

УДК 539.3

ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ СОБСТВЕННЫХ ЧАСТОТ НАНООБЪЕКТОВ

© 2006 г. В. А. Еремеев, Е. А. Иванова, академик Н. Ф. Морозов, А. Н. Соловьев

Поступило 27.09.2005 г.

В настоящее время актуальной является задача экспериментального определения механических характеристик нанообъектов. Один из наиболее эффективных методов определения упругих модулей основан на измерении собственных частот исследуемого объекта. Измерение частот нанообъектов оказывается проблематичным, в частности, при использовании оптических методов [1]. Главным, но не единственным фактором, ограничивающим область применимости оптических методов, является то, что луч лазера не точка, а пятно диаметра порядка длины волны света. Если размер исследуемого объекта меньше диаметра луча лазера, результаты измерений теряют смысл. Вместе с тем использование оптических методов позволяет измерять собственные частоты системы микроподложка–регулярная структура одинаковых нанообъектов. В результате возникают две задачи, лежащие на стыке механики и экспериментальной физики. Первая задача – это определение упругих модулей нанообъектов в условиях, когда известны частоты системы микроподложка–нанообъекты и упругие характеристики микроподложки. Вторая задача связана с анализом возможности выделения из спектра системы микроподложка–нанообъекты собственных частот нанообъектов. Успех решения обеих задач напрямую зависит от условий проведения эксперимента. Таким образом, задача механики заключается не только в интерпретации экспериментальных данных, но и в разработке теоретических основ методики эксперимента в плане рекомендаций, касающихся его механических аспектов.

В данной работе предложен метод определения собственных частот некоторых наноструктур

(нанотрубок и нанокристаллов), основанный на измерении собственных частот “большой системы”, состоящей из высокоориентированного массива (решетки) одинаковых нанотрубок или нанокристаллов, расположенных на подложке. Такого рода структуры могут быть получены в результате процессов самоорганизованного роста [2, 3]. Размеры этих нанообъектов в массиве, как правило, примерно одинаковы, что позволяет использовать макроскопические размеры такого массива для изучения свойств нанообъектов путем определения первых собственных частот системы решетка нанотрубок или нанокристаллов–подложка. Показано, что по найденному спектру “большой системы” (решетка–подложка) и спектру подложки можно определить собственные частоты одного нанообъекта. Это позволяет по экспериментальным данным для “больших систем” определить собственные частоты нанообъекта.

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 каждого из них в отдельности [4]. Причем характер смещения спектра существенно зависит от соотношения параметров исследуемого объекта и подложки. Вместе с тем известно, что в системах с распределенными параметрами, состоящими из нескольких тел, имеет место явление динамического демпфирования колебаний одного тела на парциальной частоте другого тела (“антирезонанс”). Это явление положено в основу метода измерения собственных частот нанообъектов с помощью атомно-силового микроскопа. Ниже показано, что в системах, состоящих из высокоориентированного массива одинаковых нанотрубок или нанокристаллов, выращенных на подложке, явление “антирезонанса” также имеет место и его можно использовать для выделения собственных частот нанообъектов из спектра “большой системы”. Провести аналитическое исследование собственных колебаний такой системы в рамках трехмерной теории упругости вряд ли возможно. Поэтому в качестве первого этапа исследования

*Ростовский государственный университет,
Ростов-на-Дону*

*Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет*

*Санкт-Петербургский государственный
университет*

*Донской государственный технический
университет, Ростов-на-Дону*

рассматривается стержневая модель “большой системы”, состоящая из горизонтального стержня, моделирующего подложку, и вертикальных стержней, моделирующих нанообъекты. В рамках стержневой модели проведен анализ собственных колебаний системы нанокристаллов и доказана возможность выделения из спектра “большой системы” спектра нанообъектов. На втором этапе исследования проводится численный анализ динамики реальной механической системы. В рамках плоской задачи теории упругости проведен расчет собственных частот решетки микроили нанокристаллов из оксида цинка на подложке сапфира, результаты которого также демонстрируют возможность выделения спектра нанообъектов из спектра “большой системы”.

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ

Рассмотрим стержневую модель “большой системы”, состоящей из горизонтального стержня длины L , моделирующего подложку, и N вертикальных стержней длиной H , моделирующих нанообъекты. Вертикальные стержни нижними концами жестко закреплены на горизонтальном стержне и расположены на одинаковом расстоянии l друг от друга, так что $L = (N + 1)l$. Верхние концы вертикальных стержней свободны, концы горизонтального стержня жестко закреплены. Введем следующие обозначения: C, D – изгибные жесткости горизонтальных и вертикальных стержней соответственно, ρ_1, ρ_2 – погонные плотности массы; $u, \varphi = u'$ – вертикальное перемещение и угол поворота горизонтального стержня; $v_n, w_n, \Psi_n = -v_n$ – горизонтальное и вертикальное перемещения и угол поворота n -го вертикального стержня; $N, M = Cu''$ – поперечная сила и изгибающий момент в сечении горизонтального стержня; $Nn = -Dv_n''', F_n, L_n = -Dv_n''$ – поперечная и продольная силы и изгибающий момент в сечении n -го вертикального стержня.

