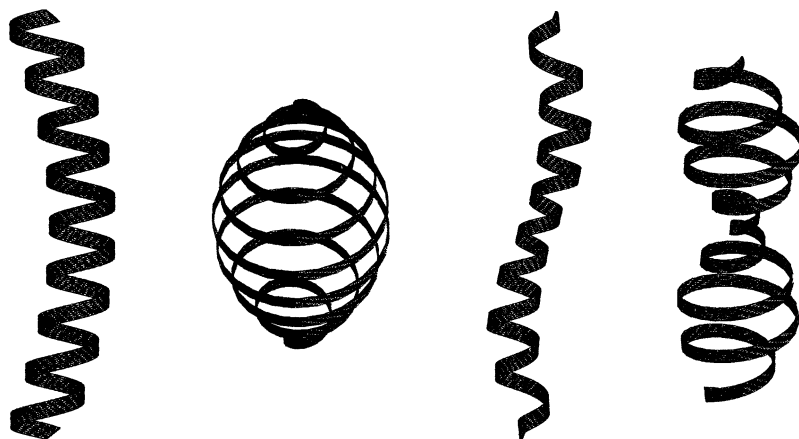


УДК: 539.3; 539.4

© 2005 г. **Е.А. ИВАНОВА, Н.Ф. МОРОЗОВ, Б.Н. СЕМЕНОВ, А.Д. ФИРСОВА**

**ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ УПРУГИХ МОДУЛЕЙ НАНОСТРУКТУР:
ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ И МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТОВ**

В последние годы большое количество исследований связано с созданием и изучением наноразмерных трубок [1–5]. Наряду с исследованием электронных и оптических свойств наноструктур [6], важным оказывается изучение их механических свойств. Известно, что нанотрубки могут подвергаться большим деформациям, не теряя при этом упругих свойств [3]. Поэтому при расчете напряженно-деформированного состояния нанотрубок, как правило, используется теория упругих оболочек [7]. При этом упругие модули определяются в результате исследования дискретных моделей, в которых учитывается только силовое взаимодействие между формирующими трубку атомами. Однако, существование однослойных нанотрубок [4, 5] свидетельствует о необходимости учета моментного взаимодействия между атомами. В противном случае, слой атомов, формирующий нанотрубку, не имел бы изгибной жесткости, а стало быть, однослойная нанотрубка была бы неустойчива. В первой части публикуемой работы на примере дискретной модели монокристалла [8, 9] разработана методика определения изгибной жесткости наноразмерных структур с учетом моментного взаимодействия на наноуровне. Получены поправки, связанные с учетом моментного взаимодействия и позволяющие описать механические свойства однослойных наноструктур. Главная проблема, возникающая при попытках использования моментных теорий в прикладных задачах, связана с тем, что в настоящее время фактически не существует разработанных методик экспериментального определения моментных упругих модулей. Трудность заключается в том, что моментные взаимодействия в материале настолько слабы, что в макроскопических экспериментах их проявление заметить практически невозможно. При переходе на наноразмерный масштабный уровень вклад моментных взаимодействий увеличивается и для наноструктур, содержащих несколько атомарных слоев, оказывается весьма существенным. Поэтому эксперименты с наноразмерными структурами представляются перспективным путем развития методик определения упругих модулей моментных теорий. Для нахождения моментных коэффициентов Лямэ [10] можно использовать, например, результаты экспериментального определения изгибной жесткости нанообъектов, состоящих из одного слоя атомов. Определение упругих модулей тонких макроскопических оболочек, как правило, основано на экспериментах с пластинами. Пластины наноразмерного масштабного уровня существуют только в напряженном состоянии, будучи прикрепленными к подложке. При отделении от подложки пластины сворачиваются и в ненапряженном состоянии становятся оболочками различной конфигурации. Таким образом, для определения упругих модулей наноразмерных структур нужна методика, основанная на экспериментах с оболочками. При произвольном деформировании таких распространенных нанообъектов, как нанотрубки и фуллерены, материал работает и на изгиб, и на растяжение одновременно. Поэтому все величины,

