

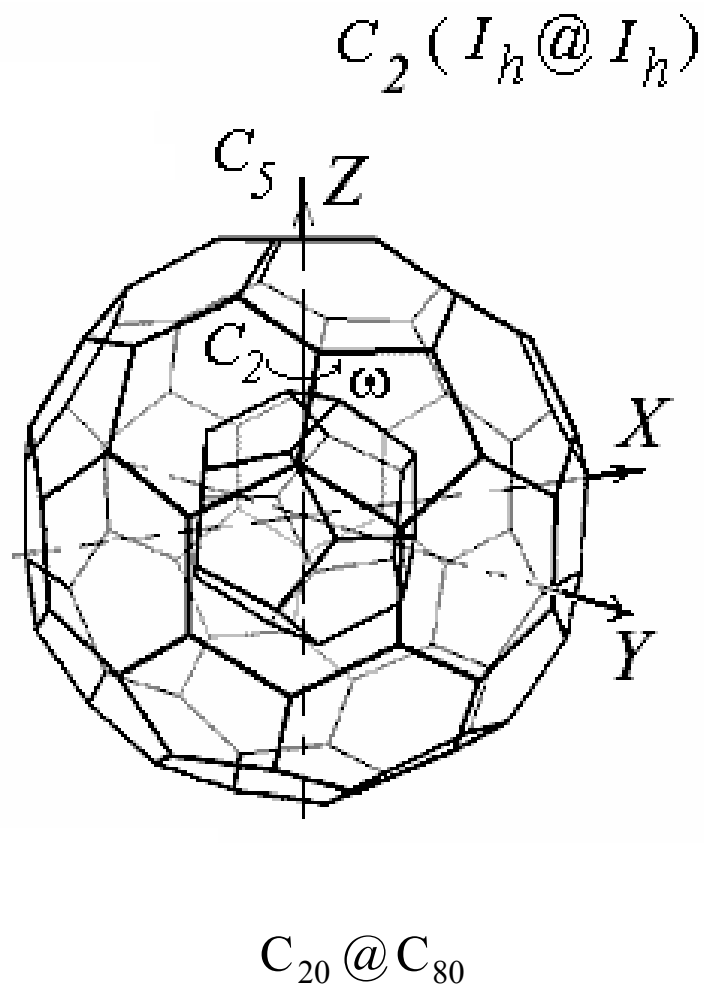
Квантовый гироскоп на основе фуллерен-нанотрубка

Глухова Ольга Евгеньевна

д.ф.-м.н., доцент кафедры радиотехники и электродинамики

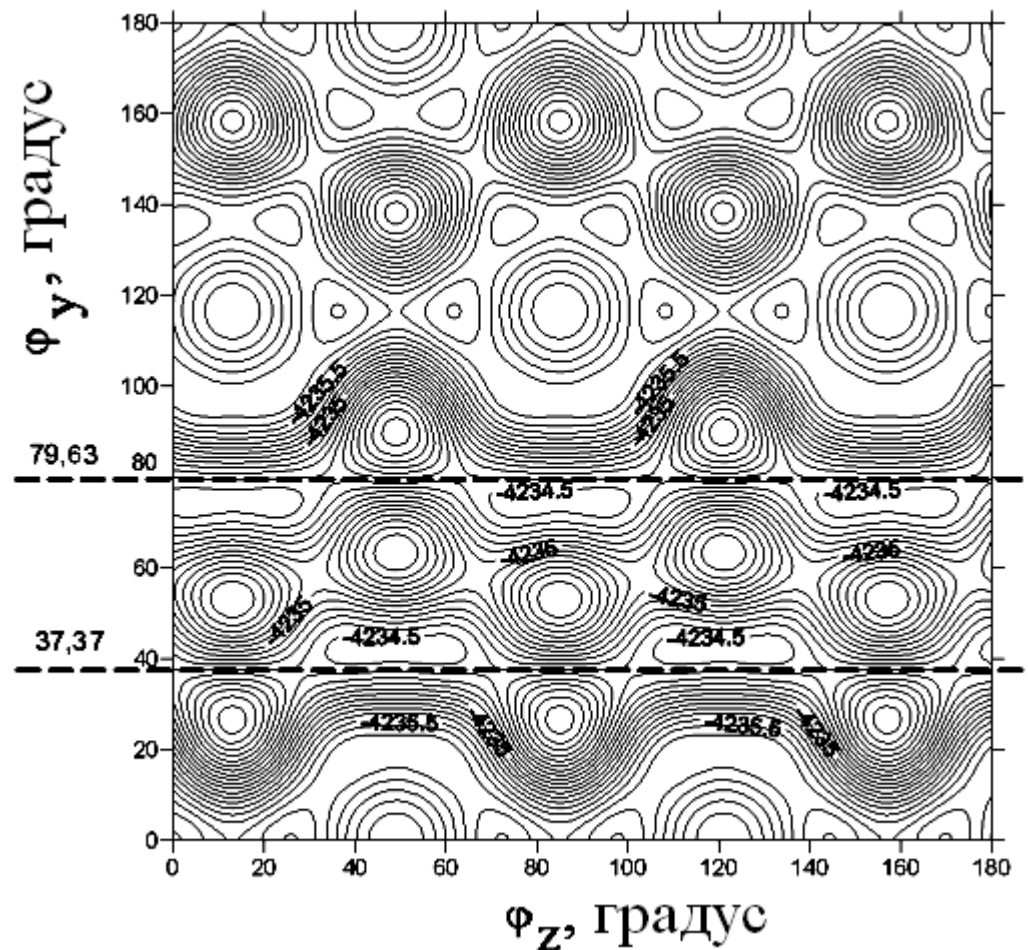
Саратовского госуниверситета им. Н.Г.Чернышевского

