

УДК 539.3

СОБСТВЕННЫЕ КОЛЕБАНИЯ НАНОТРУБОК

© 2007 г. В. А. Еремеев, Е. А. Иванова, академик Н. Ф. Морозов, С. Е. Строчков

Поступило 22.03.2007 г.

Нанообъекты демонстрируют аномальные свойства, весьма привлекательные для приложений и вместе с тем не связанные, вообще говоря, со свойствами макроскопических образцов [1–4]. Поэтому одной из ключевых проблем наномеханики является определение механических и физических характеристик нанообъектов. Один из наиболее эффективных методов определения упругих модулей, используемых в механике макрообъектов, основан на измерении собственных частот.

В [5, 6] 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, выращенных на подложке макроскопических размеров и расположенных перпендикулярно подложке, и одной подложки. Согласно [5, 6] спектр собственных частот “большой системы” можно разделить на две части. Одна часть спектра системы соответствует собственным частотам одного нанообъекта. При колебаниях с этими частотами подложка остается практически неподвижной. Другая часть спектра системы представляет собой спектр собственных частот, близких к собственным частотам подложки без нанообъектов. При этих частотах амплитуда колебаний нанообъектов оказывается существенно меньше амплитуды колебаний подложки. Развивая метод [5, 6], можно предложить две модификации методики проведения экспериментов по определению собственных частот.

Модификация 1. Измерить собственные частоты системы решетка нанотрубок или нанокристаллов – подложка. Измерить собственные

частоты точно такой же подложки без нанообъектов. Сравнить два полученных спектра. Частоты в спектре системы, которым не находится соответствия среди частот в спектре подложки, представляют собой частоты нанообъектов.

Модификация 2. Измерить резонансные частоты системы, зафиксировав электромагнитное излучение нанообъектов, многие из которых являются пьезоэлектриками, и одновременно амплитуду колебаний подложки. Резонансные частоты, при которых амплитуда колебаний подложки равна нулю, являются собственными частотами нанообъектов.

В случае перпендикулярно расположенных нанотрубок метод [5, 6] позволяет оценить собственные частоты, соответствующие первым изгибным собственным модам нанотрубки. По ним можно определить стержневую изгибную жесткость нанотрубки. Для определения изгибной жесткости нанопленки, из которой изготовлена нанотрубка, необходимо знать собственные частоты лежащих нанотрубок. Методы получения различных наноструктур из многослойных полупроводниковых нанопленок (GaAs, InAs, GeSi и др.), представляющих большой интерес для электроники, в том числе и нанотрубок, расположенных горизонтально на подложке, развиты в [7, 8]. Эффективные физические свойства таких пленок существенно зависят от их строения и остаточных напряжений и в значительной степени определяют долговечность и прочность наноконструкций. Развитию методов исследования изгибной жесткости нанообъектов посвящены также [9, 10].

Метод определения собственных частот нанообъектов [5, 6] здесь обобщен на случай нанотрубок, закрепленных параллельно подложке. Показано, что из спектра “большой системы” возможно выделение нескольких первых собственных частот, соответствующих изгибным колебаниям одной нанотрубки, что позволяет оценить их изгибную жесткость. Проведено конечно-элементное моделирование нанотрубок из арсенида галлия.

*Южный научный центр
Российской Академии наук, Ростов-на-Дону
Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет
Санкт-Петербургский государственный
университет
Южный федеральный университет,
Ростов-на-Дону*

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ

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

Основные уравнения линейной теории оболочек имеют вид [11]

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

Здесь \mathbf{T} , \mathbf{M} – тензоры усилий и моментов, через \mathbf{T}_\times обозначен векторный инвариант тензора \mathbf{T} , ρ – поверхностная плотность, \mathbf{u} – вектор перемещений, $\boldsymbol{\varphi}$ – вектор поворота, $\boldsymbol{\varepsilon}$ – тензор деформации растяжения-сдвига в касательной плоскости, $\boldsymbol{\kappa}$ – 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.

