

# Методы механики сплошных сред при решении задач наномеханики

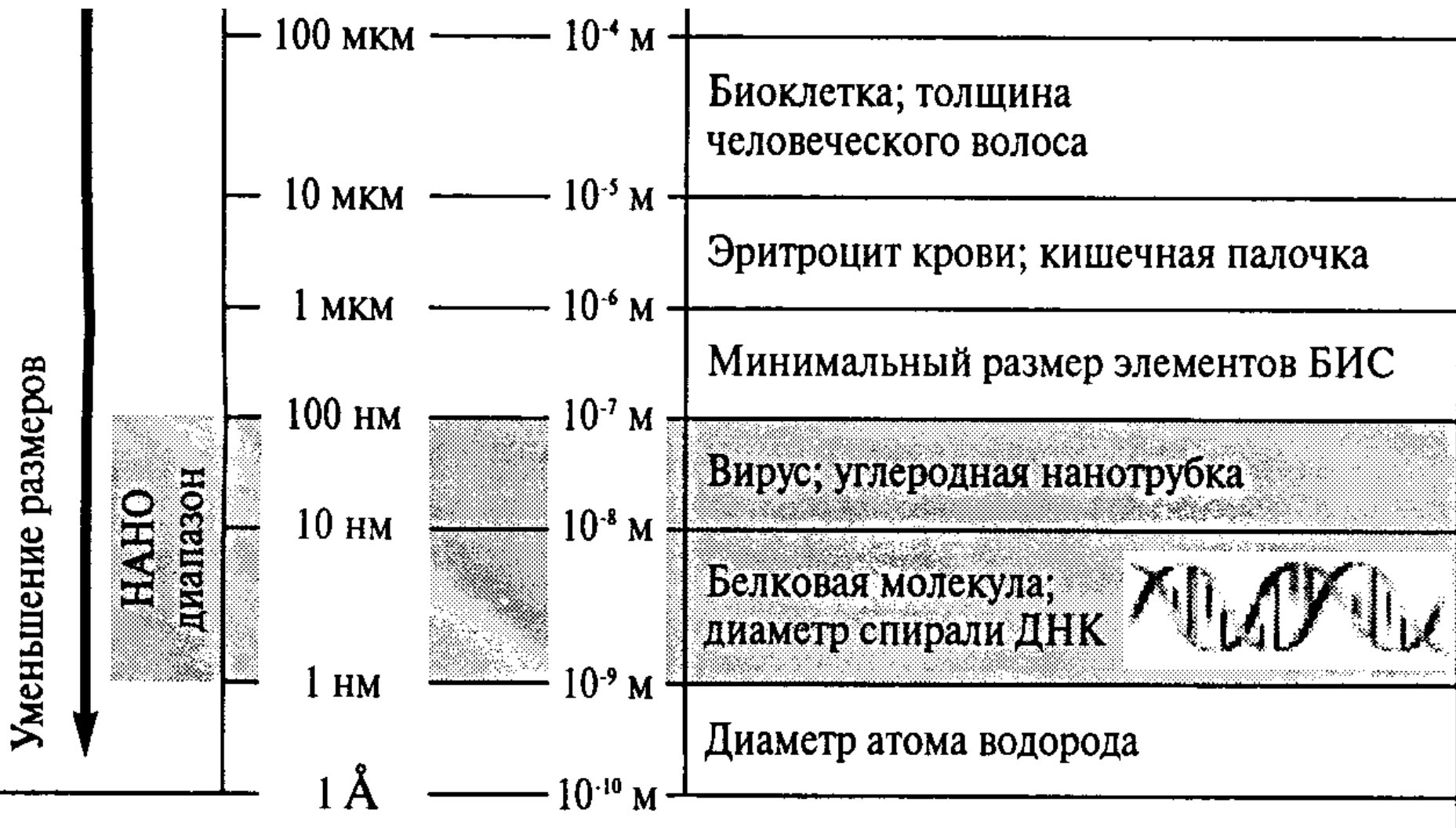
Е.А. Иванова

*Институт проблем машиноведения РАН*

*Санкт-Петербург*

# Нано-размерный масштабный уровень

К нанотехнологии принято относить процессы и объекты с характерными размерами от 1 до 100 нм.



# Практическое применение нанотехнологий

## Информационные технологии

- Полупроводниковые устройства
- Запоминающие устройства

- Устройства с очень малым энергопотреблением
- «Карманные» суперЭВМ
- Повышение характеристик ЭВМ на три порядка

## Медицина, Биология

- Биодатчики
- «Адресная доставка» лекарств

- Диагностика раковых заболеваний
- Новые методы введения лекарств

## Экология, Энергетика

- Использование солнечной энергии
- Топливные элементы
- Экологически чистые материалы

- Борьба с «парниковым эффектом»
- Создание общества «гармонии с природой»

## Новые термостойкие и прочные материалы

Фундаментальные исследования методов измерения, обработки и моделирования поведения вещества на атомарно-молекулярном уровне

# Экспериментальное исследование свойств отдельных нанообъектов

- Возможности современной техники применительно к отдельным нанообъектам
- Измерительное оборудование
- Специфика экспериментов с нанообъектами; существующие проблемы
- Роль механики при решении задач экспериментального исследования нанообъектов
- Предлагаемые подходы к решению задач экспериментального определения механических свойств нанообъектов

# **Возможности современной техники применительно к отдельным нанообъектам**

1. Получение изображения рельефа поверхности на атомарном уровне.
2. Манипулирование нанообъектами вплоть до отдельных атомов.
3. Различные виды литографии на нано-размерном масштабном уровне.

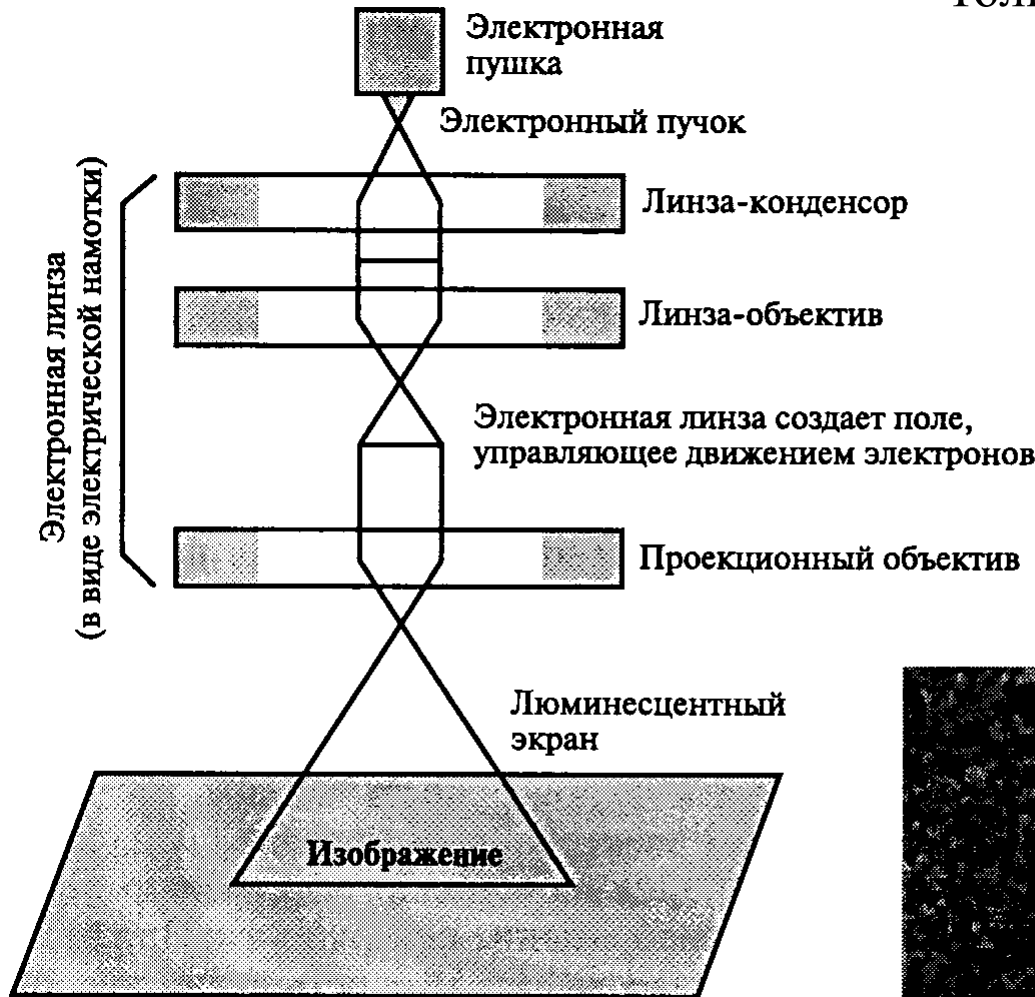
## **Измерительное оборудование**

- Просвечивающий электронный микроскоп (ПЭМ)
- Сканирующий электронный микроскоп (СЭМ)
- Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ)
- Атомно-силовой микроскоп (АСМ)
- Сканирующий оптический микроскоп ближнего поля (СОМБП)

# Просвечивающий электронный микроскоп (ПЭМ)

Разрешающая способность – 0.2 нм

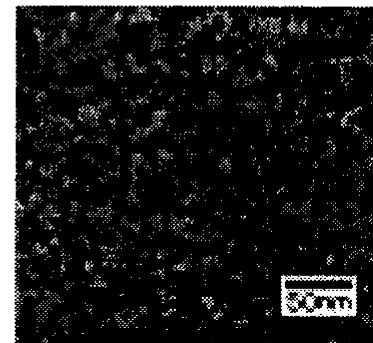
Толщина образца – меньше 1 мкм



Образцы, представленные в виде сверхтонких пластин, просвечиваются электронными пучками, которые затем и формируют изображение

Исследуемые образцы должны быть очень тонкими, поскольку их толщина определяет размер деталей на изображении.