Уравнения движения вертикальных стержней имеют вид

$$Dv_n^{IV} + \rho_2 \ddot{v}_n = 0, \quad w_n' = 0, \quad F_n' = \rho_2 \dot{w}_n. \quad (1)$$

Уравнения движения горизонтального стержня выглядят так:

$$\begin{aligned} T' + \sum_{n=1}^N F_n|_{y=0} \delta(x-nl) &= \rho_1 \ddot{u}, \\ M' + T + \sum_{n=1}^N L_n|_{y=0} \delta(x-nl) &= 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Вертикальные стержни жестко прикрепляются к горизонтальному, так что выполняются кинематические условия сопряжения

$$v_n|_{y=0} = 0, \quad w_n|_{y=0} = u|_{x=nl}, \quad \Psi_n|_{y=0} = \varphi|_{x=nl}. \quad (3)$$

Граничные условия для всей системы формулируются следующим образом:

$$\begin{aligned} u|_{x=0} = 0, \quad \varphi|_{x=0} = 0, \quad u|_{x=L} = 0, \\ \varphi|_{x=L} = 0, \\ N_n|_{y=H} = 0, \quad F_n|_{y=H} = 0, \quad L_n|_{y=H} = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Решение уравнений (1), описывающих движение вертикальных стержней, в совокупности с граничными условиями на свободных концах вертикальных стержней (4) позволяет найти связь между усилиями и перемещениями в нижних точках стержней:

$$\begin{aligned} F_n|_{y=0} &= -\rho_2 H \dot{w}|_{y=0}, \\ L_n|_{y=0} &= \frac{D\mu}{g(\mu H)} \Psi_n|_{y=0}, \end{aligned} \quad (5)$$

где параметр $g(\mu H)$ имеет вид

$$g(\mu H) = \frac{1 + \cos(\mu H) \operatorname{ch}(\mu H)}{\sin(\mu H) \operatorname{ch}(\mu H) - \cos(\mu H) \operatorname{sh}(\mu H)}.$$

Исключив из уравнений (2) поперечную силу T и приняв во внимание соотношение упругости $M = Cu''$ и соотношения (3), (5), сведем систему (2) к одному дифференциальному уравнению

$$\begin{aligned} Cu^{IV} + \rho_1 \ddot{u} &= - \sum_{n=1}^N \left[\rho_2 H \ddot{w} \delta(x-nl) + \right. \\ &\left. + \frac{D\mu}{g(\mu H)} u' \delta'(x-nl) \right]. \end{aligned} \quad (6)$$

Если вертикальных стержней достаточно много, можно считать, что они непрерывно распределены по длине горизонтального стержня. Осреднив правую часть уравнения (6), упростим математическую постановку задачи, сведя ее к уравнению

$$u^{IV} - \frac{ND\mu}{Cg(\mu H)L} u'' + \frac{\rho_1}{C} \left(1 + N \frac{\rho_2 H}{\rho_1 L} \right) \ddot{u} = 0.$$

Исследование сформулированной выше задачи показало существование двух групп решений. Первая группа решений соответствует ситуации, когда вертикальные стержни движутся как консольные балки. Собственные частоты колебаний системы определяются уравнением

$$1 + \cos(\mu H) \operatorname{ch}(\mu H) = 0, \quad \mu = \sqrt[4]{\frac{\rho_2}{D}} \sqrt{\omega}.$$

При этом амплитуды колебаний горизонтального стержня малы по сравнению с амплитудами колебаний вертикальных стержней. Вторая группа решений соответствует ситуации, когда система колеблется с частотами, близкими к частотам колебаний системы одного горизонтального стержня. Здесь малы амплитуды колебаний вертикальных стержней по сравнению с амплитудами колебаний горизонтального стержня.

