

УДК 539.3

ИССЛЕДОВАНИЕ СОБСТВЕННЫХ КОЛЕБАНИЙ СИСТЕМ НАНОТРУБОК

В. А. Еремеев^{*,****}, Е. А. Иванова^{**}, Н. Ф. Морозов^{***},
С. Е. Строчков^{****}

* Южный научный центр РАН, 344006 Ростов-на-Дону

** Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
195251 Санкт-Петербург

*** Санкт-Петербургский государственный университет, 198904 Санкт-Петербург

**** Южный Федеральный университет, 344090 Ростов-на-Дону
E-mails: eremeyev@math.rsu.ru, ivanova@EI5063.spb.edu, morozov@NM1016.spb.edu,
s-sterg@yandex.ru

Проведен анализ собственных колебаний системы параллельных друг другу микро- и нанотрубок, закрепленных горизонтально на упругой подложке. Показано, что с использованием линейной теории оболочек из спектра частот “большой системы”, состоящей из подложки и нанотрубок, можно выделить несколько первых собственных частот, соответствующих изгибным колебаниям одной нанотрубки. Это позволяет оценить ее изгибную жесткость. Полученный вывод подтверждается результатами конечно-элементного моделирования, проведенного в рамках трехмерной теории электроупругости. Представлены результаты модального анализа нанотрубок из арсенида галлия.

Ключевые слова: наномеханика, собственные колебания, нанотрубки, изгибная жесткость, оболочки, электроупругость, метод конечных элементов.

Одной из ключевых проблем наномеханики является определение механических и физических характеристик нанообъектов. Как известно, нанообъекты имеют аномальные свойства, представляющие интерес для приложений и вместе с тем не зависящие, вообще говоря, от свойств макроскопических образцов [1–5]. Один из наиболее эффективных методов определения упругих модулей, в частности изгибной жесткости, используемых в механике макрообъектов, основан на измерении собственных частот исследуемого объекта. При использовании этого метода применительно к нанообъектам возникает проблема измерения их собственных частот. В частности, измерение частот нанообъектов затруднено при использовании оптических методов [6]. Эти методы заключаются в следующем: исследуемый объект закрепляется на рамке макроскопических размеров и возбуждается лучом лазера; затем с помощью второго луча лазера фиксируются амплитуды колебаний в некоторой точке объекта, сигнал преобразуется в электрический, полученная спектрограмма анализируется с помощью спектрометра, в результате чего определяются собственные частоты объекта. Главным, но не единственным фактором, ограничивающим

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 05-01-00094-а, 06-01-00452-а), Фонда содействия отечественной науке, Совета по грантам Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ (грант № НШ-4518.2006.1) и в рамках гранта Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых — кандидатов наук (докторов наук) и их руководителей (№ МД-4829.2007.1).

область применимости метода, является то, что луч лазера представляет собой не точку, а пятно диаметром порядка длины волны света. Поэтому если размер исследуемого объекта оказывается меньше диаметра луча лазера, то результаты измерений не имеют смысла. Таким образом, используя указанные выше оптические методы, измерить частоты одного нанобъекта не представляется возможным. Вместе с тем вполне реально измерение собственных частот системы микроподложка — регулярная структура одинаковых нанобъектов. Основной проблемой, возникающей при измерении частот исследуемых объектов, закрепленных на упругой подложке, является известное в механике перераспределение собственных частот колебаний системы исследуемый объект — подложка между собственными частотами объекта и подложки в отдельности [7].

В [8, 9] предложен метод определения собственных частот ряда наноструктур (нанотрубок и нанокристаллов), основанный на измерении собственных частот “большой системы”, состоящей из высокоориентированного массива (решетки) одинаковых нанотрубок или нанокристаллов, выращенных на подложке и расположенных перпендикулярно подложке. Примером массива нанокристаллов, исследованного в [8, 9], являются полупроводниковые микро- и нанокристаллы оксида цинка. Такие кристаллы, имеющие высокие механические и физические свойства и поэтому представляющие интерес для наномеханики и нанофотоники, получают различными способами, в частности методом импульсного лазерного напыления [10–12]. Как правило, размеры нанобъектов в массиве примерно одинаковы, что позволяет использовать макроскопические размеры самого массива для изучения свойств нанобъектов путем определения первых собственных частот системы решетка нанотрубок (нанокристаллов) — подложка. В [8, 9] показано, что по найденному спектру “большой системы” (решетка — подложка) и спектру подложки можно определить собственные частоты одного нанобъекта.

Идея метода экспериментального определения нескольких первых собственных частот нанобъектов [8, 9] заключается в следующем. Спектр собственных частот системы решетка нанотрубок (нанокристаллов) — подложка делится на две части. Одна часть спектра системы соответствует спектру собственных частот нанобъектов. При колебаниях нанобъектов с этими частотами подложка остается практически неподвижной. Другая часть спектра системы представляет собой спектр собственных частот, близких к собственным частотам подложки без нанобъектов. При этих частотах амплитуда колебаний нанобъектов оказывается существенно меньше амплитуды колебаний подложки. Такое разделение спектра “большой системы” на две части, соответствующие спектрам подложки и нанобъектов, возможно для первых десятков собственных частот, при больших значениях частот формы собственных колебаний имеют более сложный характер. Перечисленные выше свойства системы решетка нанотрубок (нанокристаллов) — подложка выявлены в результате теоретического исследования, проведенного в работах [8, 9]. На основе теоретических данных можно предложить две модификации методики проведения экспериментов по определению собственных частот нанобъектов.