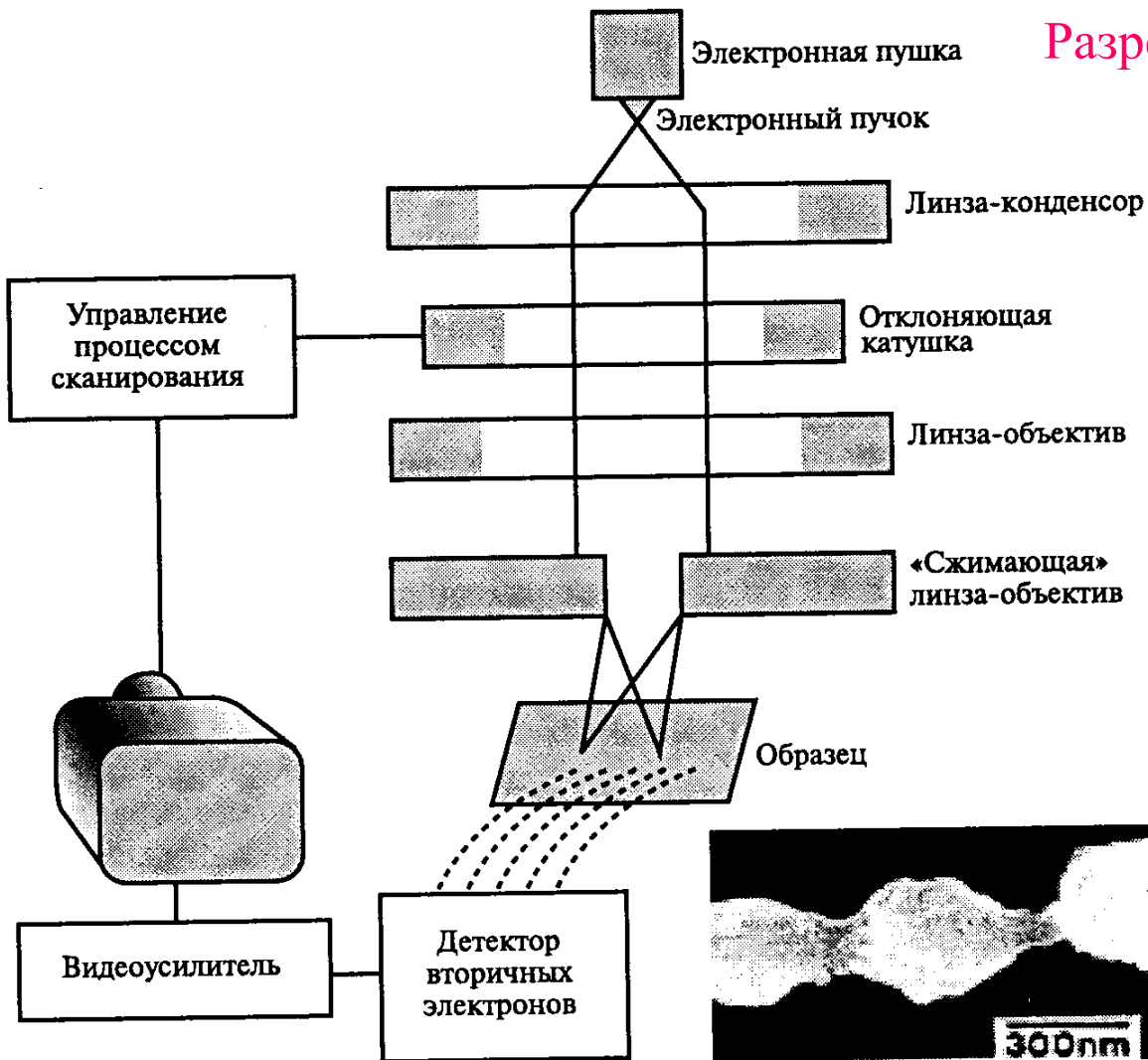
Необходимо поддерживать высокий вакуум



ПЭМ-изображение микроструктуры наностекла из окиси кобальта

# Сканирующий электронный микроскоп (СЭМ)

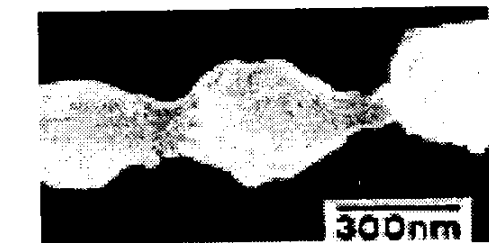
Разрешающая способность 0.5 нм



Поверхность сканируется электронным пучком, а изображение формируется по измерениям отраженного или вторичного электронного излучения

Необходимо поддерживать высокий вакуум

Требуется тщательная подготовка образца



Пример получаемого изображения.

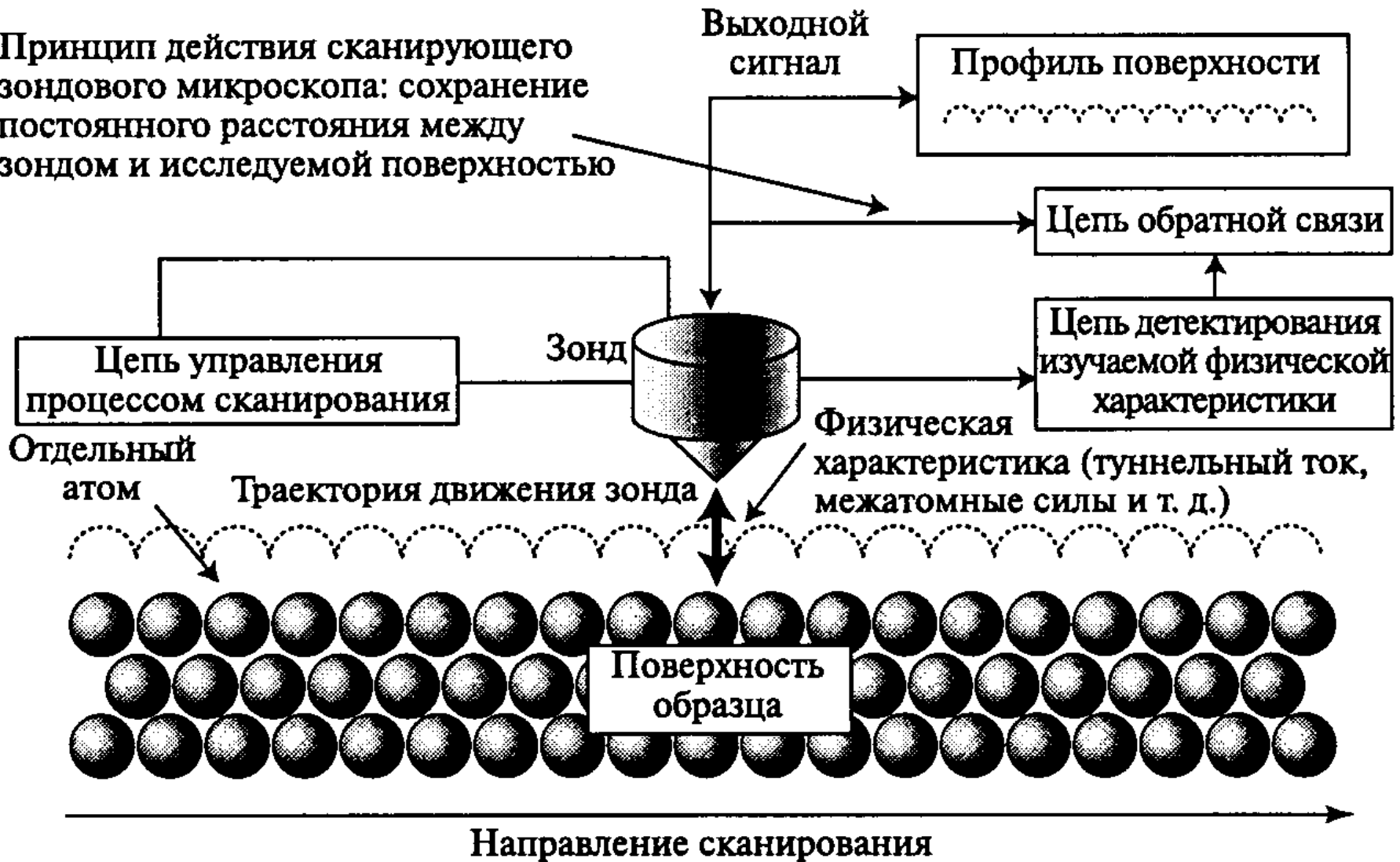
Углеродная нанотрубка

(затемнение во внутренней части обусловлено введением туда атомов щелочного металла)

Дополнительные данные по технике СЭМ можно получить на домашней странице по этому адресу [http://www.jst.go.jp/erato/project/ypdb\\_P/sym-09.html](http://www.jst.go.jp/erato/project/ypdb_P/sym-09.html)

# Сканирующие зондовые микроскопы

Принцип действия сканирующего зондового микроскопа: сохранение постоянного расстояния между зондом и исследуемой поверхностью

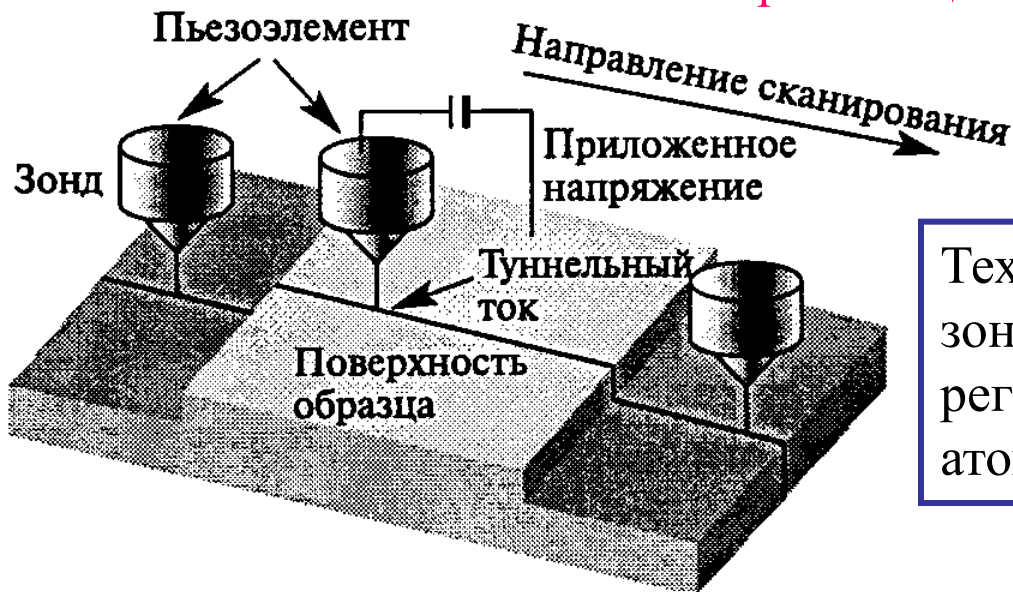




# Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ)

Разрешающая способность – несколько ангстрем.

