

ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ ИЗГИБНОЙ ЖЕСТКОСТИ НАНООБОЛОЧЕК

В связи с развитием нанотехнологий актуальной является задача определения механических характеристик объектов наноразмерного масштабного уровня. Большинство теоретических исследований основано на использовании уравнений макроскопической теории упругости. Вместе с тем, многими исследователями отмечалось различие между значениями модулей упругости, полученными из микро- и макроэкспериментов. Статья посвящена разработке теоретических основ экспериментального определения изгибной жесткости нанооболочек.

Многими исследователями отмечалось несоответствие между значениями модулей упругости, полученными из микро- и макроэкспериментов. В работах [1, 3] на примере двумерной монокристаллической полосы теоретически исследована зависимость значений модуля Юнга и изгибной жесткости от числа атомарных слоев монокристалла. Сравнение результатов работ [1, 3] показывает, что три выражения для изгибной жесткости: выражение, известное из континуальной теории, выражение, полученное путем подстановки в формулу континуальной теории модуля Юнга, вычисленного для дискретной модели [3], и выражение, полученное непосредственно для дискретной модели [1], при малом числе атомарных слоев существенно различаются. Следовательно, использование формул континуальной теории, игнорирующих дискретные свойства материала в направлении толщины нанообъекта, может привести к значительным погрешностям. Вместе с тем, очевидно, что в тех направлениях, где число атомарных слоев велико, учет дискретных свойств становится несущественным. Поэтому при расчете нанообъектов использование континуальных уравнений, скорее всего, допустимо. Таким образом, важной задачей является разработка метода непосредственного определения изгибной жесткости без использования каких-либо формул, связывающих изгибную жесткость с толщиной нанообъекта и модулем Юнга материала. В работе [2] проведено исследование динамики цилиндрических спиральных нанооболочек [4, 5], на основе которого разработана методика экспериментальной проверки применимости континуальной теории для расчета наноразмерных объектов, а также предложен способ экспериментального определения изгибной жесткости нанооболочек. Главной трудностью, которая неизбежно возникнет при реализации предложенного в [2] метода, является закрепление нанообъекта. Техническая проблема заключается в закреплении нанообъекта таким образом, чтобы измеряемые частоты были бы действительно собственными частотами колебаний исследуемого образца, а не того микрообъекта, на котором закреплен образец. Избежать указанные выше технические трудности позволяет разработанная ниже методика, в основе которой лежит анализ свободных колебаний нанообъекта на подложке.

Основные уравнения теории упругих оболочек. Ниже приведена сводка основных уравнений классической линейной теории оболочек; для краткости записи использован аппарат прямого тензорного исчисления:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \underline{\underline{T}} &= \rho \frac{d^2 \underline{\underline{u}}}{dt^2}, & \nabla \cdot \underline{\underline{M}} + \underline{\underline{T}}_x &= 0, \\ \underline{\underline{T}} \cdot \underline{\underline{a}} + \frac{1}{2} (\underline{\underline{M}} \cdot \underline{\underline{b}}) \underline{\underline{c}} &= {}^4\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}, & \underline{\underline{M}}^\top &= {}^4\underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{x}}, \\ \underline{\underline{\varepsilon}} &= \frac{1}{2} ((\nabla \underline{\underline{u}}) \cdot \underline{\underline{a}} + \underline{\underline{a}} \cdot (\nabla \underline{\underline{u}})^\top), & \underline{\underline{x}} &= (\nabla \underline{\underline{\varphi}}) \cdot \underline{\underline{a}} + \frac{1}{2} ((\nabla \underline{\underline{u}}) \cdot \underline{\underline{c}}) \underline{\underline{b}}, \end{aligned}$$

$$\underline{\varphi} = - \underline{n} \times (\nabla \underline{u}) \cdot \underline{n}, \quad \underline{\underline{b}} = - \nabla \underline{n}, \quad \underline{\underline{c}} = - \underline{\underline{a}} \times \underline{n}. \quad (1)$$