glukhovaoe@info.sgu.ru



в состоянии свободного вращения C_{20}

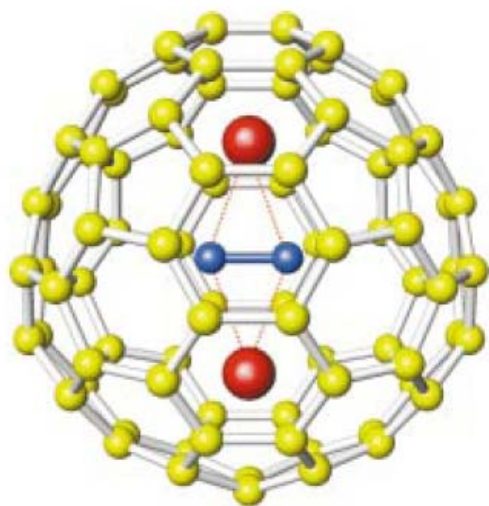
Фуллерен C_{20} является шаровым волчком с моментом инерции $J = 8,332 \cdot 10^{-38} \text{ г} \cdot \text{см}^2$ и частотой $\omega = 4,07 \cdot 10^9 \text{ рад/с}$ ($6,48 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$).



Карта изолиний

О.Е. Глухова, А.И. Жбанов, А.Г. Резков Исследование вращения внутренней оболочки наночастицы $C_{20}@C_{80}$ // Физика твердого тела, 2005, вып.2. С.376-382

Экспериментальные исследования наногироскопа



Experiment
(cm⁻¹)

11.0

18.5

25.0

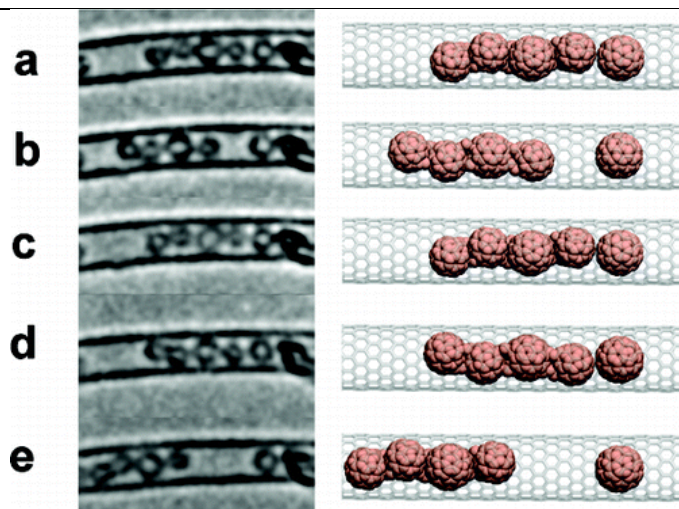
34.7

48.6

62.2

76.0

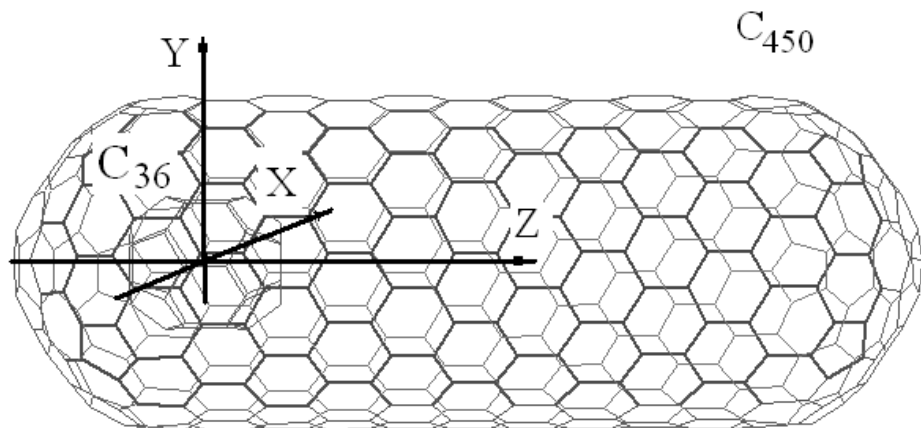
M. Krause, M. Hulman, H. Kuzmany, O. Dubay, G. Kresse, K. Vietze, G. Seifert, C. Wang, and H. Shinohara **Fullerene Quantum Gyroscope** // *Phys. Rev. Lett.*, V. 93, N. 13.