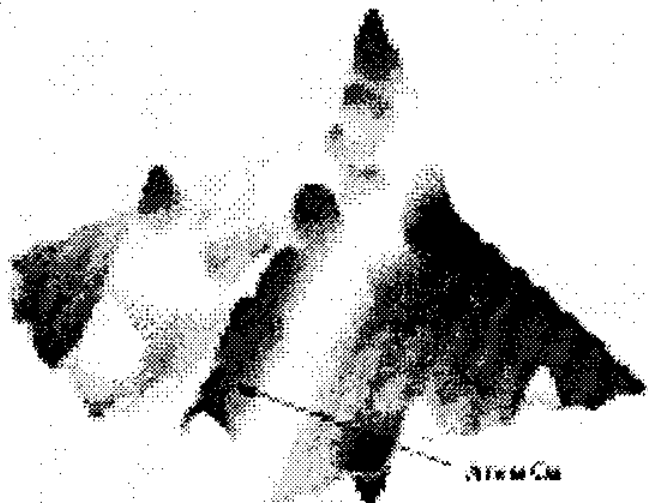
Позволяет наблюдать положение отдельных атомов.



Технические проблемы: Движение зонда вдоль поверхности должно регистрироваться и контролироваться с атомарной точностью.

Колебания пьезоэлемента соответствуют величине туннельного тока

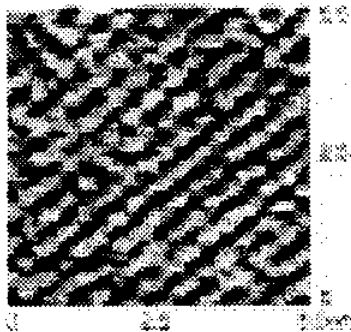
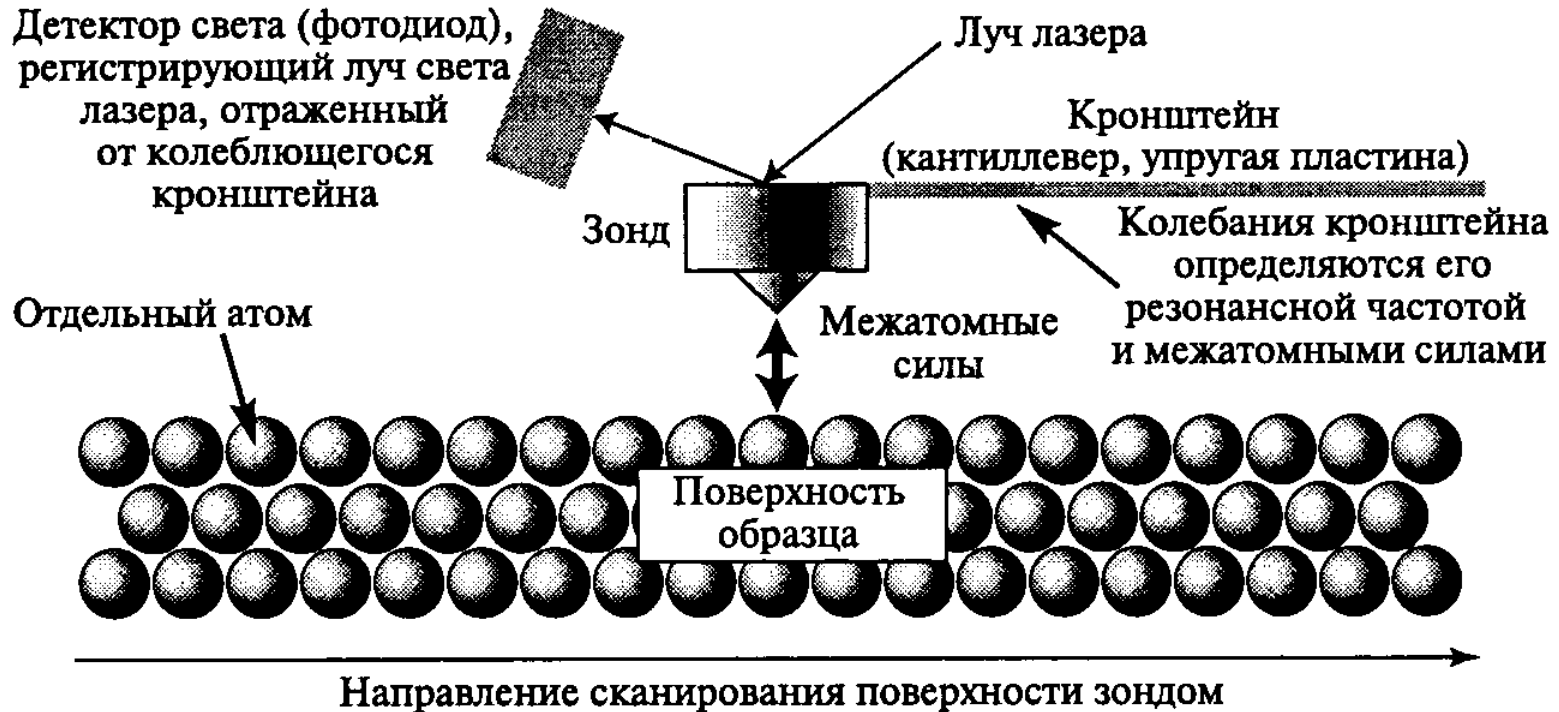
Образец получаемых изображений поверхности кремния, на которую нанесен один «ряд» атомов галлия



Главный недостаток: может применяться только для изучения поверхности электропроводящих материалов.

# Атомно-силовой микроскоп (АСМ)

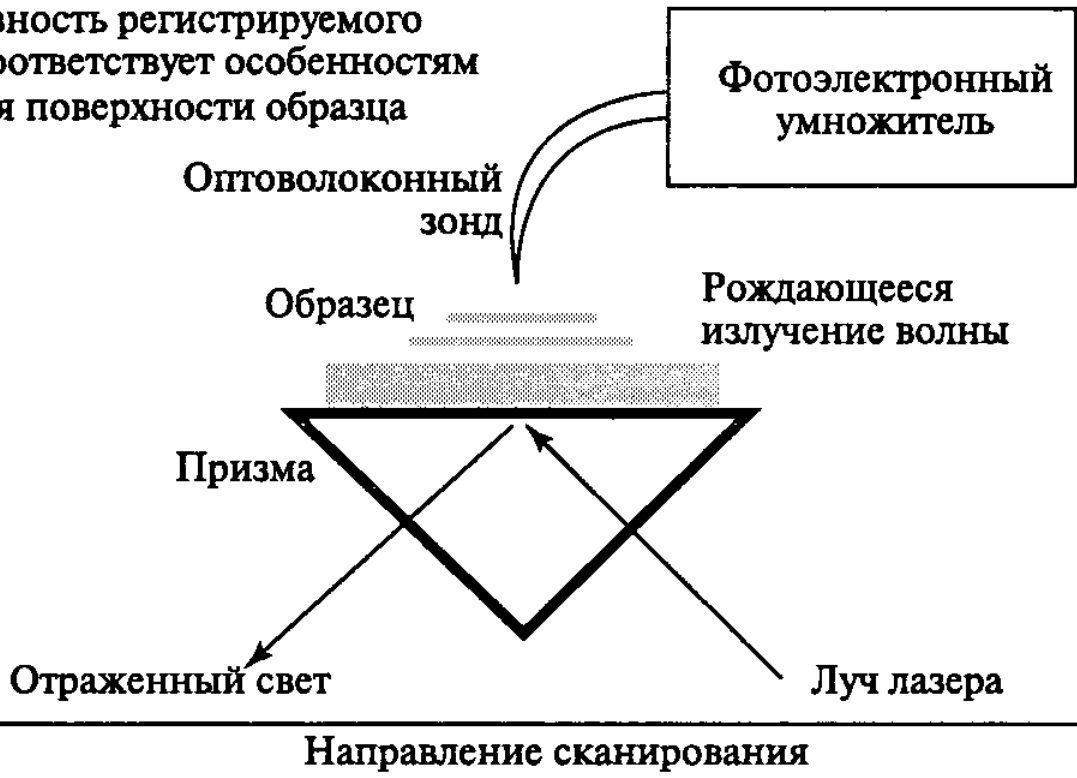
Разрешающая способность – несколько ангстрем.  
Позволяет наблюдать положение отдельных атомов.



Микрофотография взята из работы М. Koinuma, К. Uosaki, Surf. Sci., 311, L737 (1994), с разрешения лаборатории физического факультета Университета Хоккайдо и издательства. Более подробная информация может быть получена на домашней странице в Интернете по адресу: <http://pchem.sci.hokudai.ac.jp/introduction/AFM/document.html>

# Сканирующий оптический микроскоп ближнего поля (СОМБП)

Интенсивность регистрируемого излучения соответствует особенностям профиля поверхности образца



Разрешающая способность – 1/40 от длины волны света.  
Зависит от заостренности оптоволоконна.  
Достигает 20 нм



На фотографиях а и в «диаметр» 1 бита формируемой информации составляет около 100 или 60 нм соответственно

Дополнительная информация по методам оптической записи описываемого типа и т. п. размещена на домашней странице в Интернете по адресу:  
<http://www.oitda.or.jp/hw9852-j.html>

# Специфика экспериментов с нанобъектами; существующие проблемы

При экспериментах с нанобъектами предварительная подготовка нанобъекта, а также воздействие измерительного оборудования в процессе эксперимента зачастую оказывает существенное влияние на исследуемый объект.