При описании изгибных колебаний цилиндрической оболочки будем использовать цилиндрическую систему координат r, θ, z , где $r \equiv R$. Представим вектор перемещений и вектор поворотов в виде разложения по базису цилиндрической системы координат

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

Можно показать, что задача о свободных колебаниях цилиндрической оболочки 5, соответствующих низшим собственным частотам, сводится к решению дифференциального уравнения

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

где D – изгибная жесткость оболочки.

Решения (2) имеют вид $u_r(\theta, t) = U_r(\theta)e^{i\omega t}$, где

$$U_r(\theta) = \sum_{j=1}^3 [A_j \sin(\lambda_j \theta) + B_j \cos(\lambda_j \theta)],$$

λ_j – корни характеристического уравнения $\lambda^6 - 2\lambda^4 + (1 - \Omega^2)\lambda^2 - \Omega^2 = 0$ ($\Omega = \omega \sqrt{\frac{\rho}{D}} R^2$), а постоянные интегрирования A_j , B_j определяются из условий периодичности

$$\begin{aligned} u_\theta(0, t) &= u_\theta(2\pi, t), \quad u_r(0, t) = u_r(2\pi, t), \\ \varphi_z(0, t) &= \varphi_z(2\pi, t) \end{aligned}$$

и условий сопряжения оболочки с подложкой.

Изгибные колебания пластины описываются уравнениями

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{T} + \sum_{n=1}^N \mathbf{F}_n \delta(x - na) &= \rho_* \ddot{\mathbf{u}}, \\ \nabla \cdot \mathbf{M} + \mathbf{T}_\times + \sum_{n=1}^N \mathbf{L}_n \delta(x - na) &= 0, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\mathbf{F}_n = \mathbf{e}_\theta \cdot \mathbf{T}^{(n)}|_{\theta=0}$, $\mathbf{L}_n = \mathbf{e}_\theta \cdot \mathbf{M}^{(n)}|_{\theta=0}$ – сила и момент, действующие на пластину со стороны цилиндрической оболочки с номером n , $\delta(x)$ – дельта-функция.

Пренебрегая деформацией поперечного сдвига и растяжением пластины, уравнения движения (3) можно привести к виду

$$\begin{aligned} C \Delta \Delta w + \rho_* \dot{w} &= - \sum_{n=1}^N (T_{\theta r}^{(n)}|_{\theta=0} \delta(x - na) + \\ &+ M_{\theta z}^{(n)}|_{\theta=0} \delta'(x - na)), \end{aligned} \quad (4)$$

где w – поперечный прогиб (перемещение в направлении оси y), C – изгибная жесткость пластины, а ρ_* – ее поверхностная плотность. Решения (4) будем искать в виде $w(x, z, t) = W(x, z)e^{i\omega t}$.

Анализ уравнений, определяющих постоянные интегрирования $A_j^{(n)}$, $B_j^{(n)}$, $n = 1, 2, \dots, N$, позволил доказать существование двух взаимоисключающих ситуаций.

1. В первом случае нетривиальные решения существуют, если

$$W|_{x=na} = 0, \quad W'|_{x=na} = 0. \quad (5)$$

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 усло-

вия (5) заменяются непрерывными условиями $W(x) \equiv 0$, $W'(x) \equiv 0$ ($W \equiv \frac{\partial W}{\partial x}$), выполнение которых означает, что пластина остается неподвижной. Такие решения описывают колебания цилиндрических оболочек, лежащих на жестком основании.

Таким образом, из спектра системы выделяется спектр собственных частот колебаний нанобъектов.