Модификация 1. Измерить несколько первых собственных частот системы решетка нанотрубок (нанокристаллов) — подложка. Измерить собственные частоты такой же подложки без нанобъектов. Сравнить два полученных спектра. Частоты в спектре системы, близкие к частотам подложки без нанобъектов, не представляют интереса. Частоты в спектре системы, которым не находится соответствия среди частот в спектре подложки, представляют собой частоты нанобъектов.

Модификация 2. Измерить резонансные частоты системы, зафиксировав электромагнитное излучение нанобъектов (это можно сделать, поскольку многие нанобъекты представляют собой пьезоэлектрики). Измерить амплитуду колебаний подложки (это можно сделать, поскольку подложка представляет собой макрообъект). Резонансные частоты,

при которых амплитуда колебаний подложки равна нулю, являются собственными частотами нанобъектов.

В случае вертикально расположенных нанотрубок метод [8, 9] позволяет оценить собственные частоты, соответствующие первым изгибным собственным модам нанотрубки. По этим частотам можно определить стержневую изгибную жесткость нанотрубки. Для определения изгибной жесткости нанопленки, из которой изготовлена нанотрубка, необходимо знать собственные частоты нанотрубок, лежащих на подложке.

В работах [13–15] развиты методы получения различных нанобъектов из многослойных полупроводниковых нанопленок (GaAs, InAs, GeSi и др.), в том числе нанотрубок, расположенных горизонтально на подложке. Эффективные физические свойства таких пленок существенно зависят от их строения и остаточных напряжений. Полупроводниковые нанопленки и изготовленные из них наноструктуры представляют интерес для электроники. Дизайн таких наноструктур невозможен без учета действующих в них механических напряжений, в значительной степени определяющих долговечность и прочность наноконструкций.

Целью данной работы является распространение метода определения собственных частот нанобъектов [8, 9] на случай нанотрубок, закрепленных горизонтально.

1. Аналитическое исследование модельной задачи. Рассмотрим модель, состоящую из горизонтально расположенной пластины, моделирующей подложку, и N лежащих на ней цилиндрических оболочек, моделирующих нанобъекты (рис. 1). Пластина толщиной H занимает область $0 \leq x \leq L$, $0 \leq z \leq l$. Все оболочки имеют одинаковые размеры (длину l , радиус R и толщину h) и расположены на одинаковом расстоянии друг от друга $a = L/(N + 1)$, так что их оси направлены вдоль оси z . Предполагается, что оболочки жестко прикреплены к пластине.

С использованием тензорного исчисления основные уравнения линейной теории оболочек записываются в виде [16–18]

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{F} &= \rho \ddot{\mathbf{u}}, & \nabla \cdot \mathbf{M} + \mathbf{T}_\times + \rho \mathbf{L} &= 0, \\ \mathbf{T} \cdot \mathbf{a} + \frac{1}{2} (\mathbf{M} \cdot \cdot \mathbf{b}) \mathbf{c} &= {}^4 \mathbf{A} \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon}, & \mathbf{M}^T &= {}^4 \mathbf{C} \cdot \cdot \boldsymbol{\kappa}, \\ \boldsymbol{\varepsilon} &= \frac{1}{2} ((\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{a} + \mathbf{a} \cdot (\nabla \mathbf{u})^T), & \boldsymbol{\kappa} &= (\nabla \varphi) \cdot \mathbf{a} + \frac{1}{2} ((\nabla \mathbf{u}) \cdot \cdot \mathbf{c}) \mathbf{b}, \\ \boldsymbol{\varphi} &= -\mathbf{n} \times (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n}, & \mathbf{b} &= -\nabla \mathbf{n}, & \mathbf{c} &= -\mathbf{a} \times \mathbf{n}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь \mathbf{T} , \mathbf{M} — тензоры усилий и моментов; \mathbf{T}_\times — векторный инвариант тензора \mathbf{T} ; ρ — поверхностная плотность; \mathbf{u} — вектор перемещений; φ — вектор поворота; $\boldsymbol{\varepsilon}$ — тензор

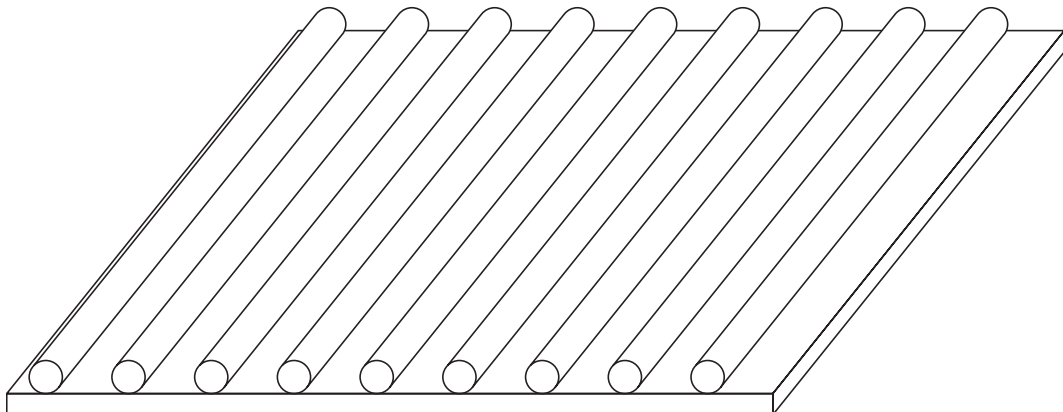


Рис. 1. Система нанотрубок, лежащих параллельно друг другу на подложке

деформации растяжения-сдвига в касательной плоскости; $\boldsymbol{\varepsilon}$ — тензор деформации изгиба-кручения; ${}^4\mathbf{A}$, ${}^4\mathbf{C}$ — тензоры жесткости оболочки; \mathbf{n} — вектор единичной нормали к поверхности оболочки; \mathbf{a} — единичный тензор в касательной плоскости; ∇ — поверхностный оператор градиента.