В результате подготовительного этапа и влияния оборудования:

1. Нанобъект может разрушиться;
2. Свойства нанобъекта могут измениться.

При экспериментах с нанобъектами не всегда понятно, измеряются ли характеристики самого нанобъекта, или же характеристики некоторой системы, в которой нанобъект является составной частью.

Результатами измерений могут стать:

1. Характеристики системы нанобъект – подложка;
2. Характеристики системы нанобъект – измерительное оборудование.

Эти факты зачастую игнорируются, что приводит к неточной или даже неверной интерпретации экспериментальных данных.

# Роль механики при решении задач экспериментального исследования нанобъектов

- Известно, что нанобъекты проявляют упругие свойства при больших деформациях.
- Актуальной является задача определения упругих характеристик нанобъектов.
- В макромеханике модули упругости обычно определяют по собственным частотам.
- Измерение собственных частот нанобъектов связано с проблемами, о которых говорилось выше.

*Задачи, лежащие на стыке механики и экспериментальной физики.*

**Первая задача:** Определение упругих характеристик нанобъектов по частотам системы нанобъект – подложка – оборудование.

**Вторая задача:** Разработка условий эксперимента, при котором из спектра системы нанобъект – подложка – оборудование можно выделить собственные частоты нанобъекта.

# Предлагаемые подходы к решению задач экспериментального определения механических свойств нанобъектов

В.А. Еремеев, Е.А. Иванова, Д.А. Индейцев,  
Н.Ф. Морозов, А.Н. Соловьев, С.Е. Строчков

*Санкт-Петербург, Ростов-на-Дону*

# Measurement of eigenfrequencies by means of Atomic Force Microscope

A. Ankudinov, A. Titkov (*A.F. Ioffe Physico-Technical Institute*)

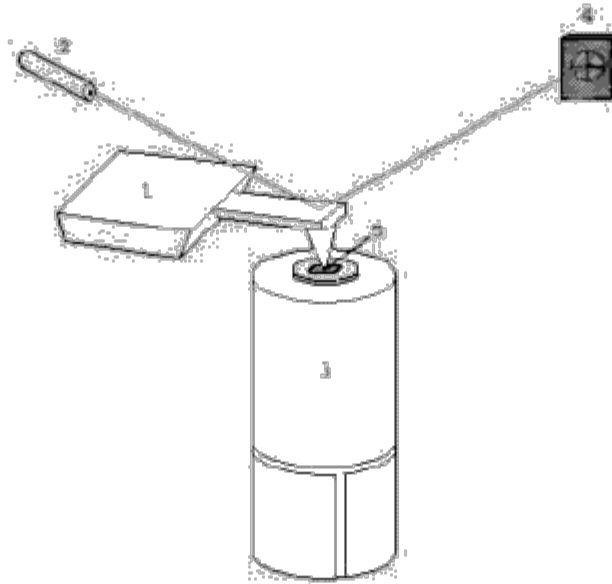
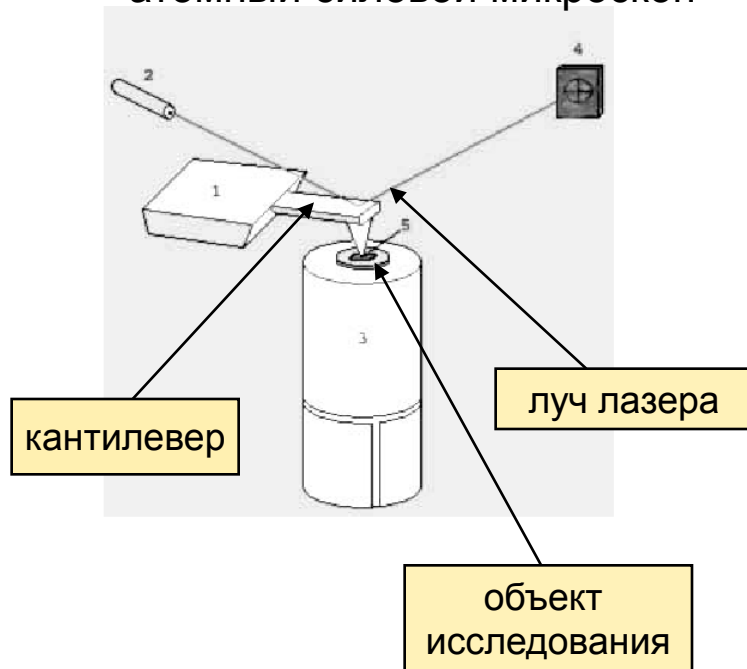


Figure 10: Atomic Force Microscope.

# Методика экспериментального определения механических характеристик нанобъектов

Е.А. Иванова, Д.А. Индейцев, Н.Ф. Морозов

Измерительный прибор:  
атомный силовой микроскоп



## Метод:

Механические характеристики нанобъекта определяются по собственным частотам.

## Основная проблема:

Измеряются частоты не объекта исследования, а системы нанобъект – кантилевер.

## Задача механики:

Разработка метода расчета характеристик нанобъектов в условиях, когда известны частоты системы нанобъект – кантилевер и механические параметры кантилевера.

## Новизна:

Впервые предложена методика экспериментального исследования нанобъектов, обладающих собственной динамикой.



**Механическая модель:** Кантилевер (слева) и наноробъект (справа).  
Взаимодействие моделируется линейной упругой пружиной.

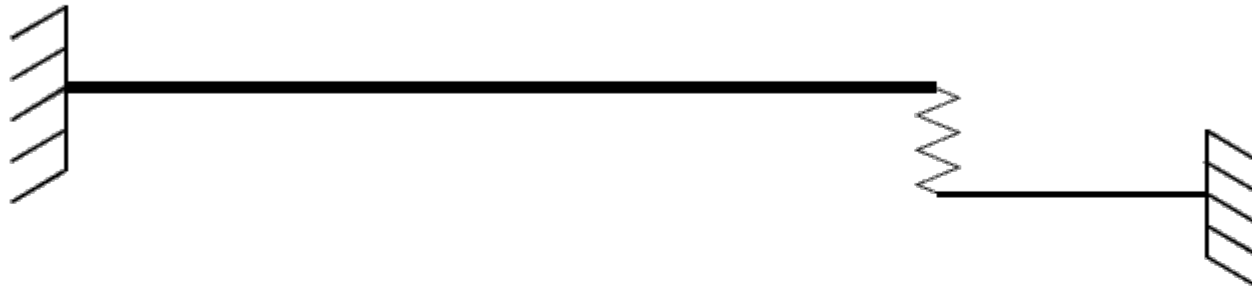


Figure 11: Cantilever (left) and nano-rod (right).

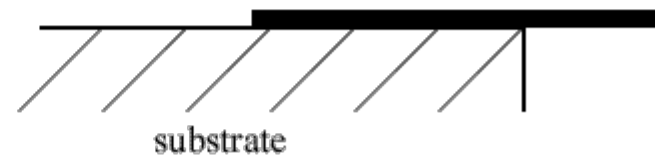
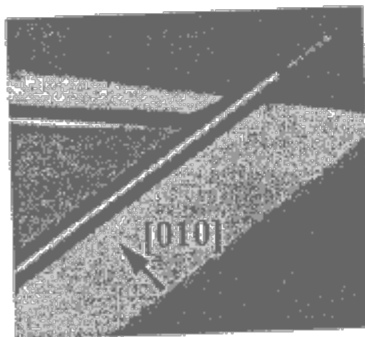


Figure 12: Experiments by V. Prinz (Novosibirsk).

# Свободные колебания системы

Cantilever:

$$D_1 u^{IV} + \rho_1 \ddot{u} = 0, \quad u(0) = 0, \quad u'(0) = 0, \quad u''(L_1) = 0.$$

Nano-rod:

$$D_1 v^{IV} + \rho_1 \ddot{v} = 0, \quad v(0) = 0, \quad v'(0) = 0, \quad v''(L_2) = 0.$$

Interaction of cantilever and nano-rod:

$$D_1 u'''(L_1) = C(u(L_1) - v(L_2)), \quad D_2 v'''(L_2) = -C(u(L_1) - v(L_2)).$$

Let us note  $\lambda^2 = \sqrt{\frac{\rho_1}{D_1}}\omega$ ,  $\mu^2 = \sqrt{\frac{\rho_2}{D_2}}\omega$ . Frequency equation:

$$\begin{aligned} & \left[1 + \cos(\lambda L_1) \operatorname{ch}(\lambda L_1)\right] \left(1 + \cos(\mu L_2) \operatorname{ch}(\mu L_2) + \right. \\ & \left. + \frac{C}{D_2 \mu^3} [\sin(\mu L_2) \operatorname{ch}(\mu L_2) - \cos(\mu L_2) \operatorname{sh}(\mu L_2)]\right) + \\ & + \frac{C}{D_1 \lambda^3} [\sin(\lambda L_1) \operatorname{ch}(\lambda L_1) - \cos(\lambda L_1) \operatorname{sh}(\lambda L_1)] (1 + \cos(\mu L_2) \operatorname{ch}(\mu L_2)) = 0. \end{aligned}$$

## Вынужденные колебания системы

$$u(0) = A \sin(\Omega t), \quad A = \text{const.}$$

Solution has following form:

$$u = \left[ P_1 \cos(\lambda_* x_1) + P_2 \sin(\lambda_* x_1) + P_3 \text{ch}(\lambda_* x_1) + P_4 \text{sh}(\lambda_* x_1) \right] \sin(\Omega t),$$
$$v = \left[ Q_1 \cos(\mu_* x_2) + Q_2 \sin(\mu_* x_2) + Q_3 \text{ch}(\mu_* x_2) + Q_4 \text{sh}(\mu_* x_2) \right] \sin(\Omega t),$$

where

$$\lambda_*^2 = \sqrt{\frac{\rho_1}{D_1}} \Omega, \quad \mu_*^2 = \sqrt{\frac{\rho_2}{D_2}} \Omega.$$

## Антирезонанс

$$u(L_1, t) = 0.$$

Equation for determination  $\Omega$ :

$$1 + \cos(\mu_* L_2) \operatorname{ch}(\mu_* L_2) + \frac{C}{D_2 \mu_*^3} [\sin(\mu_* L_2) \operatorname{ch}(\mu_* L_2) - \cos(\mu_* L_2) \operatorname{sh}(\mu_* L_2)] = 0.$$

Following estimation takes place:  $\frac{C}{D_1 \lambda^3} \ll \frac{C}{D_2 \mu^3}$ .