2. Во втором случае подложка совершает колебания вместе с нанотрубками. Можно показать, что малость динамических слагаемых, связанных с наличием оболочек, определяется исключительно малостью размеров оболочек в сравнении с размерами пластины. Для того чтобы были малы определяемые оболочками силовые факторы, необходимо, чтобы толщина оболочек была много меньше толщины пластины, а линейные размеры пластины и оболочек различались не столь существенно. Определяющей является малость величины $N \left(\frac{h}{N} \right)^3 \left(\frac{L}{R} \right)^2$.

Поведение системы с горизонтально расположенными нанотрубками отличается от аналогичной системы с вертикально ориентированными нанотрубками [5, 6], поскольку прикрепленные горизонтально нанотрубки изменяют эффективную жесткость пластины и с точки зрения эффективных свойств пластина с горизонтальными нанотрубками оказывается анизотропной и неоднородной.

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ СОБСТВЕННЫХ КОЛЕБАНИЙ

Не делая допущений о виде напряженно-деформированного состояния, исследуем систему, состоящую из некоторого числа нанотрубок, лежащих параллельно друг другу на подложке, в рамках трехмерной теории при помощи метода конечных элементов. Поскольку рассматриваемые материалы (GaAs, InAs, GeSi и др.) обладают пьезоэлектрическими свойствами [12, 13], то в целом такая система представляет собой составное пьезоэлектрическое тело. Уравнения электростатики в приближении электростатики при отсутствии массовых сил имеют вид [14]

$$\rho \ddot{\mathbf{u}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad \nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (6)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{e} \cdot \mathbf{E}, \quad \mathbf{D} = \mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{E}, \quad (7)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), \quad \mathbf{E} = -\nabla \phi, \quad (8)$$

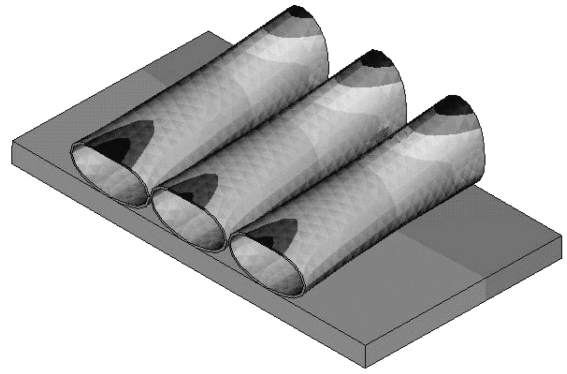


Рис. 1. Собственные моды, локализованные в нанотрубках.

$$\begin{aligned} \mathbf{u}|_{\Gamma_1} &= \mathbf{u}_0, & \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}|_{\Gamma_2} &= \mathbf{f}, & \phi|_{\Gamma_3} &= \phi_0, \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}|_{\Gamma_4} &= q, \end{aligned} \quad (9)$$

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, ∇ – трехмерный оператор градиента, ρ – плотность, \mathbf{C} , \mathbf{e} и $\boldsymbol{\varepsilon}$ – матрица жесткости, пьезоэлектрические и диэлектрические постоянные. На части Γ_1 границы тела Γ заданы перемещения \mathbf{u}_0 , а на части Γ_2 – нагрузки \mathbf{f} , на Γ_3 задан электрический потенциал ϕ_0 , а на Γ_4 – поверхностный заряд q ($\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 = \Gamma_3 \cup \Gamma_4$, $\Gamma_1 \cap \Gamma_2 = \emptyset$, $\Gamma_3 \cap \Gamma_4 = \emptyset$).

Для модального анализа краевой задачи (6)–(9) использован конечно-элементный пакет ANSYS. Проведен ряд вычислительных экспериментов для разного числа нанотрубок (от одной до 10), разной геометрии системы (отношений толщин подложки и нанопленки, радиуса нанотрубки к длине подложки и др.) и разных условиях закрепления подложки. Рассматривались используемые на практике материалы подложки и нанотрубок [7], свойства которых взяты из [12, 13], а геометрические параметры такие же, как в [7, 8]. Расчеты показали, что вне зависимости от характера закрепления подложки возможно подобрать параметры задачи так, чтобы из общего спектра “большой системы” можно было выделить собственные частоты нанотрубок и подложки. Это является численным подтверждением результатов теоретического анализа, приведенного выше.