1.1. *Изгибные колебания цилиндрической оболочки.* При описании кинематики оболочки будем использовать цилиндрическую систему координат (r, θ, z) , где $r \equiv R$. Как известно, тензор жесткости оболочки на растяжение и сдвиг в касательной плоскости ${}^4\mathbf{A}$ пропорционален толщине оболочки h , а тензор жесткости на изгиб и кручение ${}^4\mathbf{C}$ пропорционален h^3 . Поэтому при $h/R \ll 1$, $h/L \ll 1$ рассматриваемую оболочку можно считать нерастяжимой. Таким образом, тензор деформации растяжения-сдвига в касательной плоскости будем считать равным нулю:

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

При этом ${}^4\mathbf{A} \rightarrow \infty$, соответствующее соотношение упругости теряет смысл, а тензор усилий в касательной плоскости $\mathbf{T} \cdot \mathbf{a}$ определяется непосредственно из уравнений динамики с учетом уравнения совместности деформаций

$$\Delta(\text{tr}(\mathbf{T} \cdot \mathbf{a})) - (1 + \nu)\nabla \cdot (\nabla \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{a})) = 0$$

(ν — коэффициент Пуассона). Тензор жесткости на изгиб и кручение ${}^4\mathbf{C}$ имеет вид

$${}^4\mathbf{C} = D \left(\frac{1 + \nu}{2} \mathbf{c}\mathbf{c} + \frac{1 - \nu}{2} (\mathbf{a}_2\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_4\mathbf{a}_4) \right).$$

Здесь D — изгибная жесткость оболочки; $\mathbf{a}_2 = \mathbf{e}_\theta\mathbf{e}_\theta - \mathbf{e}_z\mathbf{e}_z$, $\mathbf{a}_4 = \mathbf{e}_\theta\mathbf{e}_z + \mathbf{e}_z\mathbf{e}_\theta$.

Векторы перемещений и поворотов представим в виде разложения по базису цилиндрической системы координат:

$$\mathbf{u} = u_\theta\mathbf{e}_\theta + u_z\mathbf{k} + u_r\mathbf{n}, \quad \boldsymbol{\varphi} = \varphi_\theta\mathbf{e}_\theta + \varphi_z\mathbf{k}.$$

Очевидно, что в отсутствие деформации растяжения-сдвига все величины, характеризующие напряженно-деформированное состояние оболочки, зависят только от полярного угла θ . Кроме того, следствием (2) являются кинематические соотношения

$$\frac{du_\theta}{d\theta} + u_r = 0, \quad u_z = 0, \quad \varphi_\theta = 0, \quad \varphi_z = \frac{1}{R} \left(u_\theta - \frac{du_r}{d\theta} \right). \quad (3)$$

В качестве основной переменной выберем перемещение по нормали к поверхности оболочки u_r . Легко показать, что в отсутствие деформации растяжения-сдвига задача о свободных колебаниях оболочки (1) сводится к решению дифференциального уравнения

$$\frac{D}{\rho R^4} \frac{d^2}{d\theta^2} \left(\frac{d^2}{d\theta^2} + 1 \right)^2 u_r + \left(\frac{d^2}{d\theta^2} - 1 \right) \ddot{u}_r = 0. \quad (4)$$

Решения уравнения (4) имеют следующую структуру:

$$u_r(\theta, t) = U_r(\theta) e^{i\omega t}, \quad U_r(\theta) = \sum_{j=1}^3 [A_j \sin(\lambda_j \theta) + B_j \cos(\lambda_j \theta)]. \quad (5)$$

Здесь A_j , B_j — произвольные постоянные; λ_j — корни характеристического уравнения

$$\lambda^6 - 2\lambda^4 + (1 - \Omega^2)\lambda^2 - \Omega^2 = 0,$$

$\Omega = \omega \sqrt{\rho/D} R^2$ — безразмерная собственная частота, для определения которой необходимо сформулировать граничные условия.

Согласно формуле (5) функция $U_r(\theta)$ содержит шесть констант. Эти константы определяются из граничных условий, представляющих собой условия периодичности

$$u_\theta(0, t) = u_\theta(2\pi, t), \quad u_r(0, t) = u_r(2\pi, t), \quad \varphi_z(0, t) = \varphi_z(2\pi, t) \quad (6)$$

и условия сопряжения оболочки с подложкой, которые формулируются ниже.

1.2. *Изгибные колебания пластины.* Уравнения движения пластины имеют вид

$$\nabla \cdot \mathbf{T} + \sum_{n=1}^N \mathbf{F}_n \delta(x - na) = \rho_* \ddot{\mathbf{u}}, \quad \nabla \cdot \mathbf{M} + \mathbf{T}_\times + \sum_{n=1}^N \mathbf{L}_n \delta(x - na) = 0, \quad (7)$$

где $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака; \mathbf{F}_n , \mathbf{L}_n — сила и момент, действующие на пластину со стороны цилиндрической оболочки с номером n :

$$\mathbf{F}_n = \mathbf{e}_\theta \cdot \mathbf{T}^{(n)}|_{\theta=0}, \quad \mathbf{L}_n = \mathbf{e}_\theta \cdot \mathbf{M}^{(n)}|_{\theta=0}. \quad (8)$$

Считая пластину нерастяжимой и пренебрегая деформацией поперечного сдвига, приведем уравнения движения (7), (8) к виду

$$C \Delta \Delta w + \rho_* \ddot{w} = - \sum_{n=1}^N (T_{\theta r}^{(n)}|_{\theta=0} \delta(x - na) + M_{\theta z}^{(n)}|_{\theta=0} \delta'(x - na)), \quad (9)$$