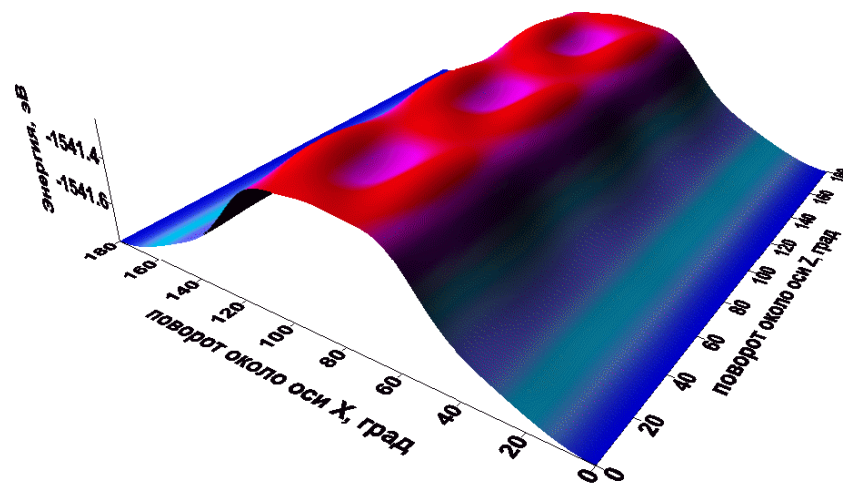
Вращение цепочки из фуллеренов C₆₀, сплавленных электронным пучком. Полученная структура C₃₀₀ свободно вращается в полости трубки.

Jamie H. Warner et al. Rotating Fullerene Chains in Carbon Nanopeapods // *Nano Lett.*, 2008, 8 (8), pp 2328–2335

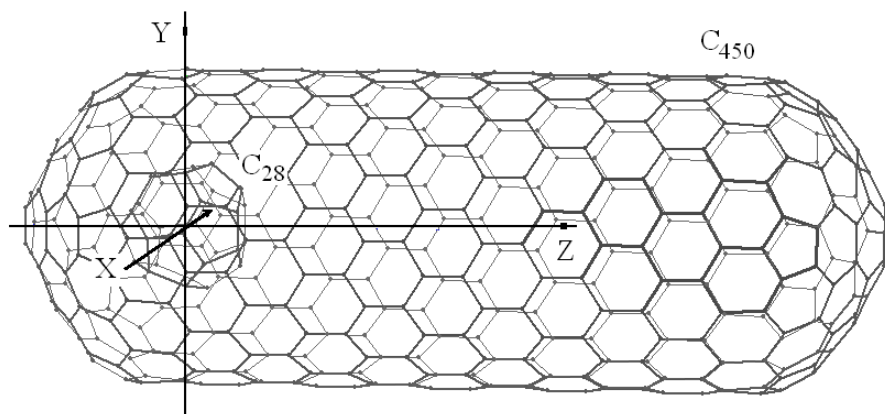
Свободное вращение фуллерена около оси симметрии нанотрубки



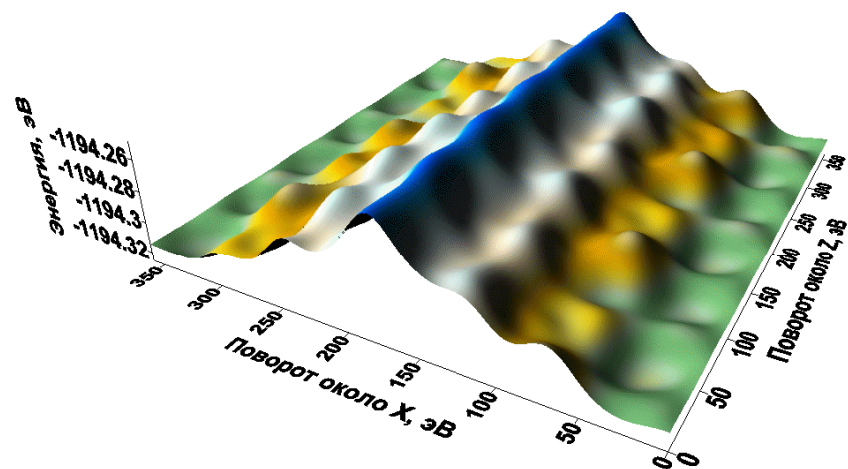
$C_{36}@C_{450}$



Изменение полной энергии системы



$C_{36}@C_{450}$



Изменение полной энергии системы

Полная энергия E_{tot} кластера рассчитывается как сумма:

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{rep}} + E_{\text{bond}} + E_{\text{VDV}},$$

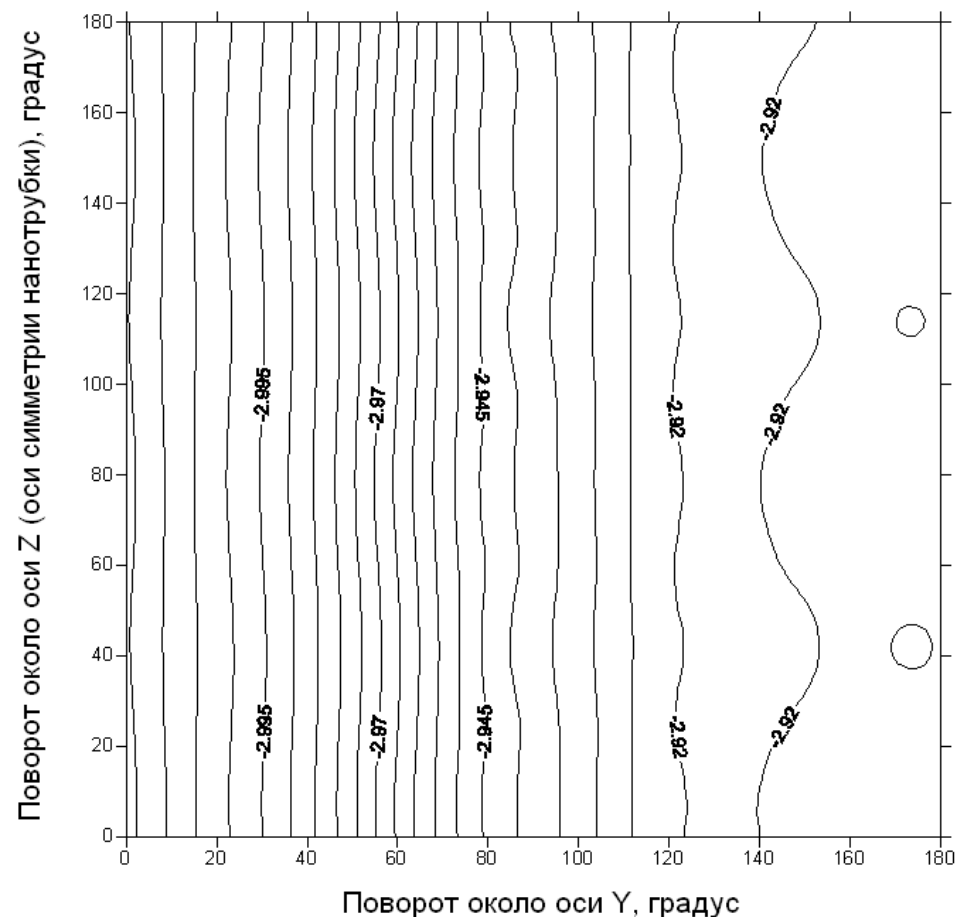
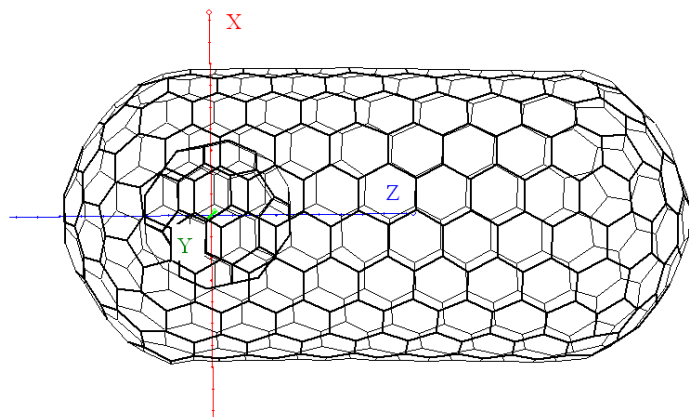
Феноменологическая энергия представляется суммой парных отталкивательных потенциалов

$$E_{\text{rep}} = \sum_{i < j} V_{\text{rep}}(|r_i - r_j|),$$

где i, j – номера взаимодействующих атомов; r_i, r_j – декартовы координаты.