Hence,  $\Omega_n$  is very near eigenfrequencies of nano-rod.

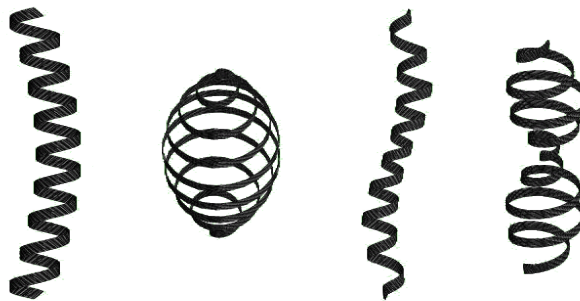
## Проблемы:

Частотный диапазон, доступный для измерения, ограничен и для его расширения в сторону максимальной частоты требуется уменьшение массы (размеров) кантилевера и (или) увеличение его жесткости.

Закрепление нанообъекта должно осуществляться так, чтобы подложка, на которой он расположен, не влияла бы на собственные частоты нанообъекта. Иными словами, собственные частоты подложки должны быть существенно выше собственных частот нанообъекта.

## Возможное решение проблемы:

Использовать в качестве объекта исследования наноразмерные цилиндрические спиральные оболочки.



# Об одном подходе к экспериментальному определению изгибной жесткости наноболочек

Е.А. Иванова, Н.Ф. Морозов

Cylindrical spiral shell (bending deformations only)

Experiments by V. Prinz (Novosibirsk)

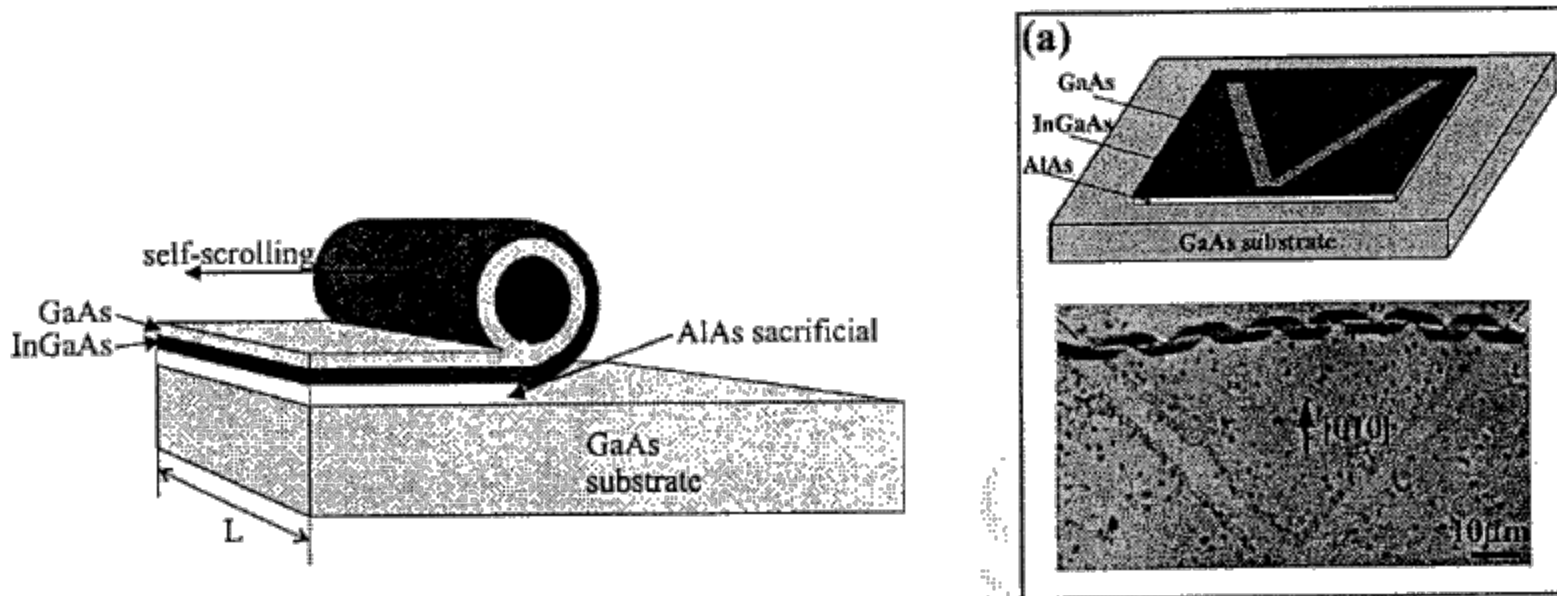


Figure 6: Cylindrical shell and cylindrical spiral shell.

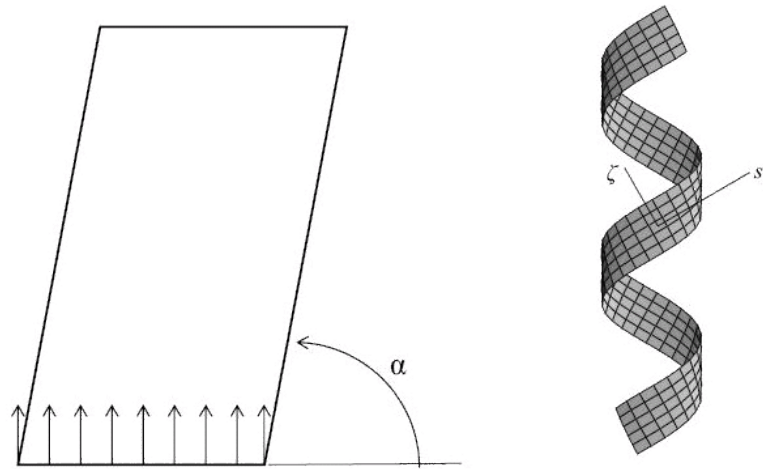


Figure 7: Cylindrical spiral shell.

## Geometry of cylindrical spiral shell.

Spiral coordinates  $s$ ,  $\zeta$  and cylindrical coordinates  $z$ ,  $\varphi$ :

$$z = R(\sin \alpha s + \cos \alpha \zeta), \quad \varphi = \cos \alpha s - \sin \alpha \zeta. \quad (1)$$

Dimension of spiral shell:

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

Here  $R$  — radius of cylinder,  $\alpha$  — angle of inclination of spiral.

## Equations of classical shell theory.

$$\nabla \cdot \underline{\underline{T}} = \rho \ddot{\underline{u}}, \quad \nabla \cdot \underline{\underline{M}} + \underline{\underline{T}}_{\times} = 0. \quad (3)$$

$$\underline{\underline{\varphi}} = -\underline{n} \times (\nabla \underline{u}) \cdot \underline{n}, \quad \underline{\underline{T}} = \underline{\underline{T}} \cdot \underline{a} + N \underline{n}. \quad (4)$$

$$\underline{\underline{T}} \cdot \underline{a} + \frac{1}{2}(\underline{\underline{M}} \cdot \cdot \underline{b}) \underline{c} = {}^4 \underline{\underline{A}} \cdot \cdot \underline{\underline{\varepsilon}}, \quad \underline{\underline{M}}^T = {}^4 \underline{\underline{C}} \cdot \cdot \underline{\underline{\kappa}}. \quad (5)$$

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{2} \left( (\nabla \underline{u}) \cdot \underline{a} + \underline{a} \cdot (\nabla \underline{u})^T \right), \quad \underline{\underline{\kappa}} = (\nabla \underline{\varphi}) \cdot \underline{a} + \frac{1}{2} \left( (\nabla \underline{u}) \cdot \cdot \underline{c} \right) \underline{b}. \quad (6)$$

Here  $\underline{\underline{T}}$ ,  $\underline{\underline{M}}$  — force tensor and moment tensor,  $\rho$  — surface mass density,  $\underline{u}$ ,  $\underline{\varphi}$  — displacement vector and turn vector,  $\underline{\underline{\varepsilon}}$ ,  $\underline{\underline{\kappa}}$  — strain tensors,  ${}^4 \underline{\underline{A}}$ ,  ${}^4 \underline{\underline{C}}$  — stiffness tensors,  $\underline{a}$  — unit tensor in tangential plane,  $\underline{n}$  — normal unit vector,  $\underline{b} = -\nabla \underline{n}$ ,  $\underline{c} = -\underline{a} \times \underline{n}$ .



## Approximate equations of motion of thin shell.

Let us suppose, that

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = 0. \quad (7)$$

Equation of motion:

$$\left( \sin^2 \alpha \frac{\partial^4}{\partial s^4} + \cos^2 \alpha \frac{\partial^4}{\partial \zeta^4} - \frac{1}{4} \frac{\partial^4}{\partial s^2 \partial \zeta^2} \right) \left[ \frac{D}{\rho R^4} (\tilde{\Delta} + 1)^2 w + \ddot{w} \right] - \frac{\sin^2 2\alpha}{4} \tilde{\Delta} \ddot{w} = 0. \quad (8)$$

Equation of indissolubleness:

$$\sin 2\alpha \frac{\partial^2 w}{\partial s \partial \zeta} + \sin^2 \alpha \frac{\partial^2 w}{\partial s^2} + \cos^2 \alpha \frac{\partial^2 w}{\partial \zeta^2} = 0. \quad (9)$$

Here  $w$  — displacement along vector  $\underline{n}$ ,  $D$  — bending stiffness.