где w — поперечный прогиб (перемещение в направлении оси y); C , ρ_* — изгибная жесткость и поверхностная плотность пластины. Для замыкания системы уравнений дополним ее кинематическими условиями сопряжения оболочек с пластиной

$$u_r^{(n)}|_{\theta=0} = -w|_{x=na}, \quad u_\theta^{(n)}|_{\theta=0} = 0, \quad \varphi_z^{(n)}|_{\theta=0} = -\frac{\partial w}{\partial x}|_{x=na} \quad (10)$$

и граничными условиями для пластины

$$\frac{\partial^2 w}{\partial z^2}|_{z=0} = 0, \quad \frac{\partial^2 w}{\partial z^2}|_{z=l} = 0, \quad \frac{\partial^3 w}{\partial z^3}|_{z=0} = 0, \quad \frac{\partial^3 w}{\partial z^3}|_{z=l} = 0 \quad (11)$$

в случае свободных краев при $z = 0, l$ и

$$w|_{x=0} = 0, \quad w|_{x=L} = 0, \quad \frac{\partial w}{\partial x}|_{x=0} = 0, \quad \frac{\partial w}{\partial x}|_{x=L} = 0 \quad (12)$$

в случае жесткой заделки при $x = 0, L$.

Поскольку рассматриваются свободные колебания системы, решение уравнения (9) будем искать в виде

$$w(x, z, t) = W(x, z) e^{i\omega t}. \quad (13)$$

Подставляя в уравнение (9) выражение для поперечного прогиба (13) и выражения для сил и моментов

$$T_{\theta r}^{(n)}|_{\theta=0} = 2R\rho\omega^2 \sum_{j=1}^3 \frac{A_j^{(n)}}{\lambda_j(\lambda_j^2 - 1)}, \quad M_{\theta z}^{(n)}|_{\theta=0} = \frac{D}{R^2} \sum_{j=1}^3 (\lambda_j^2 - 1) B_j^{(n)},$$

полученные в результате интегрирования уравнений движения оболочек, имеем уравнение

$$C \Delta \Delta W - \rho_* \omega^2 W = - \sum_{n=1}^N \sum_{j=1}^3 \left(\frac{2R\rho\omega^2}{\lambda_j(\lambda_j^2 - 1)} A_j^{(n)} \delta(x - na) + \frac{D(\lambda_j^2 - 1)}{R^2} B_j^{(n)} \delta'(x - na) \right). \quad (14)$$

Следует отметить, что любые деформации пластины, зависящие от координаты z , вызывают деформации растяжения-сжатия лежащих на ней оболочек. В данной работе эти

колебания оболочек не представляют интереса. Ниже рассматриваются движения пластины, при которых все величины, характеризующие ее напряженно-деформированное состояние, зависят только от координаты x . Такие движения допускаются дифференциальным уравнением (14) и краевыми условиями (11). Очевидно, что при выполнении условия $l \ll L$ несколько первых собственных частот колебаний пластины обусловлены деформациями, зависящими только от координаты x . Итак, вместо уравнения (14) будем рассматривать более простое уравнение

$$CW_x^{IV} - \rho_* \omega^2 W = - \sum_{n=1}^N \sum_{j=1}^3 \left(\frac{2R\rho\omega^2}{\lambda_j(\lambda_j^2 - 1)} A_j^{(n)} \delta(x - na) + \frac{D(\lambda_j^2 - 1)}{R^2} B_j^{(n)} \delta'(x - na) \right). \quad (15)$$

Для дальнейшего исследования необходимо определить константы $A_j^{(n)}$, $B_j^{(n)}$ ($n = 1, \dots, N$). Согласно уравнениям (3), (5), (6), (10) системы уравнений для определения указанных констант имеют вид

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^3 [A_j^{(n)} \sin(2\pi\lambda_j) - B_j^{(n)}(1 - \cos(2\pi\lambda_j))] &= 0, & \sum_{j=1}^3 B_j^{(n)} &= -W|_{x=na}, \\ \sum_{j=1}^3 \frac{1}{\lambda_j} A_j^{(n)} &= 0, & \sum_{j=1}^3 \frac{1}{\lambda_j} [A_j^{(n)} \cos(2\pi\lambda_j) - B_j^{(n)} \sin(2\pi\lambda_j)] &= 0, \\ \sum_{j=1}^3 \lambda_j [A_j^{(n)}(1 - \cos(2\pi\lambda_j)) + B_j^{(n)} \sin(2\pi\lambda_j)] &= 0, & \frac{1}{R} \sum_{j=1}^3 \lambda_j A_j^{(n)} &= W'_x|_{x=na}. \end{aligned} \quad (16)$$

Поскольку предполагается, что все цилиндрические оболочки одинаковы, определители всех N систем (16) также одинаковы. Различаются только правые части систем (16), так как в них входят перемещения и производные от перемещений в разных точках пластины. Рассмотрим два случая.

1. Определитель систем (16) равен нулю. В данном случае системы уравнений (16) имеют решения, только когда их правые части обращаются в нуль:

$$W|_{x=na} = 0, \quad W'_x|_{x=na} = 0. \quad (17)$$

Поскольку размеры оболочек, моделирующих нанообъекты, существенно меньше размеров пластины, моделирующей подложку, а количество оболочек достаточно велико, можно считать, что оболочки непрерывно распределены по поверхности пластины. Тогда дискретные условия (17) заменяются непрерывными условиями

$$W(x) \equiv 0, \quad W'(x) \equiv 0. \quad (18)$$

Если выполнены условия (18), то пластина остается неподвижной. Частоты колебаний, найденные из условия равенства нулю определителя систем (16), соответствуют колебаниям цилиндрических оболочек, лежащих на жестком основании.