Энергия заполненных энергетических уровней

$$E_{\text{bond}} = \sum_i \varepsilon_i(r_i).$$



Карта изолиний ван-дер-ваальсовой энергии

$C_{60}@C_{680}$

Вращательный барьер при вращении около оси Z
равен 0,0006 эВ.

В поле удерживающего потенциала нанотрубки фуллерен является симметричным волчком, у которого два главных момента инерции совпадают $I_A=I_B$, но отличаются от третьего I_C (А, В, С отвечают осям X, Y, Z). Свободное вращение фуллерена наблюдается около оси Z.

Стационарные вращательные состояния характеризуются тремя квантовыми числами: моментом вращения J, его проекцией J_ζ на ось волчка и его проекцией J_z на фиксированную в пространстве ось z. В данном случае J_ζ и J_z совпадают.

Собственные значения J_ζ обозначим буквой k: $k=-J, \dots, +J$, где J (целое число) – величина момента волчка. Тогда в состоянии с определенными значениями J и k энергия равна:

$$E_k^J = \frac{\hbar^2}{2I_A} J(J+1) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{I_C} - \frac{1}{I_A} \right) k^2$$

Вращательные уровни C_{60}	
k	Частота, $см^{-1}$
0	0,1207
1	0,1228
2	0,1291
3	0,1395
4	0,1542
5	0,1730
6	0,1960
7	0,2232
8	0,2545
9	0,2901
10	0,3298
11	0,3733
12	0,4213

Вращательные уровни квантового наногироскопа

Гироскопы	Фуллерен $C_{36} (D_{6d})$ в трубке C_{450}	Фуллерен $C_{28} (T_d)$ в трубке C_{450}	Нанокластер $C_{60} (D_{6d})$ в трубке C_{450}
k	Частота, $см^{-1}$	Частота, $см^{-1}$	Частота, $см^{-1}$
0	46,3	19,9	34,9
+1	46,4	20,3	35,0
2	46,5	21,4	35,2
3	46,7	23,3	35,6
4	47,0	25,9	36,1
5	47,4	29,2	36,8
6	47,8	33,3	37,6
7	48,3	38,1	38,7
8	48,9	43,7	39,8
9	49,6	50,0	41,1
10	50,4	57,1	42,6
11	51,2	64,9	44,2
12	52,1	73,4	45,9

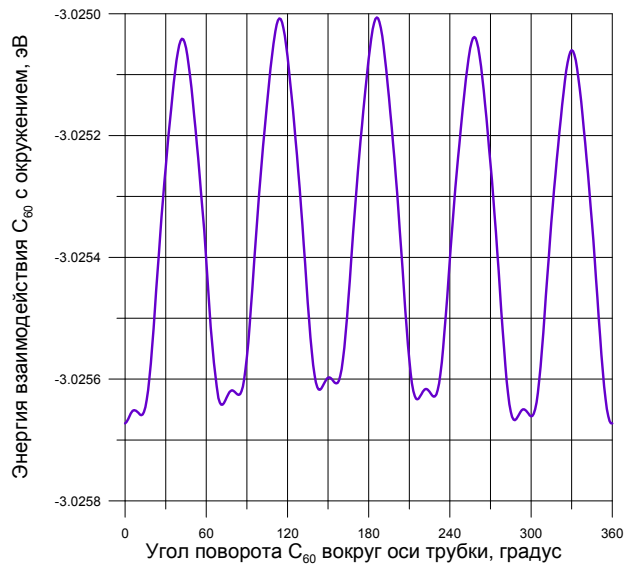
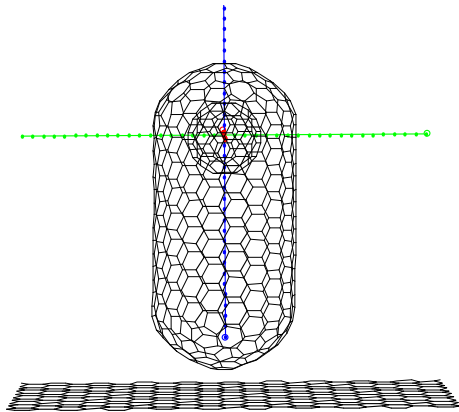
Условия, предопределяющие существование наногироскопа:

- 1) расстояние между фуллереном и стенкой нанотрубки должно быть в пределах $3,1 \div 3,4 \text{ \AA}$,
- 2) в основном состоянии гибридной системы оси симметрии нанотрубки и фуллерена должны совпадать.