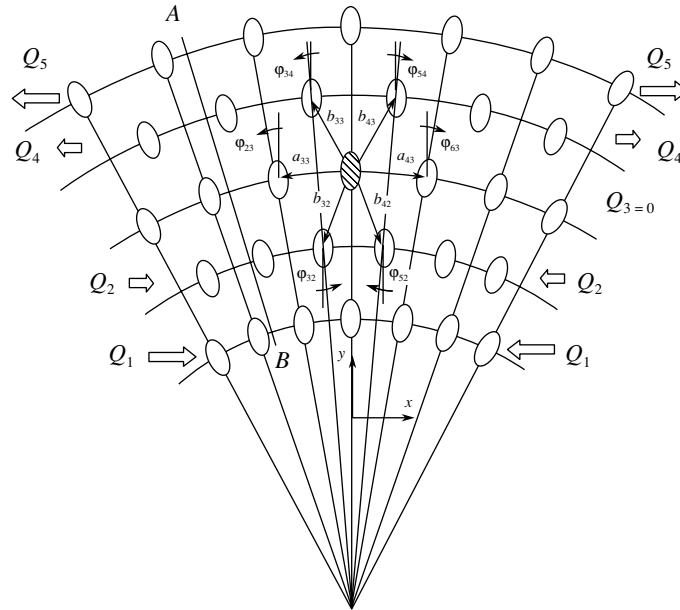


Фиг. 1

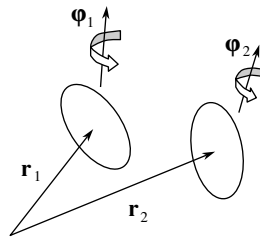
которые могут быть непосредственно измерены (например, собственные частоты), будут зависеть сложным образом и от изгибной жесткости, и от жесткости на растяжение. Существуют колебания цилиндрических оболочек, при которых материал работает только на изгиб. Однако при таких колебаниях ось цилиндра остается прямолинейной и конфигурация поперечного сечения вдоль оси цилиндра не изменяется. Наблюдать подобные колебания объектов наноразмерного масштабного уровня очень сложно. В последние годы, наряду с нанотрубками и фуллеренами, были получены нанообъекты более сложной конфигурации [11–14]. С точки зрения возможности экспериментального определения изгибной жесткости особый интерес представляют наноразмерные цилиндрические спирали [11, 13]. Это связано с тем что: при произвольном деформировании спиральных оболочек материал работает, главным образом, на изгиб и при интерпретации экспериментальных данных эффектами растяжения материала можно пренебречь; собственные формы колебаний спиральной оболочки наблюдать значительно легче, чем связанные с чистым изгибом материала собственные формы колебаний цилиндрической оболочки. Последнее утверждение иллюстрирует фиг. 1, где приведены первые четыре формы колебаний спиральной оболочки. Во второй части работы проводится исследование динамики спиральных оболочек [15], которое может послужить теоретической основой для экспериментального определения изгибной жесткости оболочек наноразмерного масштабного уровня.

1. Определение изгибной жесткости монокристаллической полосы.

1. Постановка и решение задачи об изгибе монокристаллической полосы. Рассматривается двумерный монокристалл, имеющий N слоев в направлении y и K слоев в направлении x , причем $K \gg N$ (фиг. 2). Кристалл состоит из частиц (атомов или молекул), взаимодействие которых зависит не только от их взаимного расположения в пространстве, но и от их взаимной ориентации. Взаимодействие между частицами характеризуется вектором силы и вектором момента. В данной статье ограничимся рассмотрением треугольной кристаллической решетки. В качестве модели частиц, удовлетворяющих симметрии треугольной решетки, можно предложить совокупность 6-ти материальных точек, расположенных в углах правильного шести-



Фиг. 2



Фиг. 3

угольника. Однако далее не будем конкретизировать внутреннюю структуру частиц, а для наглядности изображать их в виде овалов, позволяющих показать их относительные повороты (фиг. 2). Рассмотрим две взаимодействующие частицы (фиг. 3). В актуальной конфигурации положение частиц задается радиус-векторами \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 , а ориентация частиц – векторами поворотов $\boldsymbol{\varphi}_1$, $\boldsymbol{\varphi}_2$. В равновесном положении $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_0$, $\boldsymbol{\varphi}_1 = 0$, $\boldsymbol{\varphi}_2 = 0$. Предполагается, что перемещения частиц из положения равновесия малы. Как показано в работах [16, 17], в этом случае вектор силы и вектор момента вычисляются по формулам

$$\mathbf{F} = \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\kappa}, \quad \mathbf{M} = \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\kappa} \quad (1.1)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{r} - \mathbf{r}_0 + 1/2\mathbf{r}_0 \times (\boldsymbol{\varphi}_1 + \boldsymbol{\varphi}_2), \quad \boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{\varphi}_2 - \boldsymbol{\varphi}_1, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 \quad (1.2)$$

Здесь \mathbf{F} – сила, действующая на частицу 1 со стороны частицы 2; \mathbf{M} – момент, действующий на частицу 1 со стороны частицы 2, вычисленный относительно середины отрезка, соединяющего частицы; $\boldsymbol{\varepsilon}$, $\boldsymbol{\kappa}$ – векторы деформации.