Таким образом, из спектра системы выделяется спектр собственных частот колебаний нанообъектов. При этих частотах подложка остается неподвижной.

2. Определитель систем (16) отличен от нуля. В данном случае системы уравнений (16) имеют единственные решения, структура которых такова, что все константы $A_j^{(n)}$, $B_j^{(n)}$ представляют собой линейные комбинации величин $W|_{x=na}$, $W'_x|_{x=na}$. Нетрудно показать, что

$$\sum_{j=1}^3 \frac{2A_j^{(n)}}{\lambda_j(\lambda_j^2 - 1)} = G_1(\Omega)W|_{x=na} + G_2(\Omega)RW'_x|_{x=na},$$

$$\sum_{j=1}^3 (\lambda_j^2 - 1)B_j^{(n)} = G_3(\Omega)W|_{x=na} + G_4(\Omega)RW'_x|_{x=na}. \quad (19)$$

С учетом (19) уравнение (15) записывается в виде

$$CW_x^{IV} - \rho_*\omega^2 W = - \sum_{n=1}^N \left[\rho\omega^2 (G_1RW + G_2R^2W'_x)\delta(x - na) + D \left(\frac{G_3}{R^2}W + \frac{G_4}{R}W'_x \right) \delta'(x - na) \right]. \quad (20)$$

Если цилиндрических оболочек достаточно много, можно считать, что оболочки непрерывно распределены по поверхности пластины. Осреднив правую часть уравнения (20), упростим математическую постановку задачи, сведя ее к уравнению

$$W_x^{IV} - \frac{ND}{CLR^2} (G_3W'_x + G_4RW''_x) - \omega^2 \frac{\rho_*}{C} \left(W - \frac{NR\rho}{L\rho_*} (G_1W + G_2RW'_x) \right) = 0. \quad (21)$$

Если слагаемые, присутствие которых обусловлено наличием цилиндрических оболочек, малы, то собственные частоты системы близки к собственным частотам пластины без оболочек. Оценим порядок этих слагаемых:

$$\frac{ND}{CLR^2} G_3W'_x \sim N \left(\frac{h}{H} \right)^3 \left(\frac{L}{R} \right)^2 W_x^{IV}, \quad \frac{ND}{CLR} G_4W''_x \sim N \left(\frac{h}{H} \right)^3 \frac{L}{R} W_x^{IV},$$

$$\frac{NR\rho}{L\rho_*} G_1W \sim N \frac{h}{H} \frac{R}{L} W, \quad \frac{NR^2\rho}{L\rho_*} G_2W'_x \sim N \frac{h}{H} \left(\frac{R}{L} \right)^2 W. \quad (22)$$

Оценки (22) показывают, что малость динамических слагаемых, обусловленных наличием оболочек, определяется исключительно малостью размеров оболочек по сравнению с размерами пластины. Для того чтобы были малы обусловленные наличием оболочек силовые факторы, необходимо, чтобы толщина оболочек была значительно меньше толщины пластины, а линейные размеры пластины и оболочек различались не столь существенно. Фактически определяющей является малость величины $N(h/H)^3(L/R)^2$.

Отметим два существенных отличия поведения системы с горизонтально расположенными нанотрубками от поведения аналогичной системы с вертикально ориентированными нанотрубками [8]. В случае вертикально ориентированных нанотрубок [8] уравнение, аналогичное (21), содержит только четные производные по пространственным координатам; кроме того, при колебаниях с частотами, близкими к собственным частотам колебаний подложки, амплитуды колебаний нанообъектов оказываются существенно меньше амплитуды колебаний подложки. В случае горизонтально расположенных нанотрубок это не так. С физической точки зрения такое различие обусловлено тем, что в отличие от работы [8], в которой предполагалось, что распределенные вертикально ориентированные нанотрубки не оказывают влияния на эффективную изгибную жесткость пластины, в настоящей работе прикрепленные горизонтально нанотрубки изменяют эффективную жесткость пластины. Таким образом, при данных эффективных свойствах пластины с горизонтальными нанотрубками является анизотропной и неоднородной.

2. Численный анализ собственных колебаний. Без сделанных выше допущений о характере деформированного состояния аналитически исследовать спектр колебаний “большой системы” вряд ли возможно. В рамках трехмерной теории с помощью метода конечных элементов исследуем систему, состоящую из некоторого числа нанотрубок,

лежащих параллельно друг другу на подложке. Поскольку рассматриваемые материалы (GaAs, InAs, GeSi и др.) обладают пьезоэлектрическими свойствами [19, 20], в целом такая система представляет собой составное пьезоэлектрическое тело. В приближении электростатики и в отсутствие массовых сил основные уравнения электроупругости имеют вид [21–23]

$$\begin{aligned}\rho \ddot{\mathbf{u}} &= \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, & \nabla \cdot \mathbf{D} &= 0, \\ \boldsymbol{\sigma} &= \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{e} \cdot \mathbf{E}, & \mathbf{D} &= \mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{E}, \\ \boldsymbol{\varepsilon} &= \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), & \mathbf{E} &= \nabla \varphi,\end{aligned}\quad (23)$$

где \mathbf{u} — вектор перемещений; \mathbf{E} — вектор напряженности электрического поля, выраженный через потенциал φ ; $\boldsymbol{\sigma}$ — тензор напряжений; \mathbf{D} — вектор электрической индукции; $\boldsymbol{\varepsilon}$ — тензор деформаций; ∇ — пространственный оператор градиента; ρ — плотность; \mathbf{C} — матрица жесткости; \mathbf{e} , $\boldsymbol{\epsilon}$ — пьезоэлектрические и диэлектрические постоянные.