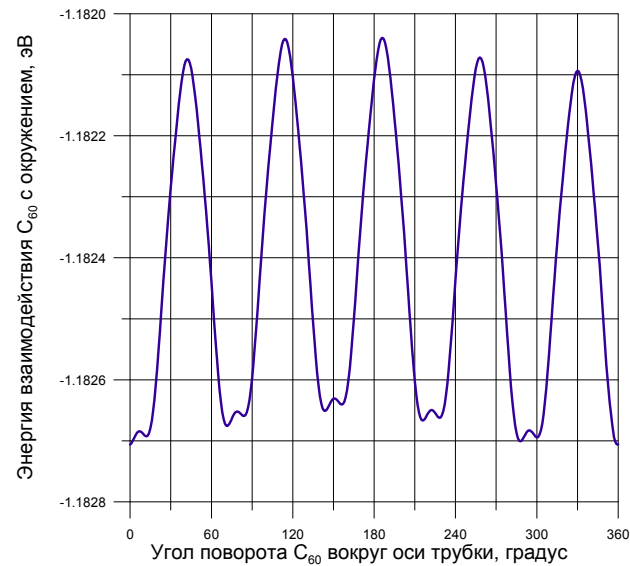
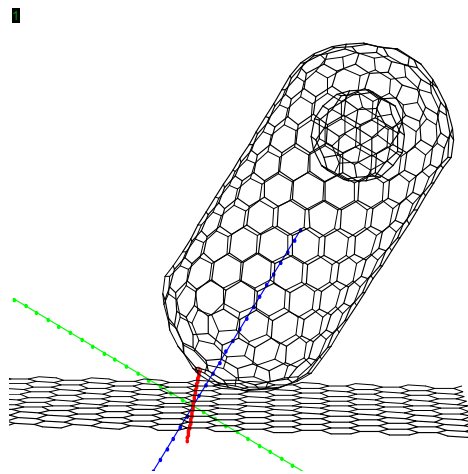
Глухова О.Е., Мещанов В.П., Салий И.Н. Функциональные наноустройства на базе углеродных гибридных соединений // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. – 2007. – Т. 10. – № 2. – С.71-75.

О.Е. Глухова Функциональные наноустройства на основе наночастицы $C_{60}@C_{450}$ // Нано- и микросистемная техника, 2007. № 3. С.52-57

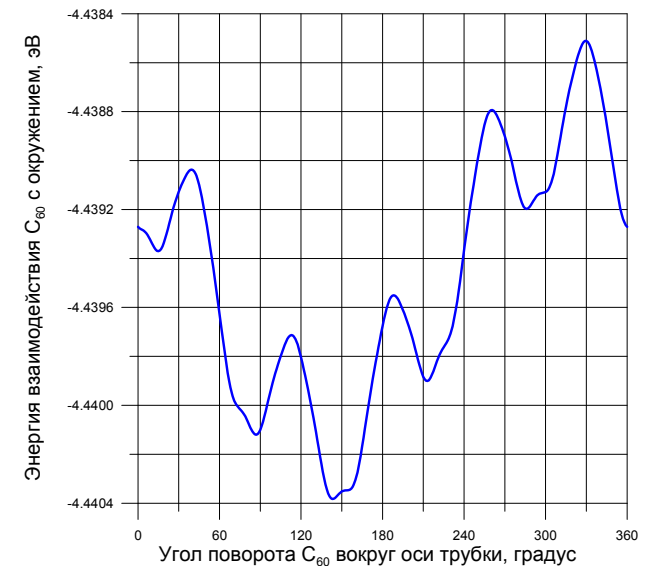
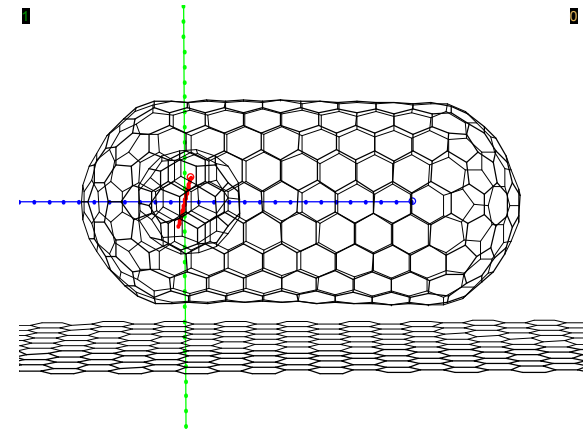
Взаимодействие системы фуллерен-нанотрубка с подложкой



Трубка C₄₈₀ - вертикально на подложке
(фуллерен далеко от подложки)