Тензоры жесткости \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} при решении задачи об изгибе двумерного монокристалла могут быть представлены в форме

$$\mathbf{A} = C_1 \frac{\mathbf{r}_0 \mathbf{r}_0}{|\mathbf{r}_0|^2} + C_1^* \frac{\mathbf{k} \times \mathbf{r}_0 \mathbf{k} \times \mathbf{r}_0}{|\mathbf{r}_0|^2}, \quad \mathbf{B} = 0, \quad \mathbf{C} = C_2 \mathbf{k} \mathbf{k} \quad (1.3)$$

где \mathbf{k} – единичный вектор, перпендикулярный плоскости полосы. Коэффициенты C_1 , C_1^* , C_2 зависят от структуры и размеров взаимодействующих частиц. Заметим, что формулы (1.3) дают общий вид тензоров \mathbf{A} , \mathbf{B} и \mathbf{C} в плоской задаче, при условии, что система из двух взаимодействующих частиц имеет две взаимно перпендикулярные оси симметрии. Это несложно доказать с использованием теории симметрии тензорных величин [18].

Рассмотрим задачу изгиба монокристаллической полосы. На частицы, находящиеся на боковых гранях кристалла, действуют силы Q_j (фиг. 2), изменяющиеся при переходе от одного слоя к другому по линейному закону таким образом, что суммарная нагрузка оказывается чисто моментной

$$\sum_{j=1}^N Q_j = 0, \quad \sum_{j=1}^N R_j Q_j = M_\Sigma \quad (1.4)$$

Предполагается, что частицы на боковых гранях кристалла не могут поворачиваться друг относительно друга, т.е. боковые грани кристалла поворачиваются как жесткое целое. Учитывается взаимодействие атома только с его ближайшими соседями по кристаллической решетке (фиг. 2). Деформированное состояние кристалла определяется расстояниями $a_{i,j}$ между соседними атомами в каждом слое, расстояниями $b_{i,j}$ между ближайшими атомами в соседних слоях и углами поворотов атомов $\varphi_{i,j}$. Индексы i, j определяют номера слоев в направлениях x и y соответственно (фиг. 2). Расстояния между соседними слоями определяются из соотношения $h_{i,j}^2 = b_{i,j}^2 - a_{i,j}^2/4$. В недеформированном состоянии кристаллическая решетка состоит из равносторонних треугольников со стороной $a = b = a_0$; углы поворота атомов $\varphi_{i,j}$ считаются равными нулю. Нетрудно убедиться в том, что в недеформированном состоянии имеют место соотношения $h_0 = \sqrt{3} a_0/2$, $R_j = (j-1)h_0$, где R_j – расстояние между j -м и 1-м слоями атомов. Записав уравнения равновесия атомов, получим систему уравнений, решение которой имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta b_{i,j} &= 0, \quad \Delta a_{i,j} = \frac{4\sqrt{3}M_\Sigma(2j-N-1)}{C_1 a_0(N-1)N(N+1)} \\ \varphi_{i,j} &= (i-1)\alpha, \quad \alpha = \frac{\Delta a_{i,N/2} - \Delta a_{i,1/2}}{h_0(N-1)} \end{aligned} \quad (1.5)$$

Как видно из соотношений (1.5), при деформировании кристалла слои атомов в направлении оси y остаются прямолинейными, углы между любыми соседними слоями атомов оказываются одинаковыми, а углы поворотов атомов совпадают с углами поворотов соответствующих слоев. Поскольку рассматривается задача чистого изгиба, деформация сдвига получается равной нулю и коэффициент C_1^* , характеризующий жесткость на сдвиг, не попадает в решение задачи и, следовательно, не может повлиять на значение изгибной жесткости.

2. *Определение изгибной жесткости монокристаллической полосы.* Разрежем мысленно кристалл вертикальной прямой AB (фиг. 2). Согласно формулам (1.5), суммарная нормальная сила, действующая с одной части кристалла на другую, равна нулю, а суммарный изгибающий момент M^* имеет вид

$$M^* = M_\Sigma + C_2\alpha(3N - 1) \quad (1.6)$$

Изгибная жесткость определяется как отношение момента M^* к кривизне κ :

$$D \stackrel{\text{def}}{=} M^*/\kappa, \quad \kappa = 2\alpha/a_0 \quad (1.7)$$