Здесь $\underline{\underline{T}}$, $\underline{\underline{\underline{M}}}$ – тензоры сил и моментов; знаком $(\cdot)_x$ обозначен векторный инвариант тензора; ρ – поверхностная плотность массы; \underline{u} – вектор перемещений; $\underline{\varphi}$ – вектор углов поворота; $\underline{\underline{\varepsilon}}$ – тензор деформации растяжения-сдвига в касательной плоскости; $\underline{\underline{\alpha}}$ – тензор деформации изгиба-кручения, $\underline{\underline{A}}$, $\underline{\underline{\underline{C}}}$ – тензоры жесткости оболочки; \underline{n} – вектор единичной нормали к поверхности оболочки; $\underline{\underline{a}}$ – единичный тензор в касательной плоскости.

Изгибные колебания цилиндрической оболочки. Рассмотрим цилиндрическую оболочку, радиус которой равен R . При описании кинематики оболочки будем использовать цилиндрическую систему координат $r \equiv R$, θ , z . Известно, что тензор жесткости оболочки на растяжение и сдвиг в касательной плоскости $\underline{\underline{A}}$ пропорционален толщине оболочки h , а тензор жесткости на изгиб и кручение $\underline{\underline{\underline{C}}}$ пропорционален h^3 . Поэтому в случае $h/R \ll 1$ рассматриваемую оболочку можно считать нерастяжимой. Таким образом, тензор деформации растяжения-сдвига в касательной плоскости будем считать равными нулю:

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = 0. \quad (2)$$

При этом $\underline{\underline{A}} \rightarrow \infty$, соответствующее соотношение упругости теряет смысл, а тензор сил в касательной плоскости $\underline{\underline{T}} \cdot \underline{\underline{a}}$ определяется непосредственно из уравнений динамики. Тензор жесткости на изгиб и кручение $\underline{\underline{\underline{C}}}$ имеет вид

$$\underline{\underline{\underline{C}}} = D \left[\frac{1+\nu}{2} \underline{\underline{\underline{c}}} \underline{\underline{\underline{c}}} + \frac{1-\nu}{2} (\underline{\underline{a}}_2 \underline{\underline{a}}_2 + \underline{\underline{a}}_4 \underline{\underline{a}}_4) \right]. \quad (3)$$

Здесь D – изгибная жесткость оболочки, $\underline{\underline{a}}_2 = \underline{e}_\varphi \underline{e}_\varphi - \underline{e}_z \underline{e}_z$, $\underline{\underline{a}}_4 = \underline{e}_\varphi \underline{e}_z + \underline{e}_z \underline{e}_\varphi$.

Очевидно, что при отсутствии деформации растяжения-сдвига все величины, характеризующие напряженно-деформированное состояние оболочки, зависят только от полярного угла θ . Выберем в качестве основной переменной перемещение по нормали к поверхности оболочки w . Тогда задача о свободных колебаниях оболочки сводится к решению дифференциального уравнения

$$\frac{D}{\rho R^4} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + 1 \right)^2 \frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} + \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - 1 \right) \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = 0. \quad (4)$$

Величины, характеризующие напряженно-деформированное состояние оболочки, связаны с w соотношениями

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} &= -w, & \varphi_z &= \frac{1}{R} \left(u_\theta - \frac{\partial w}{\partial \theta} \right), & \frac{1}{R} \left(\frac{\partial^2 T_{00}}{\partial \theta^2} + T_{00} \right) &= -2\rho \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}, \\ \frac{1}{R} \left(\frac{\partial T_{0r}}{\partial \theta} + \frac{\partial^3 T_{0r}}{\partial \theta^3} - 1 \right)^2 &= \rho \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - 1 \right) \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}, & M_{0z} &= -\frac{D}{R^2} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \theta^2} + w \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Остальные компоненты векторов \underline{u} , $\underline{\varphi}$ и тензоров $\underline{\underline{T}}$, $\underline{\underline{\underline{M}}}$ тождественно равны нулю.