Краевые условия, соответствующие уравнениям (23), ставятся следующим образом. Пусть поверхность тела Γ состоит из двух частей: $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$, причем $\Gamma_1 \cap \Gamma_2 = \emptyset$. На части границы Γ_1 заданы перемещения \mathbf{u}_0 , на части Γ_2 — нагрузки \mathbf{f} . В этом случае краевые условия определяются формулами

$$\mathbf{u}|_{\Gamma_1} = \mathbf{u}_0, \quad \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}|_{\Gamma_2} = \mathbf{f}. \quad (24)$$

Механические краевые условия (24) дополняются краевыми условиями, связанными с электрическими свойствами. Пусть $\Gamma = \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ ($\Gamma_3 \cap \Gamma_4 = \emptyset$), причем на Γ_3 задан электрический потенциал φ_0 , а на Γ_4 — поверхностный заряд q . Тогда

$$\varphi|_{\Gamma_3} = \varphi_0, \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}|_{\Gamma_4} = q. \quad (25)$$

Для анализа собственных колебаний ищется решение однородной краевой задачи (23)–(25) (при $\mathbf{f} = 0$, $q = 0$) в виде $\mathbf{u} = \mathbf{U} e^{i\omega t}$ и т. п.

При модальном анализе трехмерной системы, состоящей из пластины и лежащих на ней параллельно друг другу нанотрубок, использован пакет программ “ANSYS”.

Проведен ряд вычислительных экспериментов для различного количества нанотрубок (от одной до 10) и разной геометрии системы (отношение толщин подложки и нанопленки, отношение радиуса нанотрубки к длине подложки и др.). Выполнены также расчеты при различных условиях закрепления подложки. Все части системы моделировались трехмерными анизотропными линейно-упругими телами. Для трубок использовались конечные элементы, соответствующие пьезоупругому материалу. В расчетах использовались применяемые на практике материалы подложки и нанотрубок [13–15]. Свойства материалов взяты из [19, 20]. Расчеты показали, что независимо от характера закрепления подложки поведение спектра “большой системы” одно и то же, т. е. параметры задачи можно подобрать таким образом, чтобы из общего спектра выделялись собственные частоты нанотрубок и подложки, что является численным подтверждением результатов теоретического анализа, проведенного выше.

Ниже приведены результаты расчетов для свободной подложки с тремя нанотрубками. В качестве подложки рассматривался кристалл сапфира, для нанотрубок приняты физические характеристики арсенида галлия. Геометрические параметры нанотрубок взяты из [13, 14].

Некоторые собственные моды колебаний представлены на рис. 2–5. На рис. 6 показано распределение собственных частот по порядку их номеров. При выбранных значениях параметров задачи в рассматриваемом диапазоне находится только три моды собственных

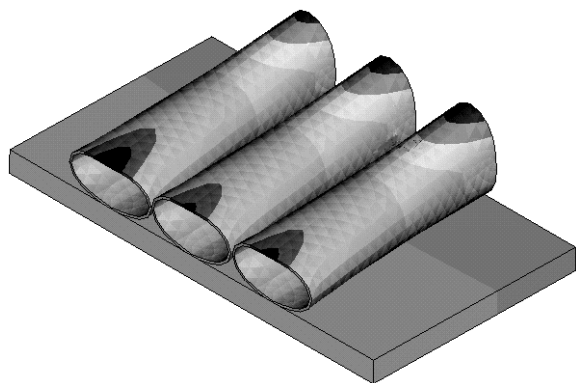


Рис. 2

Рис. 2. Собственные моды, локализованные в нанотрубках

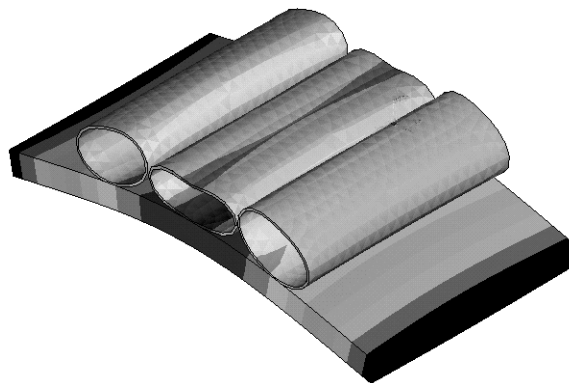


Рис. 3

Рис. 3. Собственная мода, соответствующая первой изгибной моде подложки

колебаний подложки. На рис. 2 показаны собственные моды, соответствующие собственным колебаниям, локализованным в нанотрубках. Собственные частоты этих колебаний соответствуют первой собственной частоте нанотрубки, закрепленной по части боковой поверхности. Данные частоты соответствуют нескольким первым точкам на рис. 6. Видно, что при таких модах подложка практически неподвижна, а нанотрубки испытывают колебания, при которых их поперечное сечение принимает форму эллипса. Таким образом, эти первые частоты позволяют оценить изгибную жесткость пленки, образующей нанотрубку.

На рис. 3 показана собственная мода колебаний нанотрубки, соответствующая первой изгибной моде колебаний подложки. В отличие от результатов, полученных в работах [8, 9], где при таких модах вертикально закрепленные нанообъекты двигались практически как абсолютно жесткие тела, в рассматриваемом случае этой моде колебаний соответствует деформация нанотрубок, что вполне естественно, если учесть характер закрепления нанотрубок и их меньшую жесткость.

Следующие моды собственных колебаний соответствуют более сложному характеру движений. На рис. 4 показана мода, при которой подложка совершает колебания, соответствующие третьей собственной частоте, вместе с тем колебания нанотрубок соответствуют высокочастотным колебаниям одной нанотрубки. Эта мода соответствует последней точке на рис. 6. Поскольку распределенные на подложке нанотрубки оказывают влияние не только на массу системы в целом, но и на ее эффективную жесткость, при модах колебаний, представленных на рис. 4, не только изменяется форма колебаний, но и значения собственных частот “большой системы” отличаются от собственных частот как подложки, так и нанотрубки. Для первых частот значения собственных частот “большой системы” удовлетворительно согласуются с соответствующими парциальными собственными частотами подложки и одной нанотрубки.