Solution of motion equation, satisfying indissolubleness equation:

$$w(s, \zeta, t) = W(s, \zeta) e^{i\omega t}. \quad (10)$$

$$\begin{aligned}
W = \sum_{j=1}^3 & [(A_j^s(p_j s + q_j \zeta) + B_j^s) \sin[\lambda_j(\cos \alpha s - \sin \alpha \zeta)] + \\
& + (A_j^c(p_j s + q_j \zeta) + B_j^c) \cos[\lambda_j(\cos \alpha s - \sin \alpha \zeta)]], \\
p_j = \sin \alpha - \beta_j, \quad q_j = \cos \alpha + \beta_j, & \tag{11}
\end{aligned}$$

$$\beta_j = \frac{2 \cos 2\alpha \Omega^2}{9 \cos \alpha (\lambda_j^4 + (\Omega^2 - 1)\lambda_j^2 + 2\Omega^2)}.$$

$A_j^s, B_j^s, A_j^c, B_j^c$  — constants,  $\lambda_j$  — roots of characteristic equation

$$\lambda^6 - 2\lambda^4 + (1 - \Omega^2)\lambda^2 - \frac{4}{3}\Omega^2 = 0, \quad \Omega = \sqrt{\frac{\rho R^4}{D}} \omega. \tag{12}$$

Boundary conditions:

$$\begin{aligned} \underline{u} \left( \frac{l}{2R}, \frac{a}{2R}, t \right) &= 0, & \underline{u} \left( -\frac{l}{2R}, \frac{a}{2R}, t \right) &= 0, \\ \underline{u} \left( \frac{l}{2R}, -\frac{a}{2R}, t \right) &= 0, & \underline{u} \left( -\frac{l}{2R}, -\frac{a}{2R}, t \right) &= 0. \end{aligned} \quad (13)$$

## Discussion of results.

Eigenfrequencies are depend on three parameters:

$$\Omega_n = \Omega_n \left( \alpha, \frac{l}{R}, \frac{a}{R} \right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (14)$$

Let us consider two shells, having different physical and geometrical characteristics, but identical parameters  $\alpha$ ,  $l/R$ ,  $a/R$ . Then

$$\forall n : \quad \Omega_n^{(1)} = \Omega_n^{(2)} \quad \Rightarrow \quad \frac{\omega_n^{(1)}}{\omega_n^{(2)}} = \sqrt{\frac{D_1 \rho_2 R_2^4}{D_2 \rho_1 R_1^4}}. \quad (15)$$

# Method of experimental determination of bending stiffness of nano-objects

## Idea of experiment.

- Let us consider two similar objects:  
one of them is nano-size object; another is macro-size object.
- Let us find eigenfrequencies of considered objects  $\omega_n^{(1)}$  and  $\omega_n^{(2)}$  by the experimental method.
- We can select geometrical parameters of considered objects and boundary conditions so that  $\frac{\omega_n^{(1)}}{\omega_n^{(2)}} = f(D_1, D_2) = \text{const.}$
- If we know  $\omega_n^{(1)}$ ,  $\omega_n^{(2)}$  and bending stiffness of macro-object  $D_2$ , we can calculate bending stiffness of nano-object  $D_1$ .

# Acoustical and optical methods of measuring of eigenfrequencies of micro-objects

I. Sokolov (*A.F. Ioffe Physico-Technical Institute RAS, St.Petersburg*)

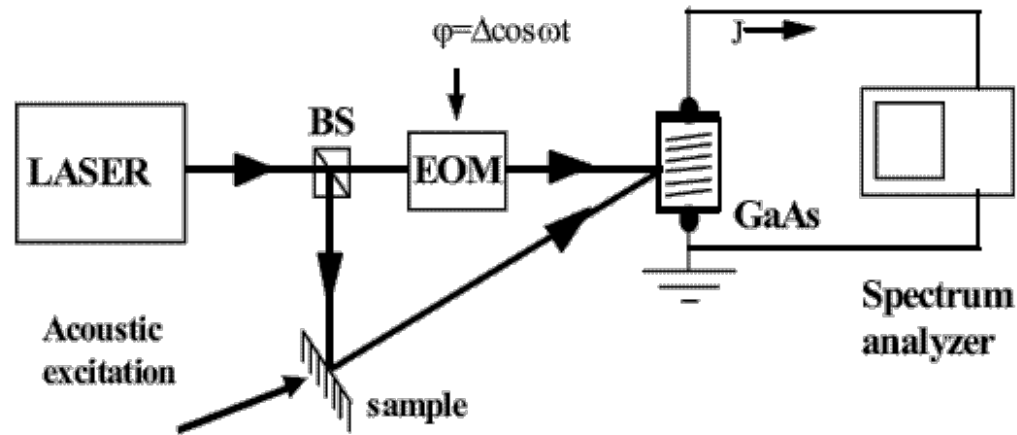


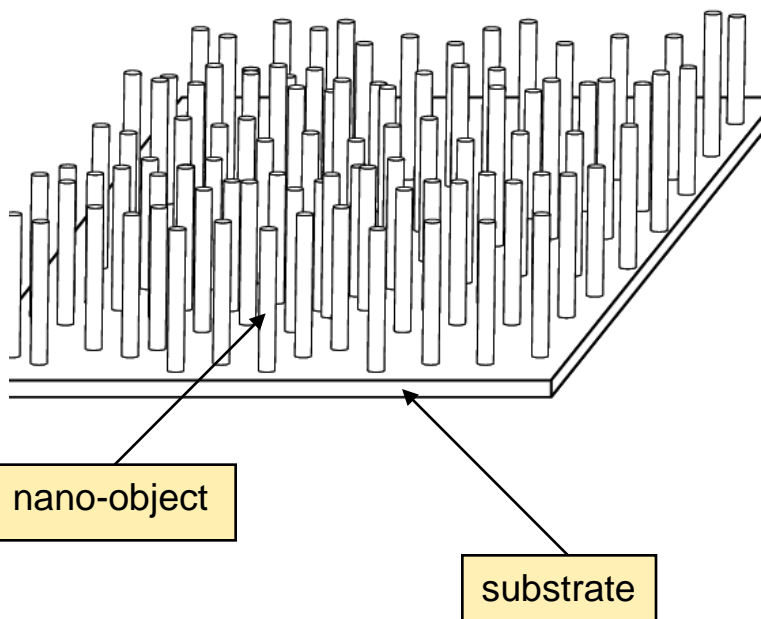
Figure 8: Experimental setup of the interferometer with adaptive photodetector.

- Limited frequency range.
- Laser ray is a spot of certain diameter (not a point).
- Laser ray is focused with some error.
- Frequencies of what object is measured?

# Method of determination of nano-objects characteristics by the eigenfrequencies of a system consisting of nano-objects and substrate

V.A. Eremeyev, E.A. Ivanova, N.F. Morozov, A.N. Solov'ev

Investigated object:  
regular structure of identical  
nano-objects on a micro-substrate



## Results of measurements:

Eigenfrequencies of system of nano-objects and micro-substrate are measured.

## Mechanics problem :

To determine mechanical characteristics of nano-objects in conditions when mechanical parameters of a micro-substrate and eigenfrequencies of system are known.

## Method:

1. Frequencies of a substrate with nano-objects are measured.
2. Frequencies of a substrate without nano-objects are measured.
3. By comparison of two these spectra, eigenfrequencies of nano-objects are separated from a frequency spectrum of a substrate with nano-objects.

## Mechanical model:



## Analytical result:

It has been proved, that eigenfrequencies of nano-objects can be separated from a frequency spectrum of a substrate with nano-objects.

## Equation of substrate vibrations:

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

$$g(\mu H) \neq 0$$

Eigenfrequencies of substrate.  
Nano-objects do not move!

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

## Eigenfrequencies of nano-object:

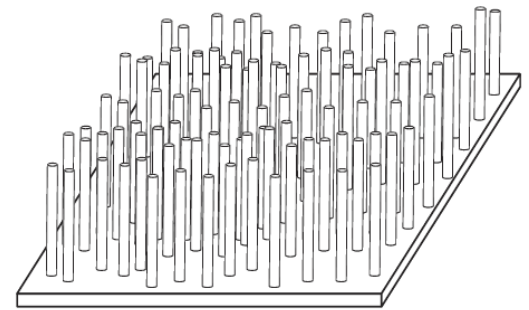
$$1 + \cos(\mu H)\text{ch}(\mu H) = 0, \quad \mu = \sqrt[4]{\frac{\rho_2}{D}} \sqrt{\omega}.$$

$$g(\mu H) = 0 \Rightarrow u = 0$$

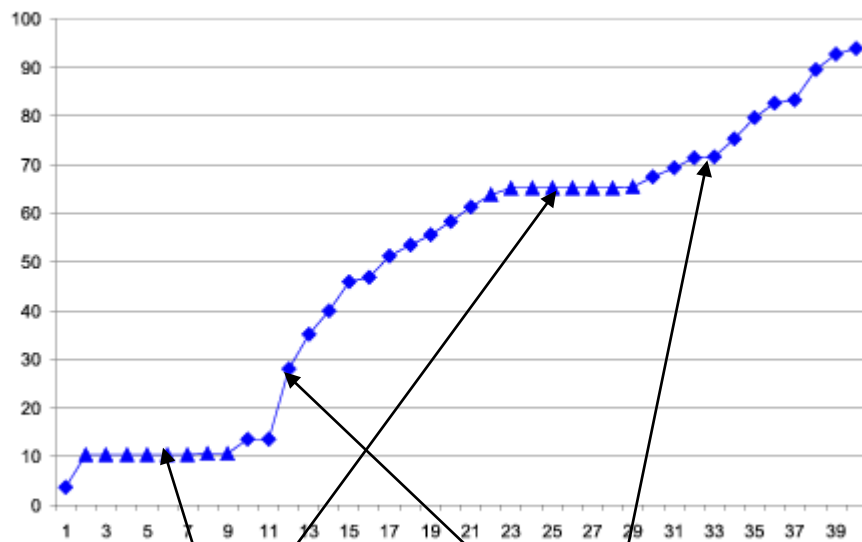
substrate does not move!