Подстановка формул (1.5) и (1.6) в (1.7) дает

$$D = 1/16C_1a_0^3(N - 1)N(N + 1) + 1/2C_2a_0(3N - 1) \quad (1.8)$$

Выразим изгибную жесткость (1.8) через макроскопические параметры. Заметим, что для пленки, содержащей несколько атомарных слоев, в принципе невозможно однозначно определить понятие толщины. С одной стороны, толщину пленки можно определить как расстояние между крайними слоями атомов: $H = (N - 1)h_0$; с другой стороны – как произведение числа слоев на толщину одного слоя: $H = Nh_0$. Следуя работам [8, 9], определим толщину полосы следующим образом:

$$H = N_*h_0, \quad N - 1 \leq N_* \leq N \quad (1.9)$$

где N_* – безразмерный параметр, отражающий неоднозначность в определении H . Модуль Юнга E_1 , соответствующий растяжению вдоль оси x бесконечной в этом направлении монокристаллической полосы, вычисляется по формуле [8]:

$$E_1 = (N/N_*)E_\infty, \quad E_\infty = 2C_1/\sqrt{3} \quad (1.10)$$

где E_∞ – значение модуля Юнга бесконечного кристалла. Введем в рассмотрение аналог модуля Юнга для моментных напряжений применительно к монокристаллической полосе. Рассмотрим задачу чистого изгиба. Мысленно разрежем кристалл вертикальной прямой AB (фиг. 2) и вычислим суммарный момент, обусловленный относительным поворотом частиц

$$\tilde{M} = C_2\alpha(3N - 1) \quad (1.11)$$

В плоской задаче тензор моментных напряжений μ и тензор деформаций изгиба–кручения κ имеют по одной ненулевой компоненте. Следовательно, в плоской задаче есть только один моментный коэффициент Лямэ [10], который определяется следующим образом: $\tilde{E} = \mu/\kappa$. Ниже величину \tilde{E} будем называть аналогом модуля Юнга для моментных напряжений. В случае изгиба монокристаллической полосы ненулевая компонента тензора изгиба–кручения κ равна кривизне κ (см. формулу (1.7)) а ненулевая компонента тензора моментных напряжений μ вычисляется по формуле $\mu = \tilde{M}/H$. Согласно формулам (1.7), (1.9), (1.11), аналог модуля Юнга для моментных напряжений имеет вид

$$\tilde{E} = C_2\sqrt{3}(N - 1/3)/N_* \quad (1.12)$$

Устремляя N к бесконечности, получаем значение \tilde{E} для бесконечного кристалла

$$\tilde{E}_\infty = C_2\sqrt{3} \quad (1.13)$$

Таким образом

$$\tilde{E} = \tilde{E}_\infty(N - 1/3)/N_* \quad (1.14)$$

Полученные выше формулы позволяют выразить изгибную жесткость (1.8) через макроскопические параметры

$$D = D_\infty(N^2 - 1)N/N_*^3 + \tilde{E}_\infty H \frac{H - 1/3}{N_*} \quad (1.15)$$

$$D_\infty = \frac{E_\infty H^3}{12}, \quad H = N_* h_0$$

Здесь D_∞ – значение изгибной жесткости, известное из макроскопической теории упругости. При $N_* = N$ изгибная жесткость определяется формулой

$$D = D_\infty(1 - 1/N^2) + \tilde{E}_\infty H(1 - 1/(3N)), \quad H = N h_0 \quad (1.16)$$

3. *Обсуждение результатов.* Согласно формуле (1.16), изгибная жесткость нанокристалла изменяется в пределах $2/3 \tilde{E}_\infty H \leq D \leq D_\infty + \tilde{E}_\infty H$. При малых N изгибная жесткость существенно зависит от числа атомарных слоев. При $N \rightarrow \infty$ значение изгибной жесткости стремится к величине, превышающей принятое в теории упругости значение D_∞ на величину $\tilde{E}_\infty H$, обусловленную вкладом моментных взаимодействий. При $N = 1$ первое слагаемое в формуле (1.16) обращается в ноль и значение изгибной жесткости полностью определяется аналогом модуля Юнга для моментных напряжений \tilde{E}_∞ и толщиной монокристалла H .

2. Теоретическая основа экспериментального определения изгибной жесткости наноболочек.

1. *Основные уравнения теории упругих оболочек.* Ниже приведена сводка основных уравнений классической линейной теории оболочек; для краткости записи использован аппарат прямого тензорного исчисления [18, 19]. Уравнения динамики имеют вид

$$\nabla \cdot \mathbf{T} = \rho \ddot{\mathbf{u}}, \quad \nabla \cdot \mathbf{M} + \mathbf{T}_\times = 0 \quad (2.1)$$

где \mathbf{T} , \mathbf{M} – тензоры сил и моментов, знаком $(\)_\times$ обозначен векторный инвариант тензора, ρ – поверхностная плотность массы, \mathbf{u} – вектор перемещений. В классической теории оболочек вектор деформации поперечного сдвига полагается равным нулю, в результате чего вектор углов поворота $\boldsymbol{\phi}$ выражается через вектор перемещений по формуле

$$\boldsymbol{\phi} = -\mathbf{n} \times (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \quad (2.2)$$