Свободные колебания системы двух цилиндрических оболочек. Рассматривается система двух цилиндрических оболочек одинаковой длины, но разных радиусов. Оболочка радиуса R_1 , поверхностная плотность и изгиб-

ная жесткость которой равны ρ_1 и D_1 , моделирует исследуемый нанообъект. Оболочка радиуса R_2 , поверхностная плотность и изгибная жесткость которой равны ρ_2 и D_2 , моделирует подложку, то есть микрообъект, на котором расположен исследуемый нанообъект. Предполагается, что оси цилиндров параллельны и цилиндры соединяются между собой по линии θ (см. рис. 1). Угол θ для каждой оболочки отсчитывается от линии соединения оболочек против часовой стрелки.

Кинематические условия сопряжения оболочек имеют вид

$$w^{(1)}|_{\theta=0} = w^{(2)}|_{\theta=0}, \quad u_\theta^{(1)}|_{\theta=0} = -u_\theta^{(2)}|_{\theta=0}, \quad \varphi_z^{(1)}|_{\theta=0} = \varphi_z^{(2)}|_{\theta=0}. \quad (6)$$

Силовые условия сопряжения оболочек выглядят так:

$$T_{\theta r}^{(1)}|_{\theta=0} = T_{\theta r}^{(2)}|_{\theta=0}, \quad T_{\theta\theta}^{(1)}|_{\theta=0} = -T_{\theta\theta}^{(2)}|_{\theta=0}, \quad M_{\theta z}^{(1)}|_{\theta=0} = M_{\theta z}^{(2)}|_{\theta=0}. \quad (7)$$

Условия замкнутости оболочек формулируются следующим образом:

$$w^{(k)}|_{\theta=0} = w^{(k)}|_{\theta=2\pi}, \quad u_\theta^{(k)}|_{\theta=0} = u_\theta^{(k)}|_{\theta=2\pi}, \quad \varphi_z^{(k)}|_{\theta=0} = \varphi_z^{(k)}|_{\theta=2\pi}, \quad (8)$$

где $k = 1, 2$. Решения уравнения динамики (4) для обеих оболочек имеют следующую структуру:

$$w^{(k)}(\theta, t) = W^{(k)}(\theta)e^{i\omega t}, \quad W^{(k)} = \sum_{j=1}^3 [A_j^{(k)} \sin(\lambda_{kj}\theta) + B_j^{(k)} \cos(\lambda_{kj}\theta)], \quad (9)$$

где ω – собственная частота; $A_j^{(k)}$, $B_j^{(k)}$ – произвольные постоянные; λ_{kj} – корни характеристических уравнений

$$\lambda_k^6 - 2\lambda_k^4 + (1 - \Omega_k^2)\lambda_k^2 - \Omega_k^2 = 0, \quad \Omega_k = \sqrt{\frac{\rho_k}{D_k}} R_k^2 \omega. \quad (10)$$

Подстановка выражений (9), (10) в уравнения (5) позволяет определить все величины, характеризующие напряженно-деформированное состояние оболочек. Подставив найденное решение в граничные условия (6)–(8), получим однородную систему двенадцати алгебраических уравнений относительно констант $A_j^{(k)}$, $B_j^{(k)}$. Из условия равенства нулю определятеля этой системы получим частотное уравнение. Выберем в качестве основной переменной безразмерную частоту Ω_2 . Тогда коэффициенты частотного уравнения будут зависеть от трех безразмерных параметров: R_1/R_2 , ρ_1/ρ_2 и D_1/D_2 . Следовательно, решение частотного уравнения представляет собой спектр собственных частот

$$\omega_n = \sqrt{\frac{D_2}{\rho_2}} \frac{\Omega_{2n}}{R_2^2}, \quad \Omega_{2n} = \Omega_{2n} \left(\frac{R_1}{R_2}, \frac{\rho_1}{\rho_2}, \frac{D_1}{D_2} \right). \quad (11)$$