# Calculation of eigenfrequencies and eigenforms by numerical method.

## 3D statement of problem

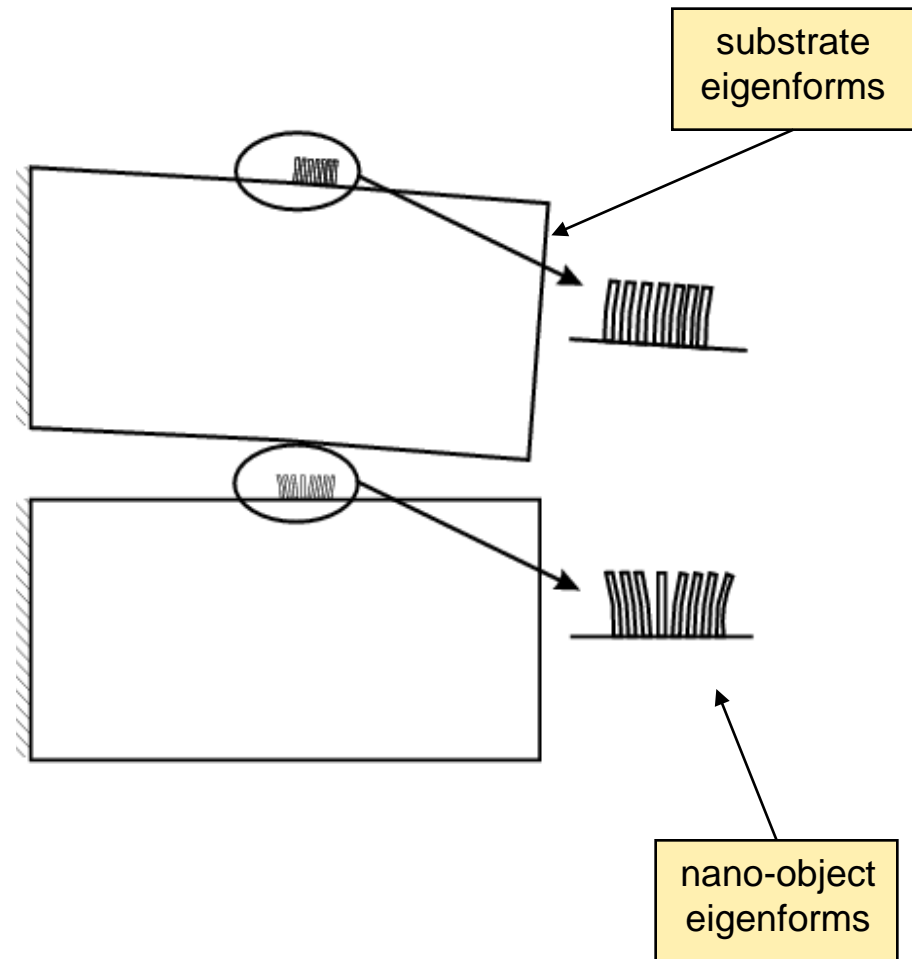


## Numerical results:



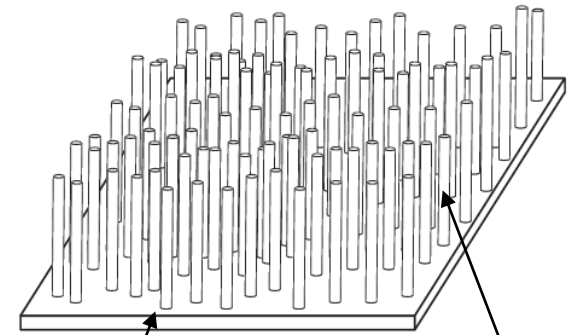
nano-object frequencies

substrate frequencies





# Calculation of eigenfrequencies. 3D statement of problem



Substrate with  
nano-objects (GHz)

Substrate (GHz)

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
0.350831	0.352308

Nano-object (GHz)

0.10797

Sapphire

ZnO

**Nano-crystals ZnO**

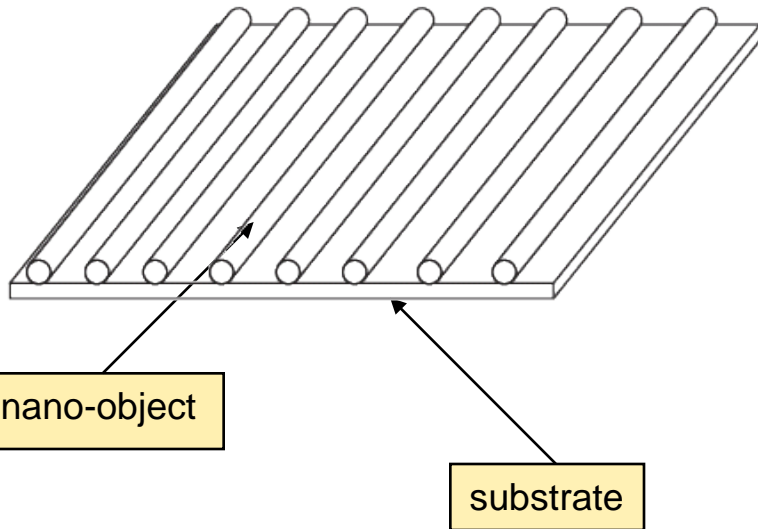
High: 1.5-3.0 mkm

Diameter: 30-100 nm

# Method of measurement of eigenfrequencies of nano-tubes by the experiments with system consisting of nano-tubes and substrate

V.A. Eremeyev, E.A. Ivanova, N.F. Morozov, S.E. Strochkov

Investigated object:  
regular structure of identical  
nano-objects on a micro-substrate



## Method of experimental determination of bending stiffness of nano-shells

1. To measure eigenfrequencies of nano-tube.
2. To calculate bending stiffness of nano-tube by using known values of eigenfrequencies.

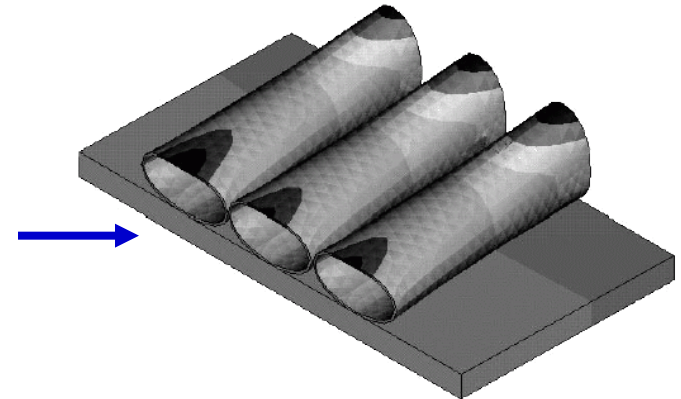
## Method of measurement and separation of nano-tubes eigenfrequencies:

1. Eigenfrequencies of system of nano-tubes and micro-substrate are measured.
2. Eigenfrequencies of a substrate without nano-tubes are measured.
3. By comparison of two these spectra, eigenfrequencies of nano-tubes are separated from a frequency spectrum of a substrate with nano-tubes.

## Analytical result:

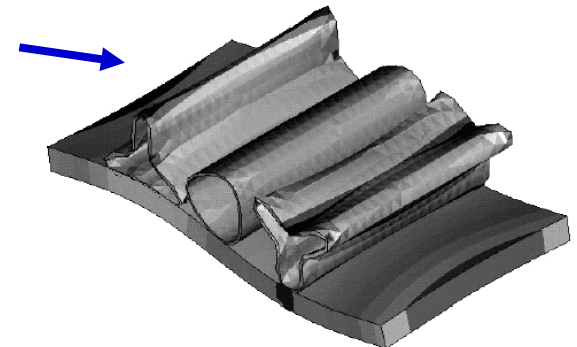
It has been proved, that eigenfrequencies of nano-tubes can be separated from a frequency spectrum of a substrate with nano-tubes.

1. In spectrum of the system there exist frequencies equal to eigenfrequencies of nano-tubes. At these frequencies substrate does not move.
2. If frequencies are not equal to eigenfrequencies of nano-tubes, then motion of the substrate with nano-tubes are described by the equation



$$W_x^{IV} - \frac{ND}{CLR^2} (G_3 W_x' + G_4 R W_x'') - \omega^2 \frac{\rho_*}{C} \left[ W - \frac{NR\rho}{L\rho_*} (G_1 W + G_2 R W_x') \right] = 0.$$

In this case the nano-tubes and substrate will move.



# Способы получения нанобъектов, их свойства и механические модели

- Способы получения углеродных и полупроводниковых нанобъектов
- Механические свойства нанобъектов; особенности их моделирования
- Учет масштабного фактора; дискретные модели
- Роль вращательных степеней свободы и моментных взаимодействий
- Учет микроструктуры; связь микро- и макропараметров
- Особенности компьютерного моделирования

# Способы получения углеродных и полупроводниковых нанобъектов

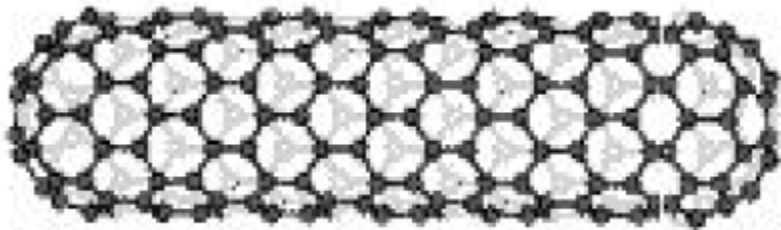
- Углеродные наноструктуры: нанотрубки и фуллерены. (Институт неорганической химии СО РАН. Новосибирск).
- Нано- и микрокристаллы из ZnO. (НИИ механики и прикладной математики РГУ. Ростов-на-Дону)
- Полупроводниковые наноструктуры. (Институт физики полупроводников СО РАН. Новосибирск)

# Углеродные наноструктуры: нанотрубки и фуллерены

Образуются путем самоорганизации. Создается пар из атомов углерода; затем атомы углерода осаждаются на графитовую подложку, образуя наноструктуры. Различают:

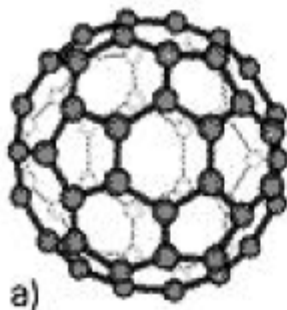
- высокотемпературные и низкотемпературные методы;
- с катализаторами и без катализаторов.