где \mathbf{n} – вектор единичной нормали к поверхности оболочки. Вектор поперечных сил $\mathbf{N} \equiv \mathbf{T} \cdot \mathbf{n}$ определяется из уравнений динамики (2.1). Соотношение упругости для тензора сил в касательной плоскости $\mathbf{T} \cdot \mathbf{a}$ имеет вид

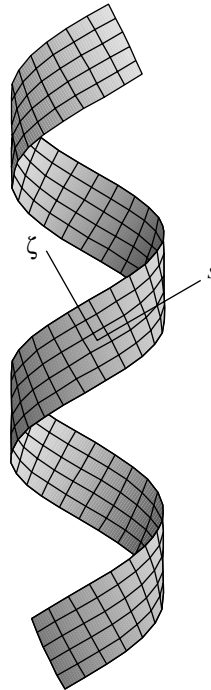
$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{a} + \frac{1}{2}(\mathbf{M} \cdot \cdot \mathbf{b})\mathbf{c} = {}^4\mathbf{A} \cdot \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.3)$$

$$\mathbf{b} = -\nabla \mathbf{n}, \quad \mathbf{c} = -\mathbf{a} \times \mathbf{n}$$

Соотношение упругости для тензора моментов \mathbf{M} выглядит так:

$$\mathbf{M}^T = {}^4\mathbf{C} \cdot \cdot \boldsymbol{\kappa} \quad (2.4)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}((\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{a} + \mathbf{a} \cdot (\nabla \mathbf{u})^T), \quad \boldsymbol{\kappa} = (\nabla \boldsymbol{\phi}) \cdot \mathbf{a} + \frac{1}{2}((\nabla \mathbf{u}) \cdot \cdot \mathbf{c})\mathbf{b} \quad (2.5)$$



Фиг. 4

Здесь 4A , 4C – тензоры жесткости оболочки; $\boldsymbol{\epsilon}$, \mathbf{k} – тензоры деформации; \mathbf{a} – единичный тензор в касательной плоскости; $\boldsymbol{\epsilon}$ – тензор деформации растяжения – сдвига в касательной плоскости; \mathbf{k} – тензор деформации изгиба – кручения.

2. *Геометрия спиральной оболочки.* Рассматривается цилиндрическая спиральная оболочка радиуса R (фиг. 4). Угол подъема витков спирали – α , длина полосы, образующей спираль, – l , ширина полосы – a , толщина – h . Ниже при описании кинематики оболочки используются две системы координат: цилиндрическая система координат r, φ, z , где ось z направлена по оси спирали, а $r \equiv R$, и криволинейная система координат s, ζ , введенная на поверхности оболочки следующим образом:

$$z = R(\sin \alpha s + \cos \alpha \zeta), \quad \varphi = \cos \alpha s - \sin \alpha \zeta \quad (2.6)$$

Безразмерные координаты s, ζ изменяются в пределах

$$-l/2 \leq R s \leq l/2, \quad -a/2 \leq R \zeta \leq a/2 \quad (2.7)$$

Единичные векторы $\mathbf{e}_s, \mathbf{e}_\zeta$, направленные по координатным линиям, и единичный вектор \mathbf{n} , определяющий направление внешней нормали к поверхности оболочки, имеют вид

$$\mathbf{e}_s = \cos \alpha \mathbf{e}_\varphi + \sin \alpha \mathbf{k}, \quad \mathbf{e}_\zeta = -\sin \alpha \mathbf{e}_\varphi + \cos \alpha \mathbf{k}, \quad \mathbf{n} = \mathbf{e}_r \quad (2.8)$$

3. *Приближенные уравнения, описывающие динамику тонкой спиральной оболочки.* Известно, что тензор жесткости оболочки на растяжение и сдвиг в касательной плоскости 4A пропорционален толщине оболочки h , а тензор жесткости на изгиб и кручение 4C пропорционален h^3 . Поэтому в случае $h/a \ll 1, h/l \ll 1$ рассматриваемую спиральную оболочку можно считать нерастяжимой. Таким образом,

тензор деформации растяжения – сдвига в касательной плоскости будем считать равными нулю

$$\boldsymbol{\epsilon} = 0 \quad (2.9)$$

При этом ${}^4\mathbf{A} \rightarrow \infty$, соотношение упругости (2.3) теряет смысл, а тензор сил в касательной плоскости $\mathbf{T} \cdot \mathbf{a}$ определяется из уравнений динамики (2.1) с учетом уравнения совместности деформаций

$$\Delta(\text{tr}(\mathbf{T} \cdot \mathbf{a})) - (1 + \nu)\nabla \cdot (\nabla \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{a})) = 0 \quad (2.10)$$