Сравнение величин λL и μH (здесь $\lambda = 4\sqrt{\frac{\rho_1}{C}}\sqrt{\omega}$)

позволяет определить взаимное расположение спектров подложки и нанобъектов. Первые собственные частоты подложки соответствуют значениям $\lambda L \sim 1$, первые собственные частоты нанобъектов соответствуют значениям $\mu H \sim 1$. Если $\frac{\mu H}{\lambda L} \ll 1$, первые собственные частоты нанобъектов существенно ниже первых собственных частот подложки. Если $\frac{\mu H}{\lambda L} \gg 1$, первые собственные частоты нанобъектов существенно выше первых собственных частот подложки. Имеет место следующая оценка:

$$\frac{\mu H}{\lambda L} \sim \left(\frac{h_1}{h_2}\right)^2 \frac{H}{L},$$

где h_1 и h_2 – характерные размеры сечений горизонтального и вертикальных стержней соответственно.

Таким образом, в случае моделирования “большой системы” и подложки в рамках механики стержней возможно выделение из спектра “большой системы” собственных частот, соответствующих частоте одного нанобъекта.

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ДИНАМИКИ РЕАЛЬНОЙ СИСТЕМЫ

В качестве примера исследования реальной наноструктуры рассмотрим задачу определения собственных частот решетки микро- и нанокристаллов из оксида цинка (ZnO). Монокристаллы из ZnO являются пьезоэлектриками и благодаря своим высоким оптическим и механическим свойствам имеют большие потенциальные возможности для применений в нанoeлектронике, нанофотонике и наномеханике, в частности, для создания УФ-лазеров, сенсоров химических и биологических веществ, солнечных батарей, УФ-фотодетекторов и других устройств. Монокристаллические нанокристаллы ZnO изготавливаются различными методами: термическим испарением, химическим осаждением из газовой фазы, методом импульсного лазерного напыления и др. Высота полу-

Таблица 1

Собственные частоты “большой системы”, ГГц	Собственные частоты подложки, ГГц
0.036494	0.036594
0.103909	–
0.103971	–
0.104039	–
0.104106	–
0.104226	–
0.104322	–
0.104467	–
0.104612	–
0.134652	0.134973
0.136246	0.136017
0.280004	0.280137

чаемых нанокристаллов составляет 1.5–3.0 мкм, а диаметр 30–100 нм, микрокристаллы имеют высоту 20–100 мкм и диаметр 1.0–3.0 мкм.

С точки зрения механики сплошной среды решетка нанокристаллов на подложке представляет собой составное пьезоэлектрическое тело. Основные уравнения электроупругости в приближении электростатики при отсутствии массовых сил имеют вид [5–7]

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad \nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (7)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{e} \cdot \mathbf{E}, \quad \mathbf{D} = \mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{E}, \quad (8)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), \quad \mathbf{E} = -\nabla \phi, \quad (9)$$

где \mathbf{u} – вектор перемещений, \mathbf{E} – вектор напряженности электрического поля, выраженный че-

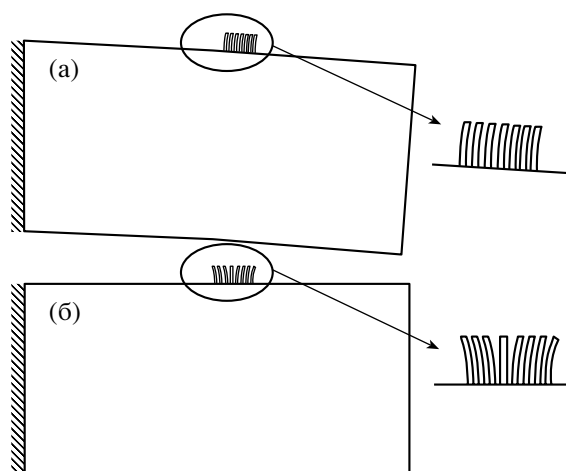


Рис. 1. Собственные моды: а – определяемые подложкой, б – локализованные в решетке нанокристаллов.

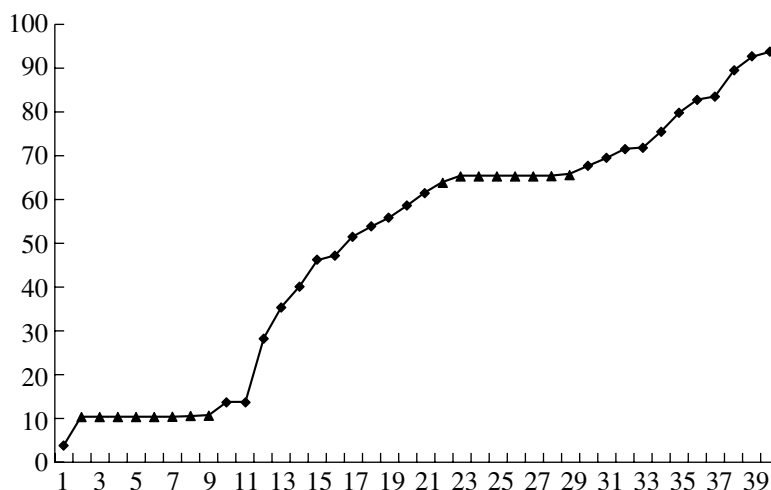


Рис. 2. Распределение собственных частот “большой системы”.