Из результатов численного анализа также следует наличие собственных колебаний, локализованных практически в одной нанотрубке (рис. 5). Отметим, что такие колебания менее интересны с точки зрения детектирования их экспериментально. Большой интерес представляют локализованные моды колебаний, при которых колеблются все или большая часть нанотрубок, особенно в случае измерения возникающих в окрестности системы электрических полей (в случае системы колеблющихся нанотрубок напряженность поля больше). Поэтому чем больше на подложке нанотрубок, тем эффективнее предлагаемый метод.

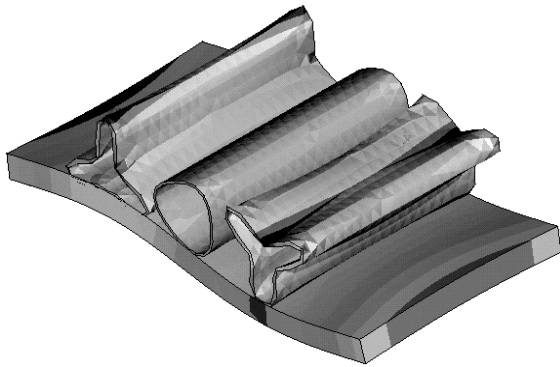


Рис. 4

Рис. 4. Высокочастотная собственная мода, соответствующая колебаниям подложки и нанотрубок

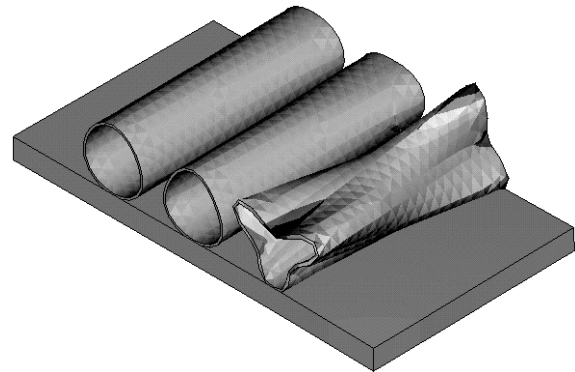


Рис. 5

Рис. 5. Собственная мода, локализованная в одной нанотрубке

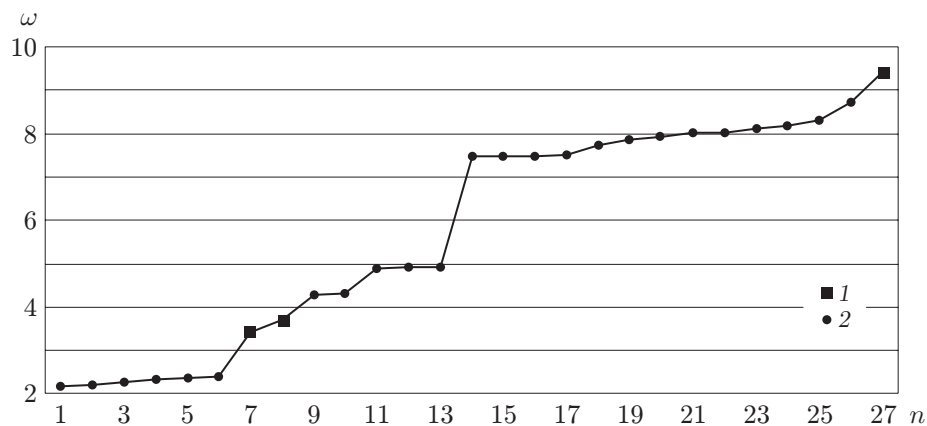


Рис. 6. Зависимость собственных частот “большой системы” ω от их номера n : 1 — собственные частоты, при которых наблюдаются существенные движения подложки; 2 — собственные частоты, при которых подложка практически неподвижна, а нанотрубки колеблются

Таким образом, как и в [8, 9], удалось подобрать такие геометрические параметры “большой системы”, чтобы можно было разделить спектр на собственные частоты, обусловленные собственными колебаниями нанотрубок, и собственные частоты подложки. Следует отметить, что в отличие от случая вертикального массива нанокристаллов, рассмотренного ранее, в данном случае собственные частоты подложки и нанотрубок смешиваются в большей степени. Возможность выделения из спектра нескольких первых собственных частот нанотрубки в большей степени зависит от геометрии системы и ее механических характеристик. Таким образом, для данной задачи проведение компьютерного моделирования позволяет оптимизировать постановку натурального эксперимента.

Результаты проведенного в данном пункте численного анализа, как и результаты п. 1, позволяют сделать вывод, что на основе предложенных во введении модификаций можно детектировать собственные колебания “большой системы”, состоящей из подложки и лежащих на ней пьезоактивных нанотрубок.

3. Выводы. Разработан метод экспериментального определения изгибной жесткости нанооболочек, который заключается в следующем: 1) создание колебаний нанооболочки,

при которых деформация оболочки обусловлена только изгибом материала, а растяжение и сдвиг отсутствуют либо пренебрежимо малы; 2) измерение первых собственных частот колебаний нанооболочки; 3) вычисление изгибной жесткости нанооболочки по собственным частотам ее колебаний. Основная трудность реализации этого метода заключается в измерении собственной частоты одного нанобъекта.