где ν – коэффициент Пуассона. Заметим, что уравнение совместности деформаций (2.10) является следствием предположения об отсутствии деформации растяжения – сдвига в касательной плоскости. Таким образом, задача сводится к решению системы уравнений (2.1), (2.2), (2.4), (2.5), (2.9), (2.10), где тензор жесткости на изгиб и кручение ${}^4\mathbf{C}$ имеет вид

$${}^4\mathbf{C} = D \left[\frac{1}{2}(1 + \nu)\mathbf{c}\mathbf{c} + \frac{1}{2}(1 - \nu)(\mathbf{a}_2\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_4\mathbf{a}_4) \right] \quad (2.11)$$

$$\mathbf{a}_2 = \mathbf{e}_s\mathbf{e}_s - \mathbf{e}_\zeta\mathbf{e}_\zeta, \quad \mathbf{a}_4 = \mathbf{e}_s\mathbf{e}_\zeta + \mathbf{e}_\zeta\mathbf{e}_s$$

где D – изгибная жесткость оболочки.

4. *Решение уравнений динамики тонкой спиральной оболочки.* Представим вектор перемещений в виде разложения по базису: $\mathbf{u} = \mathbf{u}_s\mathbf{e}_s + \mathbf{u}_\zeta\mathbf{e}_\zeta + w\mathbf{n}$. Выберем в качестве основной переменной перемещение по нормали к поверхности оболочки w . Путем несложных преобразований, уравнения движения оболочки сводятся к одному дифференциальному уравнению:

$$\left(\sin^2 \alpha \frac{\partial^4}{\partial s^4} + \cos^2 \alpha \frac{\partial^4}{\partial \zeta^4} - \frac{1}{4} \frac{\partial^4}{\partial s^2 \partial \zeta^2} \right) \left[\frac{D}{\rho R^4} (\tilde{\Delta} + 1)^2 w + \ddot{w} \right] - \frac{\sin^2 2\alpha}{4} \tilde{\Delta} \dot{w} = 0 \quad (2.12)$$

где $\tilde{\Delta} \equiv R^2 \Delta$ – безразмерный оператор Лапласа. Условие отсутствия деформации растяжения – сдвига в касательной плоскости (2.9), записанное в координатной форме, позволяют найти связь между компонентами вектора перемещений

$$\frac{\partial u_s}{\partial s} = -\cos^2 \alpha w, \quad \frac{\partial u_\zeta}{\partial \zeta} = -\sin^2 \alpha w, \quad \frac{\partial u_\zeta}{\partial s} + \frac{\partial u_s}{\partial \zeta} = \sin 2\alpha w \quad (2.13)$$

и получить уравнение совместности деформаций в перемещениях

$$\sin 2\alpha \frac{\partial^2 w}{\partial s \partial \zeta} + \sin^2 \alpha \frac{\partial^2 w}{\partial s^2} + \cos^2 \alpha \frac{\partial^2 w}{\partial \zeta^2} = 0 \quad (2.14)$$

Заметим, что уравнение (2.14) является непосредственным следствием уравнений (2.13).

Таким образом, задача сводится к нахождению решений уравнения динамики (2.12), удовлетворяющих дополнительному ограничению, которое накладывается уравнением совместности деформаций (2.14). Далее перейдем к цилиндрическим координатам (см. формулы (2.6)). Уравнение совместности деформаций (2.14), записанное в цилиндрических координатах, выглядит так

$$\partial^2 w / \partial z^2 = 0 \quad (2.15)$$

Очевидно, что решения уравнения динамики (2.12), удовлетворяющие уравнению совместности деформаций (2.15), имеют следующую структуру:

$$w(\varphi, z, t) = W(\varphi, z)e^{i\omega t}, \quad W(\varphi, z) = zW_1(\varphi) + W_2(\varphi) \quad (2.16)$$

Подставляя выражения (2.16) в уравнение динамики (2.12) и приравнявая нулю коэффициенты при различных степенях z , получаем систему двух дифференциальных уравнений относительно переменных $W_1(\varphi)$, $W_2(\varphi)$. Решив эту систему и возвратившись к переменным s, ζ , получим

$$\begin{aligned} W(s, \zeta) &= \sum_{j=1}^3 [(A_j^s(p_j s + q_j \zeta) + B_j^s) \sin[\lambda_j(\cos \alpha s - \sin \alpha \zeta)] + \\ &+ (A_j^c(p_j s + q_j \zeta) + B_j^c) \cos[\lambda_j(\cos \alpha s - \sin \alpha \zeta)]] \\ p_j &= \sin \alpha - \beta_j, \quad q_j = \cos \alpha + \beta_j \\ \beta_j &= \frac{2 \cos 2\alpha \Omega^2}{9 \cos \alpha (\lambda_j^4 + (\Omega^2 - 1)\lambda_j^2 + 2\Omega^2)} \end{aligned} \quad (2.17)$$

где $A_j^s, B_j^s, A_j^c, B_j^c$ – произвольные постоянные; λ_j – корни характеристического уравнения

$$\lambda^6 - 2\lambda^4 + (1 - \Omega^2)\lambda^2 - \frac{4}{3}\Omega^2 = 0, \quad \Omega = \sqrt{\frac{\rho R^4}{D}} \omega \quad (2.18)$$

Здесь Ω – безразмерная собственная частота, для определения которой требуется формулировка граничных условий. Как видно из уравнений (2.17), (2.18), безразмерная частота Ω не будет зависеть от физических характеристик оболочки ρ и D при условии, что эти величины не попадут в граничные условия.