рез потенциал ϕ , σ – тензор напряжений, \mathbf{D} – вектор электрической индукции, ϵ – тензор деформаций, ∇ – оператор градиента, ρ – плотность, \mathbf{C} , \mathbf{e} и $\boldsymbol{\epsilon}$ – матрица жесткости, пьезоэлектрические и диэлектрические постоянные. Далее ограничимся рассмотрением случая плоской задачи.

Модельный анализ уравнений (7)–(9) при соответствующих краевых условиях для решетки кристаллов ZnO на подложке сапфира проведен при помощи конечно-элементного пакета ACELAN [8–10]. Свойства монокристаллов оксида цинка и сапфира взяты из [11].

В численном эксперименте найдены собственные частоты консольно закрепленного ZnO нанокристалла высотой 1 мкм и толщиной 0.1 мкм. Первая и вторая частоты оказываются равными 0.10797 и 0.67763 ГГц и соответствуют изгибным колебаниям. В качестве модели подложки рассматривался микрокристалл сапфира прямоугольной формы (10 × 20 мкм), закрепленный по одной боковой стороне. “Большая система” моделировалась описанным микрокристаллом сапфира с набором 8 одинаковых нанокристаллов, расположенных на верхней стороне подложки. Результаты модального анализа представлены в табл. 1. Пропуски во второй колонке таблицы связаны с отсутствием для подложки соответствующих собственных частот. Примеры собственных форм колебаний представлены на рис. 1. Рисунок 1а соответствует первой частоте в табл. 1. Кинематический анализ собственных форм, соответствующих следующим 8 собственным частотам, показывает, что движения большой системы локализованы в нанокристаллической “щетке” (рис. 1б), при этом форма колебаний нанокристаллов соответствует первой собственной частоте одного нанокристалла. Частоты колебания пакета нанокристаллов отличаются от частоты одного

нанокристалла менее чем на 4%. Аналогичное динамическое поведение “большой системы” проявляется в окрестности второй собственной частоты единичного нанокристалла, что иллюстрируется рис. 2, на котором каждое плато на изображенной на нем кривой соответствует собственным частотам единичного нанокристалла. Здесь треугольниками обозначены частоты, соответствующие частоте одного нанокристалла, а ромбиками – частотам подложки.

Расчеты показали, что спектр “большой системы” приближенно может быть представлен как объединение собственных частот подложки и частот, порожденных частотами одного нанокристалла, что вполне согласуется с результатами анализа стержневой модели. Таким образом, предложенный метод позволяет с высокой точностью экспериментально определить первые собственные частоты одного нанобъекта по спектру системы решетка–подложка и одной подложки.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты 03–07–90411, 05–01–00094).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Marshall R.H., Sokolov I.A., Ning Y.N. et al. // Meas. Sci. Technol. 1996. V. 7. P. 1683–1686.
2. Springer Handbook of Nanotechnology. B. Bhushan. Ed. B.: Springer, 2004. P.
3. Handbook of Nanoscience, Engineering, and Technology. W.A. Goddard, D.W. Brenner, S.E. Lyshevski et al. Eds. Boca Raton: CRC Press, 2003. 824 p.
4. Гулд С. Вариационные методы в задачах о собственных значениях. Введение в метод промежуточных задач Вайнштейна. М.: Мир, 1970. 328 с.
5. Можен Ж. Механика электромагнитных сплошных сред. М.: Мир, 1991. 560 с.

6. *Партон В.З., Кудрявцев Б.А.* Электромагнитоупругость пьезоэлектрических и электропроводных тел. М.: Наука, 1988. 472 с.
7. *Новацкий В.* Электромагнитные эффекты в твердых телах. М.: Мир, 1986. 160 с.
8. *Белоконь А.В., Еремеев В.А., Наседкин А.В., Соловьев А.Н.* // ПММ. 2000. Т. 64. В. 3. С. 381–393.
9. *Акопов О.Н., Белоконь А.В., Надолин К.А. и др.* // Мат. моделирование. 2001. Т. 13. № 2. С. 51–60.
10. *Васильченко К.Е., Наседкин А.В., Соловьев А.Н.* // Вычисл. технологии. 2005. Т. 10. № 1. С. 10–20.
11. *Блистанов А.А., Бондаренко В.С., Чкалова В.В. и др.* Акустические кристаллы: Справочник. М.: Наука, 1982. 632 с.