Предложен метод, позволяющий экспериментально определить первые собственные частоты одной нанотрубки путем сравнения спектра собственных частот системы решетка — подложка и спектра собственных частот одной подложки. Метод наиболее эффективен и обладает высокой точностью, когда первые собственные частоты нанобъектов сравнимы с первыми собственными частотами подложки (как в рассмотренном примере). Таким образом, при использовании данного метода определяющим фактором является удачный подбор соотношения геометрических и физических характеристик нанобъектов и подложки.

Основным ограничением применимости предложенного метода является частотный диапазон измерительных приборов. Если собственные частоты нанобъектов очень высоки, зафиксировать их не удастся. Вместе с тем следует отметить, что из одних и тех же полупроводниковых нанопленок можно создать структуры различной конфигурации, такие как трубки и цилиндрические спиральные оболочки [13]. Очевидно, что изгибная жесткость таких структур будет одинакова, а собственные частоты спиральных оболочек окажутся существенно ниже собственных частот трубок [24]. Зависимость собственных частот спиральных оболочек от их длины такая же, как у стержней, поэтому за счет увеличения длины спиральных оболочек можно добиться того, чтобы их собственные частоты оказались в области действия измерительных приборов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Гуткин М. Ю.** Дефекты и механизмы пластичности в наноструктурных и некристаллических материалах / М. Ю. Гуткин, И. А. Овидько. СПб.: Изд-во “Янус”, 2003.
2. **Гуткин М. Ю.** Физическая механика деформируемых наноструктур. Т. 1. Нанокристаллические материалы / М. Ю. Гуткин, И. А. Овидько. СПб.: Изд-во “Янус”, 2003.
3. **Кривцов А. М., Морозов Н. Ф.** Аномалии механических характеристик наноразмерных объектов // Докл. РАН. 2001. Т. 381, № 3. С. 345–347.
4. **Springer handbook of nanotechnology** / Ed. by B. Bhushan. Berlin et al.: Springer-Verlag, 2004.
5. **Handbook of nanoscience, engineering, and technology** / Ed. by W. A. Goddard et al. Boca Raton: CRC Press, 2003.
6. **Marshall R. H., Sokolov I. A., Ning Y. N., et al.** Photoelectromotive force crystals for interferometric measurement of vibrational response // Meas. Sci. Technol. 1996. V. 7. P. 1683–1686.
7. **Гулд С.** Вариационные методы в задачах о собственных значениях. Введение в метод промежуточных задач Вайнштейна. М.: Мир, 1970.
8. **Еремеев В. А., Иванова Е. А., Морозов Н. Ф., Соловьев А. Н.** Об определении собственных частот нанобъектов // Докл. РАН. 2006. Т. 406, № 6. С. 756–759.
9. **Еремеев В. А., Иванова Е. А., Морозов Н. Ф., Соловьев А. Н.** Об одном методе определения собственных частот упорядоченной системы нанобъектов // Журн. техн. физики. 2007. Т. 77, вып. 1. С. 3–8.
10. **Lorenz M., Lenzner J., Kaidashev E. M., et al.** Cathodoluminescence of selected single ZnO nanowires on sapphire // Ann. Physik. 2004. Bd 2, N 1. S. 39–42.

11. **Kaidashev E. M., Lorenz M., Wenckstern H., et al.** High electron mobility of epitaxial ZnO thin films on c-plane sapphire grown by multi-step pulsed laser deposition // Appl. Phys. Lett. 2003. V. 82. P. 3901–3903.
12. **Lorenz M., Hochmuth H., Schmidt-Grund R., et al.** Advances of pulsed laser deposition of ZnO thin films // Ann. Physik. 2004. Bd 13, N 1. S. 59–61.
13. **Golod S. V., Prinz V. Ya., Mashanov V. I., Gutakovski A. K.** Fabrication of conducting GeSi/Si micro- and nanotubes and helical microcoils // Semiconductor Sci. Technol. 2001. V. 16. P. 181–185.
14. **Prinz V. Ya.** A new concept in fabricating building blocks for nanoelectronics and nanomechanics devices // Microelectron. Engng. 2003. V. 69, N 2/4. P. 466–475.
15. **Принц В. Я., Голод С. В.** Упругие нанооболочки на основе кремниевых пленок: формирование, свойства и практическое применение // ПМТФ. 2006. Т. 47, № 6. С. 114–128.
16. **Жилин П. А.** Основные уравнения неклассической теории оболочек // Тр. Ленингр. политехн. ин-та. 1982. № 386. С. 29–46.
17. **Альтенбах Х., Жилин П. А.** Общая теория упругих простых оболочек // Успехи механики. 1988. № 4. С. 107–148.
18. **Жилин П. А.** Прикладная механика. Основы теории оболочек. СПб.: Изд-во С.-Петербур. гос. политехн. ун-та, 2006.
19. **Блистанов А. А.** Акустические кристаллы: Справ. / А. А. Блистанов, В. С. Бондаренко, В. В. Чкалова и др. М.: Наука, 1982.
20. **Dargys A.** Handbook of physical properties of Ge, Si, GaAs and InP / A. Dargys, J. Kundrotas. Vilnius: Sci. and Encyclopedia Publ., 1994.
21. **Можен Ж.** Механика электромагнитных сплошных сред. М.: Мир, 1991.
22. **Партон В. З.** Электромагнитоупругость пьезоэлектрических и электропроводных тел / В. З. Партон, Б. А. Кудрявцев. М.: Наука, 1988.
23. **Новацкий В.** Электромагнитные эффекты в твердых телах. М.: Мир, 1986.
24. **Иванова Е. А., Морозов Н. Ф.** Об одном подходе к экспериментальному определению изгибной жесткости нанооболочек // Докл. РАН. 2005. Т. 400, № 4. С. 475–479.

Поступила в редакцию 26/III 2007 г.