5. *Формулировка граничных условий. Определение собственных частот колебаний тонкой спиральной оболочки.* Согласно формуле (2.17), функция $W(s, \zeta)$ содержит 12 констант, которые, разумеется, не позволяют удовлетворить всем граничным условиям классической теории оболочек. Однако с формальной точки зрения, для решения задачи в рамках рассматриваемой здесь упрощенной постановки, достаточно сформулировать 12 однородных уравнений, задающих перемещения или напряжения в каких-то точках границы.

Будем считать, что оболочка закреплена в углах, т.е. вектор перемещений $\mathbf{u}(s, \zeta, t) = \mathbf{u}_*(s, \zeta)e^{i\omega t}$ в угловых точках равен нулю

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_*\left(\frac{l}{2R}, \frac{a}{2R}\right) = 0, \quad \mathbf{u}_*\left(-\frac{l}{2R}, \frac{a}{2R}\right) = 0 \\ \mathbf{u}_*\left(\frac{l}{2R}, -\frac{a}{2R}\right) = 0, \quad \mathbf{u}_*\left(-\frac{l}{2R}, -\frac{a}{2R}\right) = 0 \end{aligned} \quad (2.19)$$

Из условия равенства нулю определителя системы (2.19) получим частотное уравнение. Как видно из уравнений (2.13), (2.15)–(2.18), определитель системы (2.19) зависит от безразмерной частоты Ω и трех безразмерных параметров: $\alpha, l/R, a/R$. Следовательно решение частотного уравнения представляет собой спектр безразмерных собственных частот вида

$$\Omega_n = \Omega_n(\alpha, l/R, a/R) \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (2.20)$$

Численные расчеты собственных частот и форм колебаний спиральной оболочки при значениях безразмерных параметров $\alpha = \pi/6$, $l/R = 20\pi$, $a/R = 1$ показали, что приближенная теория (2.17)–(2.19) адекватно описывает низкочастотные колебания.

6. *Обсуждение результатов.* Рассмотрим две тонкие спиральные оболочки с различными физическими и геометрическими характеристиками, но с одинаковыми безразмерными параметрами α , l/R , a/R . Будем считать что обе оболочки закреплены в углах, т.е. имеют место граничные условия (2.19). В этом случае, согласно формуле (2.20), спектры безразмерных собственных частот рассматриваемых оболочек совпадают

$$\forall n: \Omega_n^{(1)} = \Omega_n^{(2)} \quad (2.21)$$

Тогда, в соответствие с формулой (2.18), отношение собственных частот $\omega_n^{(1)}/\omega_n^{(2)}$ не зависит от их порядкового номера n

$$\frac{\omega_n^{(1)}}{\omega_n^{(2)}} = \sqrt{\frac{D_1 \rho_2 R_2^4}{D_2 \rho_1 R_1^4}} \quad (2.22)$$

Соотношение (2.22) может послужить теоретической основой для экспериментального определения изгибной жесткости наноболочек. Для определения изгибной жесткости нужно провести следующие измерения и вычисления:

измерить первую собственную частоту спиральной наноболочки $\omega_1^{(1)}$;

измерить массу m_1 и геометрические размеры l_1 , a_1 , R_1 наноболочки и вычислить ее поверхностную плотность $\rho_1 = m_1/(l_1 a_1)$;

взяв для сравнения макроскопическую спиральную оболочку с такими же безразмерными параметрами α , l/R , a/R и условиями закрепления, как у исследуемой наноболочки, определить ее характеристики $\omega_1^{(2)}$, D_2 , ρ_2 , R_2 ;

вычислить значение изгибной жесткости наноболочки D_1 , воспользовавшись формулой (2.22).

Заметим, что предлагаемый способ экспериментального определения изгибной жесткости не требует определения толщины наноболочки. Это обстоятельство является важным, поскольку для пленки, содержащей несколько атомарных слоев, в принципе невозможно однозначно определить понятие толщины – см. формулы (1.9).

3. Основные результаты и выводы. Показано, что использование моментного взаимодействия на наноуровне позволяет с единых позиций описать упругое деформирование однослойных и многослойных наноструктур, и определить поправку к изгибной жесткости, не обращающуюся в ноль для однослойных нанообъектов (1.16).