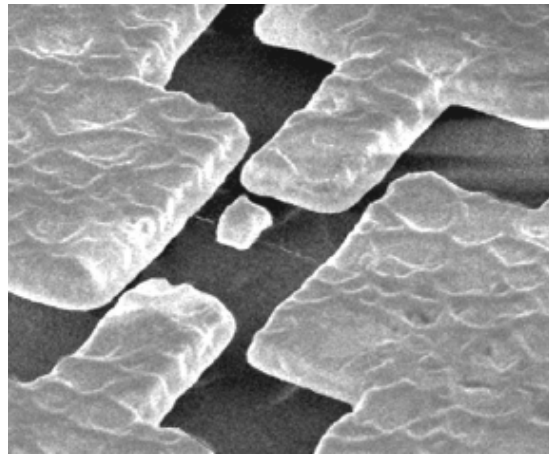


Трубка C₄₈₀ - угол 30 градус

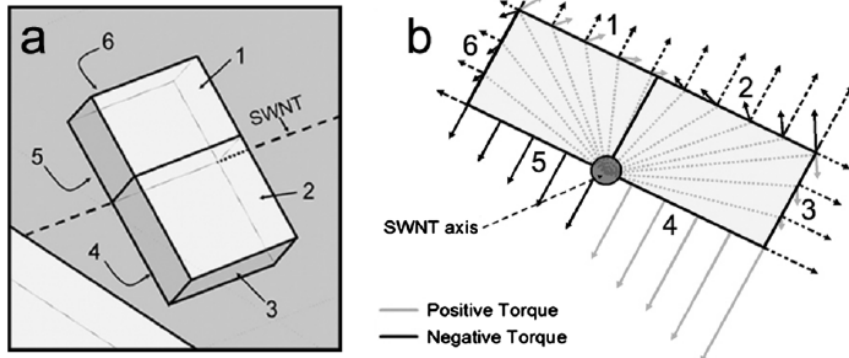


Трубка C₄₈₀ лежит на графеновой подложке

Управление положением оси наногироскопа – оси нанотрубки



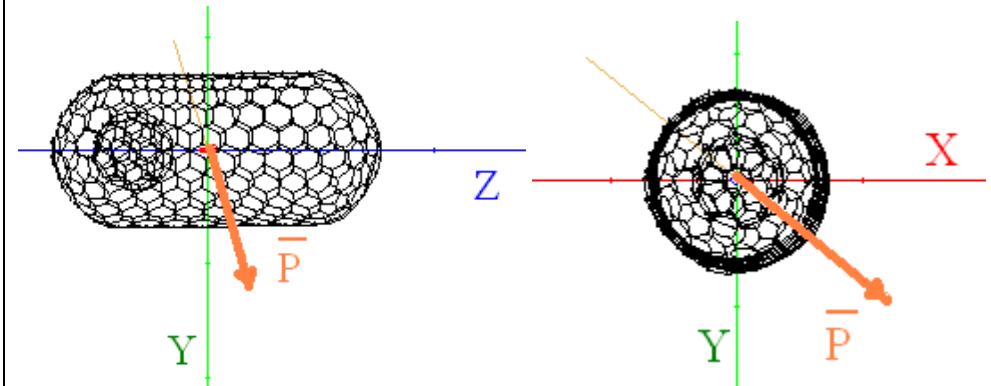
Подвешенная нанотрубка с прикрепленной лопастью



Вращение оси нанотрубки.

Крутящий момент, созданный электростатическим полем.

A. R. Hall, L. An, J. Liu, L. Vicci, M. R. Falvo, R. Superfine and S. Washburn Experimental Measurement of Single-Wall Carbon Nanotube Torsional Properties // PHYSICAL REVIEW LETTERS, **96**, 256102 (2006)



Дипольный момент (в рамках метода сильной связи):

