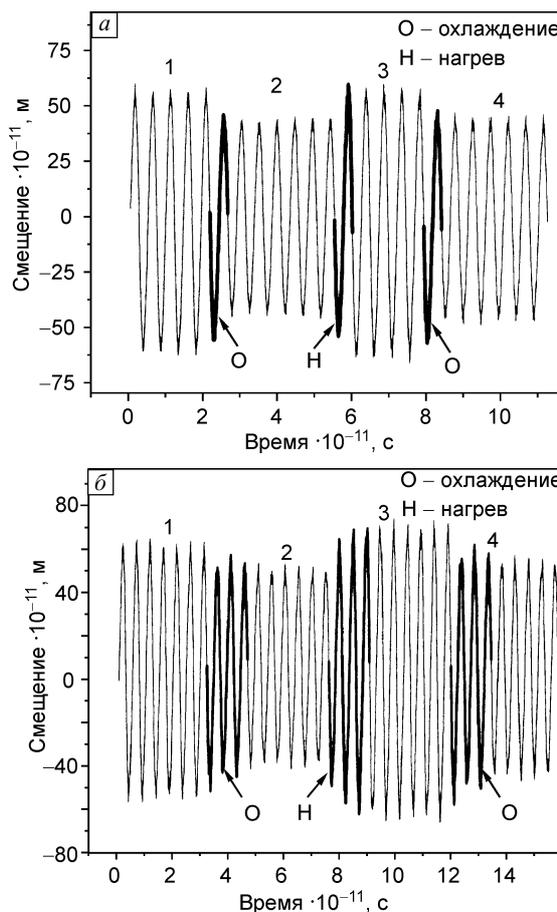


Рис. 4. Зависимости смещения свободных краев моделируемой незамкнутой наноструктуры от времени. Продолжительность нагрева (охлаждения) составляла один (а) и 3 периода колебаний (б)

плавного уменьшения (увеличения) кинетической температуры наноструктуры на 100 К. На рис. 4 приведены зависимости смещения свободных краев моделируемой структуры от времени. Участки кривых 1, 3 соответствуют состоянию наноструктуры после подведения к ней тепловой энергии, области 2, 4 — состоянию структуры после ее охлаждения на 100 К. Таким образом, меняя температуру изучаемой наноструктуры, можно изменять амплитуду колебаний ее краев. В работе также исследовалось влияние продолжительности нагрева (охлаждения) моделируемой системы на характер колебательных движений. Продолжительность нагрева (охлаждения) менялась от одного до трех временных периодов колебаний наноструктуры. Результаты расчетов показали, что колебания изучаемой наноструктуры слабо зависят от продолжительности теплового воздействия в указанном интервале температур (рис. 4).

#### 4. Заключение

Таким образом, на основании проведенных расчетов можно заключить, что молекулярно-динамическое моделирование является эффективным подходом для изучения как самого процесса формирования наноструктур, так и для исследования их физико-механических свойств. В частности, было показано, что для исследуемых наноструктур длина и масса свободного края являются параметрами, влияющими на частотный спектр и

амплитуду колебаний, варьируя которые можно получать наноструктуры, обладающие заданными характеристиками отклика на внешние воздействия. Исследуемые незамкнутые наноструктуры могут рассматриваться как нанодвигатели, которые преобразуют тепловую энергию в механическую. В случае нанесения заряженного слоя на колеблющийся край моделируемая структура может служить излучателем или приемником электромагнитных волн. В перспективе исследуемые наноструктуры могут быть использованы как составные элементы микро- и наноустройств различного функционального назначения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 05-08-18138-а).

#### Литература

1. *Bolzani V., Venturi M., Credi A.* Devices and Machines. A Journey into the Nanoworld. – Weinheim: Wiley VCH, 2003. – 494 p.
2. *Пул Ч., Оуэнс Ф.* Нанотехнологии. – М.: Техносфера, 2005. – 336 с.
3. *Нанотехнология в ближайшем десятилетии. Прогноз направления исследований / Под ред. М.К. Роко, Р.С. Уильямса, П. Аливисатоса.* – М: Мир, 2002. – 292 с.
4. *Rapaport D.C.* The Art of Molecular Dynamics Simulation. – Cambridge: Cambridge University Press, 1995. – 414 p.
5. *Daw M.S., Baskes M.I.* Embedded atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // *Phys. Rev.* – 1984. – V. B29. – No. 12. – P. 6443–6453.
6. *Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S.* Embedded-atom-method for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // *Phys. Rev.* – 1986. – V. B33. – No. 12. – P. 7983–7991.