Полученное выше выражение для изгибной жесткости (1.16) указывает путь экспериментального определения аналога модуля Юнга для моментных напряжений \tilde{E}_∞ . Действительно, если удалось экспериментально определить изгибную жесткость однослойного нанообъекта D , то аналог модуля Юнга для моментных напряжений можно вычислить по формуле

$$N = 1: \tilde{E}_\infty = 3D/(2H) \quad (3.1)$$

Предложен метод экспериментального определения изгибной жесткости нанообъектов, основанный на измерении частот свободных колебаний, массы и геометрических размеров цилиндрических спиральных оболочек.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 05-01-00094, № 03-01-00721).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Prinz V.Ya., Chekhovskiy A.V., Preobrazhenskii V.V., Semyagin A.K., Gutakovskiy B.R.* A technique for fabricating InGaAs/GaAs nanotubes of precisely controlled lengths // *Nanotechnology*. 2002. V. 13. № 2. P. 231–233.
2. *Маслов А.В., Корыткова Э.Н., Гусаров В.В.* Кристаллизация наноразмерного хризотил-асбеста в гидротермальных условиях // *Минералогические музеи. Матер. 4 Международ. Симп. С-Пб., 2002. С. 286–287.*
3. *Kizuka T.* Direct atomistic observation of deformation in multiwalled carbon nanotubes // *Phys. Rev. B*. 1999. V. 59. № 7. P. 4646–4649.
4. *Peng L.-M., Zhang Z.L., Xue Z.Q., Wu Q.D., Gu Z.N., Pettifor D.G.* Stability of carbon nanotubes: how small can they be? // *Phys. Rev. Lett.* 2000. V. 85. № 15. P. 3249–3252.
5. *Salvetat J.-P., Briggs G.A.D., Bonard J.-M., Vacska R.R., Kulik A.J., Stöckli T., Burnham N.A., Forro L.* Elastic and shear moduli of single-walled carbon nanotube ropes // *Phys. Rev. Lett.* 1999. V. 82. № 5. P. 944–947.
6. *Леденцов Н.Н., Устинов В.М., Шукин В.А., Копьев П.С., Алферов Ж.И., Бимберг Д.* Гетероструктуры с квантовыми точками: получение свойства, лазеры. // *Физика и техника полупроводников*. 1998. Т. 32. № 4. С. 385–410.
7. *Ru C.Q.* Effective bending stiffness of carbon nanotubes // *Phys. Rev. B*. 2000. V. 62. № 15. P. 9973–9976.
8. *Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.* Аномалии механических характеристик наноразмерных объектов // *Докл. АН*. 2001. Т. 381. № 3. С. 825–827.
9. *Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.* Особенности расчета изгибной жесткости нанокристаллов // *Докл. АН*. 2002. Т. 385. № 4. С. 1–3.
10. *Новацкий В.* Теория упругости. М.: Мир, 1975. 872 с.
11. *Golod S.V., Prinz V.Ya., Mashanov V.I., Gutakovskiy A.K.* Fabrication of conducting GeSi/Si micro- and nanotubes and helical microcoils // *Semicond. Sci. Technol.* 2001. V. 16. P. 181–185.
12. *Vorob'ev A.B., Prinz V.Ya.* Directional rolling of strained heterofilms // *Semicond. Sci. Technol.* 2002. V. 17. P. 614–616.
13. *Принц В.Я.* Трехмерные самоформирующиеся наноструктуры на основе свободных напряженных гетеропленок // *Изв. ВУЗов. Физика*. 2003. № 6. С. 35–43.
14. *Prinz V.Ya.* A new concept in fabricating building blocks for nanoelectronic and nanomechanic devices // *Microelect. Eng.* 2003. V. 69. Is. 2–4. P. 466–475.
15. *Устинов Ю.А.* Задача Сен-Венана для псевдоцилиндров. М.: Наука, 2003. 128 с.
16. *Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Фирсова А.Д.* Учет моментного взаимодействия при расчете изгибной жесткости наноструктур // *Докл. АН*. 2003. Т. 391. № 6. С. 764–768.
17. *Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Фирсова А.Д.* Описание кристаллической упаковки частиц с учетом моментных взаимодействий // *Изв. РАН. МТТ*. 2003. № 4. С. 110–127.
18. *Жилин П.А.* Основные уравнения неклассической теории упругих оболочек // *Тр. Ленингр. политехн. ин-та*. 1982. Т. 386. С. 29–46.
19. *Альтенбах Х., Жилин П.А.* Общая теория упругих простых оболочек // *Успехи механики Advances in mechanics*. Warszawa: 1988. № 4. С. 107–148.

С.-Петербург

Поступила в редакцию
10.04.2005