$$\mu = e \cdot \sum_I Z_I \mathbf{R}_I - e \cdot \sum_i \mathbf{r}_i,$$

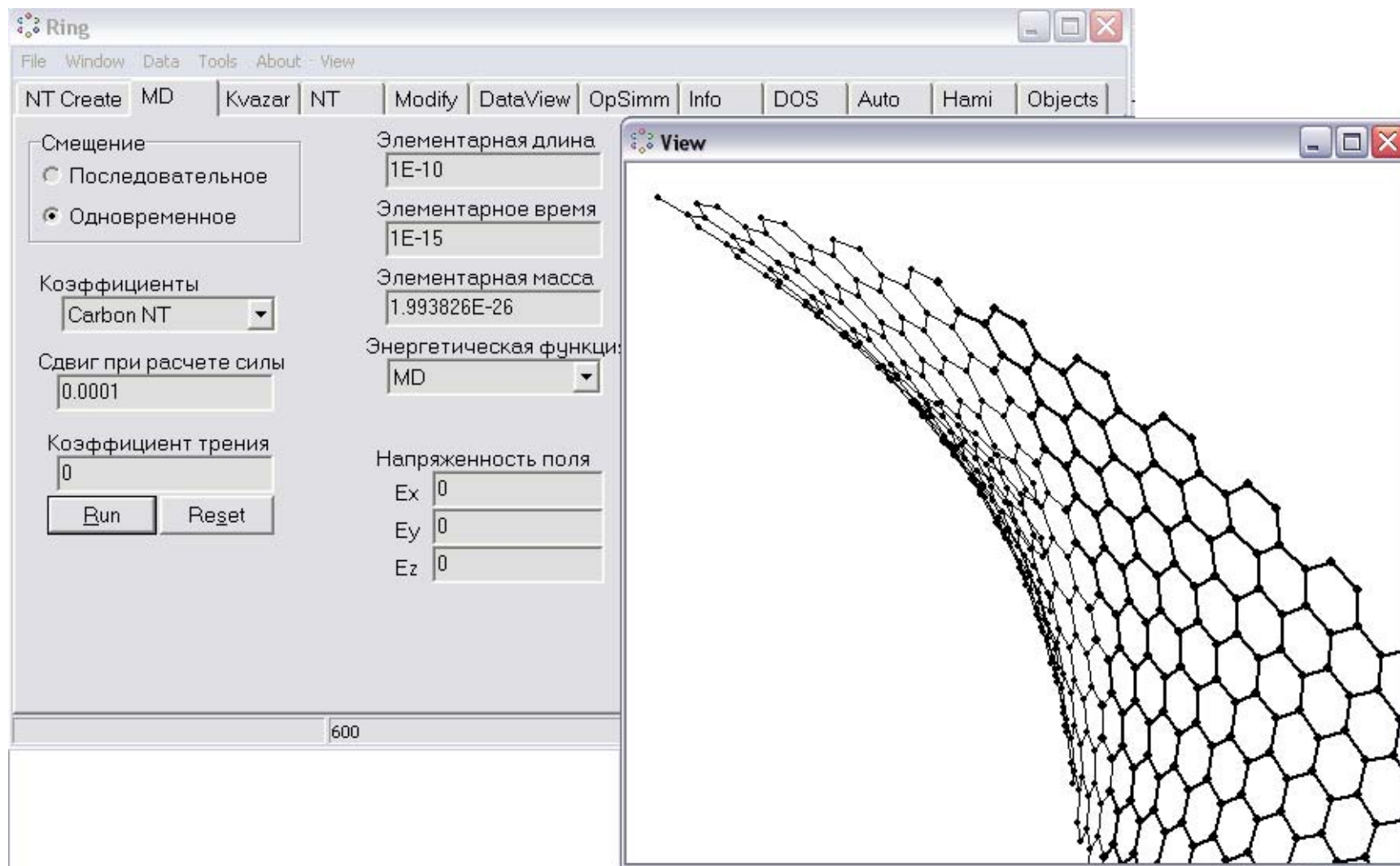
где r_i , R_I – радиус-векторы электрона и ядра атома, Z_I – эффективный заряд ядра атома, соответствующий по абсолютной величине суммарному заряду валентных электронов.

Дипольный момент системы фуллерен-нанотрубка:

1.32 debye (1.01; 0.81; 0.24) – tight binding approach

0.96 debye (0.83; 0.25; 0.4) – PM3

О.Е. Глухова Тонкие углеродные тубулярные нанокластеры в однородном электростатическом поле // Нано- и микросистемная техника, 2008. № 7. С.8-12



Методы: молекулярная механика, метод сильной связи, теория диполя на связи

Авторы: О.Е.Глухова, О.А.Терентьев

Возможные приложения результатов

1. Исследование динамики квантового ротатора во вращающейся системе координат может найти применение при проведении высокоточных измерений, и таким образом окажется существенно полезно для фундаментальных исследований. Например, можно предположить, что станет возможным создать квантовый аналог «крутильных весов» на основе квантовых наногироскопов.
2. Нанороботы могут получить медико-биологическое применение, при этом наногироскопы необходимы для создания микродвигателя.
3. Наногироскоп может использоваться как гироскопический биосенсор, частота вращения которого зависит от присоединившихся к нему белков (в частности, подобный метод может применяться для диагностики раковых заболеваний).
4. Новый сверхминиатюрный гироскоп может служить для стабилизации нано- и микроинструментов в нанохирургии.

Задачи дальнейших исследований в направлении квантового наногироскопа

- 1) Изучение орбитальной динамики фуллерена в поле удерживающего потенциала нанотрубки при ее вращении.
- 2) Исследование влияния колебательных мод на вращение фуллерена.
- 3) Изучение и описание квантовых эффектов пространственной ориентировки фуллерена, как следствие квантования ориентационных степеней свободы – орбитальной динамики.
- 4) Исследование влияния электрического поля на ориентацию оси наногироскопа и вращательные состояния в системе фуллерен-нанотрубка.