Метод экспериментального определения изгибной жесткости нанооболочек. Рассмотрим две системы цилиндрических оболочек с различными физическими и геометрическими характеристиками, но с одинаковыми условиями закрепления (6)–(8) и одинаковыми безразмерными параметрами

$$\frac{R_1}{R_2} = \frac{R_3}{R_4}, \quad \frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{\rho_3}{\rho_4}, \quad \frac{D_1}{D_2} = \frac{D_3}{D_4}. \quad (12)$$

Первая система состоит из нано- и микрооболочки. Собственные частоты

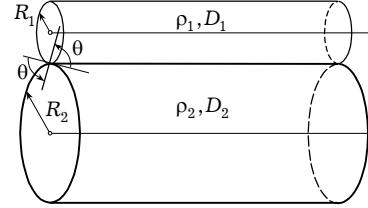


Рис. 1

этой системы обозначим $\omega_n^{(1)}$. Вторая система состоит из микро- и макрооболочки. Ее собственные частоты обозначим $\omega_n^{(2)}$. Согласно формулам (11), (12), спектры безразмерных собственных частот рассматриваемых систем совпадают:

$$\Omega_{2n}^{(1)} = \Omega_{2n}^{(2)}, \quad (13)$$

а истинные собственные частоты этих систем $\omega_n^{(1)}$ и $\omega_n^{(2)}$ связаны с безразмерными частотами $\Omega_{2n}^{(1)}$ и $\Omega_{2n}^{(2)}$ соотношениями:

$$\omega_n^{(1)} = \sqrt{\frac{D_2}{\rho_2}} \frac{\Omega_{2n}^{(1)}}{R_2^2}, \quad \omega_n^{(2)} = \sqrt{\frac{D_4}{\rho_4}} \frac{\Omega_{2n}^{(2)}}{R_4^2}. \quad (14)$$

Согласно формулам (13), (14), отношение собственных частот $\omega_n^{(1)}/\omega_n^{(2)}$ не зависит от их порядкового номера n :

$$\frac{\omega_n^{(1)}}{\omega_n^{(2)}} = \frac{R_4^2}{R_2^2} \sqrt{\frac{D_2 \rho_4}{D_4 \rho_2}}. \quad (15)$$

Таким образом, соотношения (12), (15) могут послужить теоретической основой для экспериментального определения изгибной жесткости нанооболочек. Для определения изгибной жесткости нужно провести следующие измерения и вычисления:

- 1) измерить несколько первых собственных частот системыnano- и микрооболочки $\omega_n^{(1)}$;
- 2) взять для сравнения систему микро- и макрооболочки и, изменяя параметры этой системы и измеряя ее собственные частоты $\omega_n^{(2)}$, добиться того, чтобы отношения $\omega_n^{(1)}/\omega_n^{(2)}$ не зависели бы от порядкового номера частот n ;
- 3) определить изгибные жесткости микро- и макрооболочек и, воспользовавшись последним соотношением из (12), вычислить изгибную жесткость нанооболочки.

Асимптотические оценки. Предложенный выше метод будет эффективным, если окажется возможным реализовать его для системы, в которой размеры исследуемого объекта хотя бы на порядок меньше размеров подложки. Чтобы эксперимент был практически реализуемым, относительные отличия собственных частот $\omega_n^{(1)}$ системы нанообъект-подложка от собственных частот $\omega_n^{(0)}$ подложки без нанообъекта

$$\delta_n = \frac{\omega_n^{(1)} - \omega_n^{(0)}}{\omega_n^{(1)}} \quad (16)$$

должны находиться в пределах точности измерительного прибора. Оценим порядок величин δ_n . Пусть $\omega_n^{(0)}$ – собственные частоты колебаний цилиндрической оболочки с параметрами R_2 , ρ_2 , D_2 , для которой граничные условия формулируются в виде условий замкнутости (8) и условий

$$T_{\theta r}^{(2)}|_{\theta=0} = 0, \quad T_{\theta\theta}^{(2)}|_{\theta=0} = 0, \quad T_{\theta r}^{(2)}|_{\theta=0} = 0. \quad (17)$$