Результаты расчетов для свободной подложки из сапфира с тремя нанотрубками из GaAs представлены на рис. 1–4. На рис. 1–3 показаны некоторые собственные моды, на рис. 4 – распределение собственных частот по их порядку. Квадратиками на рис. 4 отмечены моды, при которых наблюдаются существенные движения подложки, круглыми маркерами отмечены собственные ча-

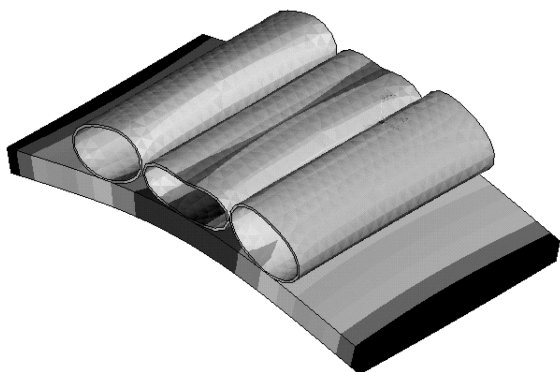


Рис. 2. Собственная мода, соответствующая первой изгибной моде подложки.

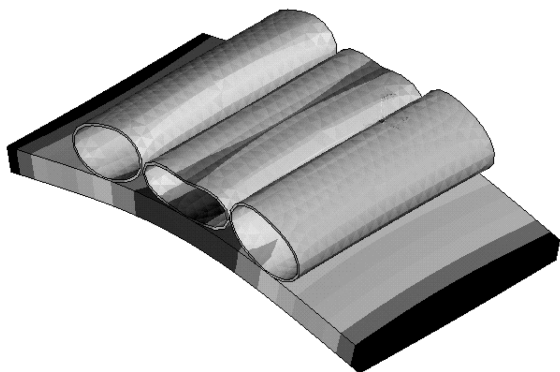


Рис. 3. Пример высокочастотной собственной моды: колебания подложки и нанотрубок.

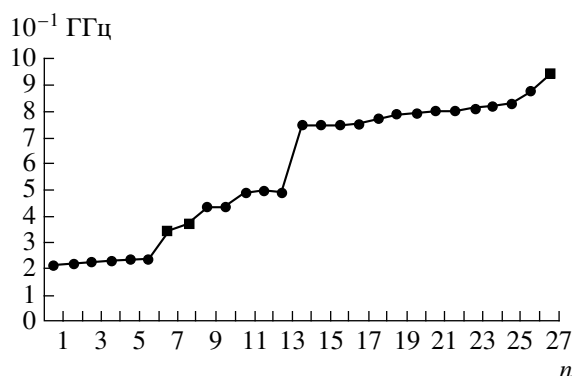


Рис. 4. Распределение собственных частот "большой системы" в зависимости от их номера n . Здесь квадратами выделены собственные частоты, соответствующие колебаниям подложки.

стоты, при которых подложка практически неподвижна, а колеблются нанотрубки. Рисунку 1 соответствует собственным колебаниям, локализованным в нанотрубках. Собственные частоты этих колебаний (первые 6 точек на графике рис. 4) соответствуют первой собственной частоте нано-

трубки, закрепленной по части боковой поверхности. На этих частотах подложка практически неподвижна, а нанотрубки испытывают колебания, при которых их поперечное сечение становится овалом. Эти первые частоты позволяют оценить изгибную жесткость пленки, образующей нанотрубку. На рис. 2 показаны собственные колебания при частоте, соответствующей первой изгибной моде колебаний подложки. В отличие от [5, 6], где при таких модах вертикально закрепленные нанообъекты двигались практически как абсолютно жесткие тела, здесь эта мода колебаний также сопровождается деформацией нанотрубок.