Очевидно, что собственные частоты системы nano- и микрооболочки $\omega_n^{(1)}$ будут мало отличаться от собственных частот микрооболочки $\omega_n^{(0)}$. Следо-

вательно, частоты $\omega_n^{(1)}$ можно представить в виде

$$\omega_n^{(1)} = \omega_n^{(0)} + \varepsilon \tilde{\omega}_n, \quad (18)$$

где ε – безразмерный малый параметр. Асимптотический анализ системы уравнений (5)–(10) показал, что введенным выше малым параметром является величина

$$\varepsilon = \frac{\rho_1 R_1^2}{\rho_2 R_2^2}. \quad (19)$$

Соотношения (16)–(19) дают возможность оценить порядок относительного отличия частот системы нанообъект – подложка от частот подложки без нанообъекта: $\delta_n \sim \varepsilon$. Существующая в настоящее время измерительная техника позволяет измерять собственные частоты с относительной погрешностью $10^{-4}\%$. Величина δ_n находится на пределе разрешающей способности измерительных приборов, если линейные размеры нано- и микрооболочки отличаются в 100 раз.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ № МД-4829.2007.1 и гранта Президента РФ № НШ-3081.2008.1.

1. Иванова Е. А., Кривцов А. М., Морозов Н. Ф. Особенности расчета изгибной жесткости нанокристаллов // РАН. Докл. Акад. наук. – 2002. – **385**, № 4. – С. 494–496.
2. Иванова Е. А., Морозов Н. Ф. Об одном подходе к экспериментальному определению изгибной жесткости нанооболочек // РАН. Докл. Акад. наук. – 2005. – **40**, № 4. – С. 475–479.
3. Кривцов А. М., Морозов Н. Ф. Аномалии механических характеристик наноразмерных объектов // РАН. Докл. Акад. наук. – 2001. – **381**, № 3. – С. 825–827.
4. Принц В. Я. Трехмерные самоформирующиесяnanoструктуры на основе свободных напряженных гетеропленок // Изв. вузов. Физика. – 2003. – № 6. – С. 35–43.
5. Golod S. V., Prinz V. Ya., Mashanov V. I., Gutakovsky A. K. Fabrication of conducting GeSi/Si micro- and nanotubes and helical microcoils // Semicond. Sci. Technol. – 2001. – **16**. – Р. 181–185.

ПРО ВИЗНАЧЕННЯ ЗГИННОЇ ЖОРСТКОСТІ НАНООБОЛОНОК

У зв'язку з розвитком нанотехнологій актуальнує є задача визначення механічних характеристик об'єктів нанорозмірного масштабного рівня. Більшість теоретичних досліджень базується на використанні рівнянь макроскопічної теорії пружності. Разом з тим, багатьма дослідниками відмічалась відмінність між значеннями модулів пружності, отриманими з мікро- та макроекспериментів. Стаття присвячена розробці теоретичних основ експериментального визначення згинної жорсткості нанооболонок.

ON DETERMINATION OF BENDING STIFFNESS OF NANOSHELLS

Advances in high technologies, using nanometer-size structures, require calculation of mechanical properties for the objects of the nanosize scale level. Majority of the theoretical mechanical models for nanoobjects is based on the macroscopic equations of the elasticity theory. However, a lot of researchers have noted inconsistency between the values of the elastic moduli obtained from micro- and macroexperiments. A theoretical foundation for experimental determination of the bending stiffness of nano-shells is carried out in this paper.

Ин-т проблем машиноведения
РАН, Санкт-Петербург, Россия

Получено
24.03.08