Следует отметить, что в отличие от случая вертикального массива нанокристаллов [5, 6] здесь взаимодействие подложки и нанотрубок при колебаниях происходит в большей степени. На рис. 3 показана мода, для которой подложка совершает колебания согласно третьей собственной частоте (последняя точка на рис. 4), вместе с тем форма колебаний нанотрубок уже соответствует высокочастотным колебаниям одной нанотрубки. Поскольку распределенные нанотрубки влияют не только на массу системы в целом, но и на ее эффективную жесткость, то для таких, как на рис. 3, мод колебаний изменяются не только форма колебаний, но и значения собственных частот "большой системы" отличаются как от собственных частот одной подложки, так и одной нанотрубки. Для первых же частот численное совпадение значений собственных частот "большой системы" с соответствующими парциальными собственными частотами подложки и одной нанотрубки вполне удовлетворительное.

Численный анализ показывает также наличие собственных колебаний, практически локализованных в одной нанотрубке. Такие колебания менее интересны с точки зрения детектирования в эксперименте, особенно в случае измерения возникающих электрических полей, так как от большего числа колеблющихся нанотрубок напряженность поля больше. С этой точки зрения, чем больше на подложке нанотрубок, тем эффективнее предлагаемый метод.

Конечно-элементные расчеты на основе трехмерной теории подтвердили выводы о возможности выделения собственных частот одной нанотрубки, сделанные выше на основе анализа двумерных уравнений движения оболочек. Проведенный здесь теоретический и численный анализ позволяет сделать заключение о возможности экспериментального определения собственных частот нанотрубки на основе предложенных модификаций.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты 05-01-00094-а, 06-000452-а), Фонда содействия отечественной науке, гранта Президен-

та РФ МД-4829.2007.1 и гранта Президента РФ НШ-4518.2006.1.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гуткин М.Ю., Овидько И.А. Дефекты и механизмы пластичности в наноструктурных и некристаллических материалах. СПб.: Янус, 2003. 194 с.
2. Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. // ДАН. 2001. Т. 381. № 3. С. 345–347.
3. Springer Handbook of Nanotechnology / B. Bhushan. Ed. B. etc.: Springer, 2004. V. 36. 1222 p.
4. Handbook of Nanoscience, Engineering, and Technology. Eds. W.A. Goddard, D.W. Brenner, S.E. Lyshevski, et al. Boca Raton: CRC Press. 2003. 824 p.
5. Еремеев В.А., Иванова Е.А., Морозов Н.Ф., Соловьев А.Н. // ДАН. 2006. Т. 406. № 6. С. 756–759.
6. Еремеев В.А., Иванова Е.А., Морозов Н.Ф., Соловьев А.Н. // ЖТФ. 2007. Т. 77. В. 1. С. 3–8.
7. Golod S.V., Prinz V.Ya., Mashanov V.I., Gutakovskii A.K. // Semiconductor Sci. and Technol. 2001. V. 16. P. 181–185.
8. Принц В.Я., Голод С.В. // ПМТФ. 2006. № 6. С. 114–128.
9. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. // ДАН. 2002. Т. 385. № 4. С. 494–496.
10. Иванова Е.А., Морозов Н.Ф. // ДАН. 2005. Т. 400. № 4. С. 475–479.
11. Жилин П.А. Прикладная механика. Основы теории оболочек. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2006. 167 с.
12. Блистанов А.А., Бондаренко В.С., Чкалова В.В. и др. Акустические кристаллы. Справочник. М.: Наука, 1982. 632 с.
13. Dargys A., Kundrotas J. Handbook of physical properties of Ge, Si, GaAs and InP. Vilnius: Sci. and Encyclopedia Publ., 1994. 264 p.
14. Можен Ж. Механика электромагнитных сплошных сред. М.: Мир, 1991. 560 с.