Сохраняют упругие свойства при больших деформациях.

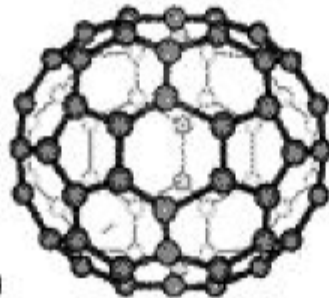


Нанотрубки бывают:

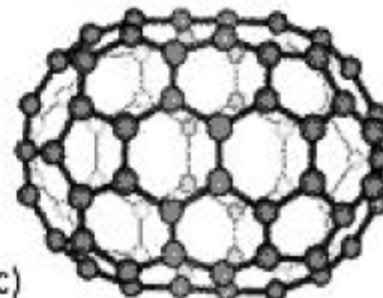
- закрытые и открытые;
- однослойные и многослойные;
- с различным углом хиральности;
- полупроводники и проводники.



a)



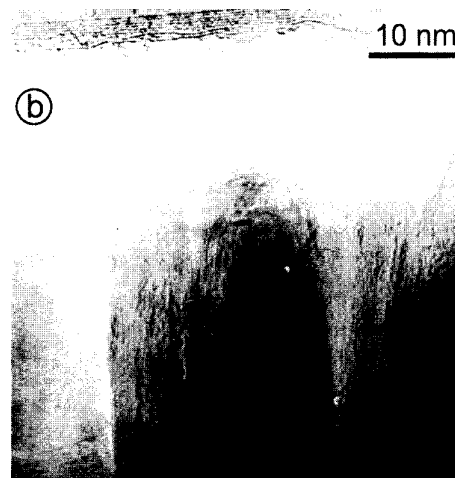
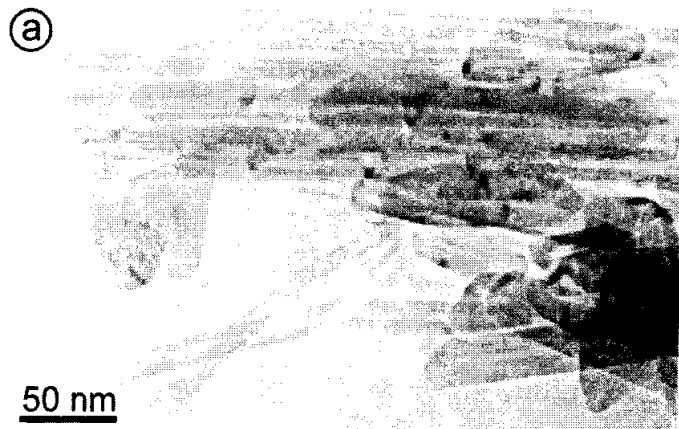
b)



c)

Представители фуллеренов: a) C60 b) C70 c) C80

Институт неорганической химии СО РАН (Новосибирск).  
А.В. Окотруб и др.

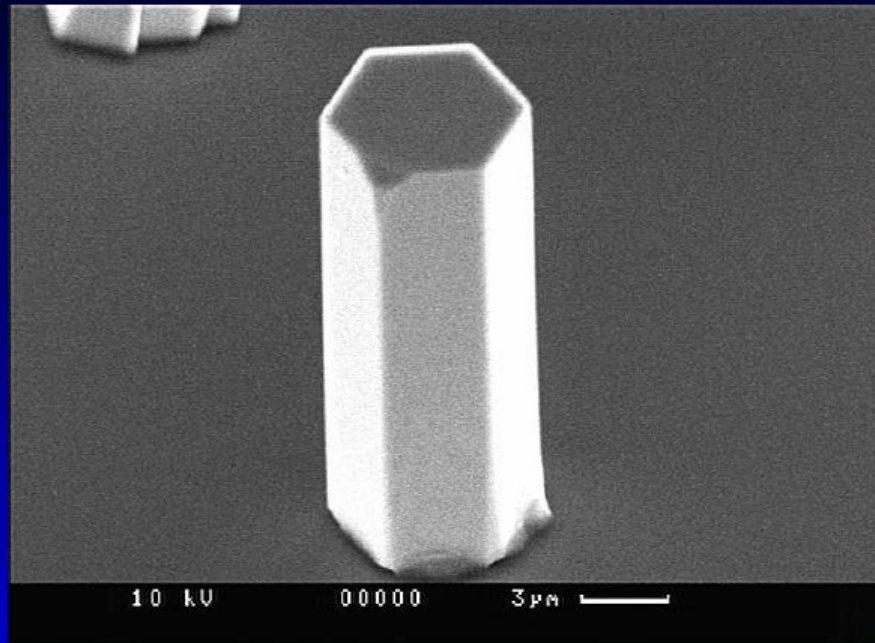




# Нано- и микрокристаллы из ZnO

Институт экспериментальной физики II (Лейпциг, Германия)  
НИИ механики и прикладной математики РГУ (Ростов-на-Дону)  
Е.М. Кайдашев

## Один нанокристалл



Высота нанокристаллов 1.5-3.0 мкм, диаметр – 30-100 нм,  
микрокристаллов – 20-100 мкм, диаметр 1.0-3.0 мкм.



# Решетка нанокристаллов из ZnO

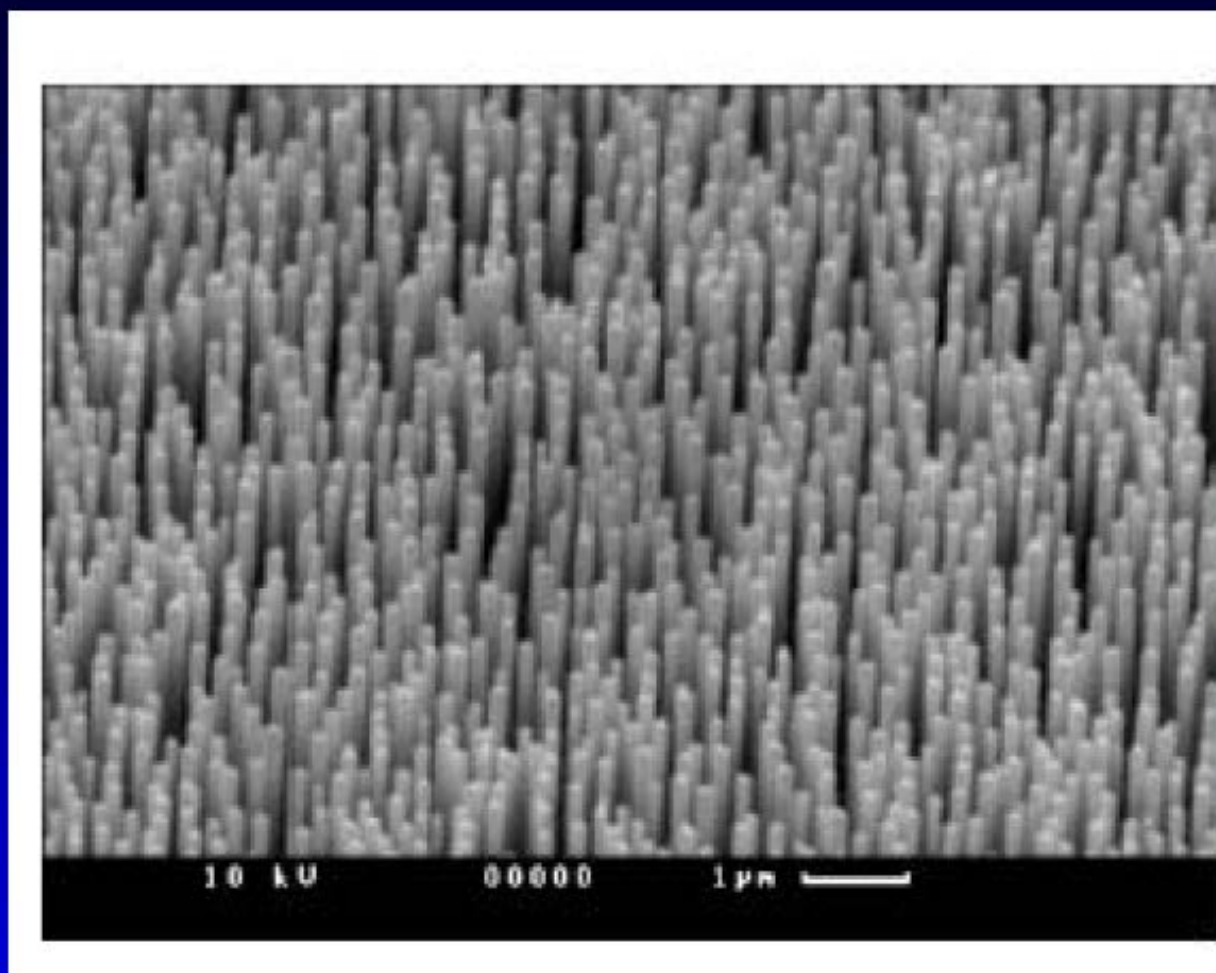


Рис. 1: Решетка нанокристаллов ZnO на (1120) сапфире, полученные методом импульсного лазерного напыления. Диаметр микрокристаллов 150-250 нм, длина – 1 мкм

# Решетка нанокристаллов из ZnO

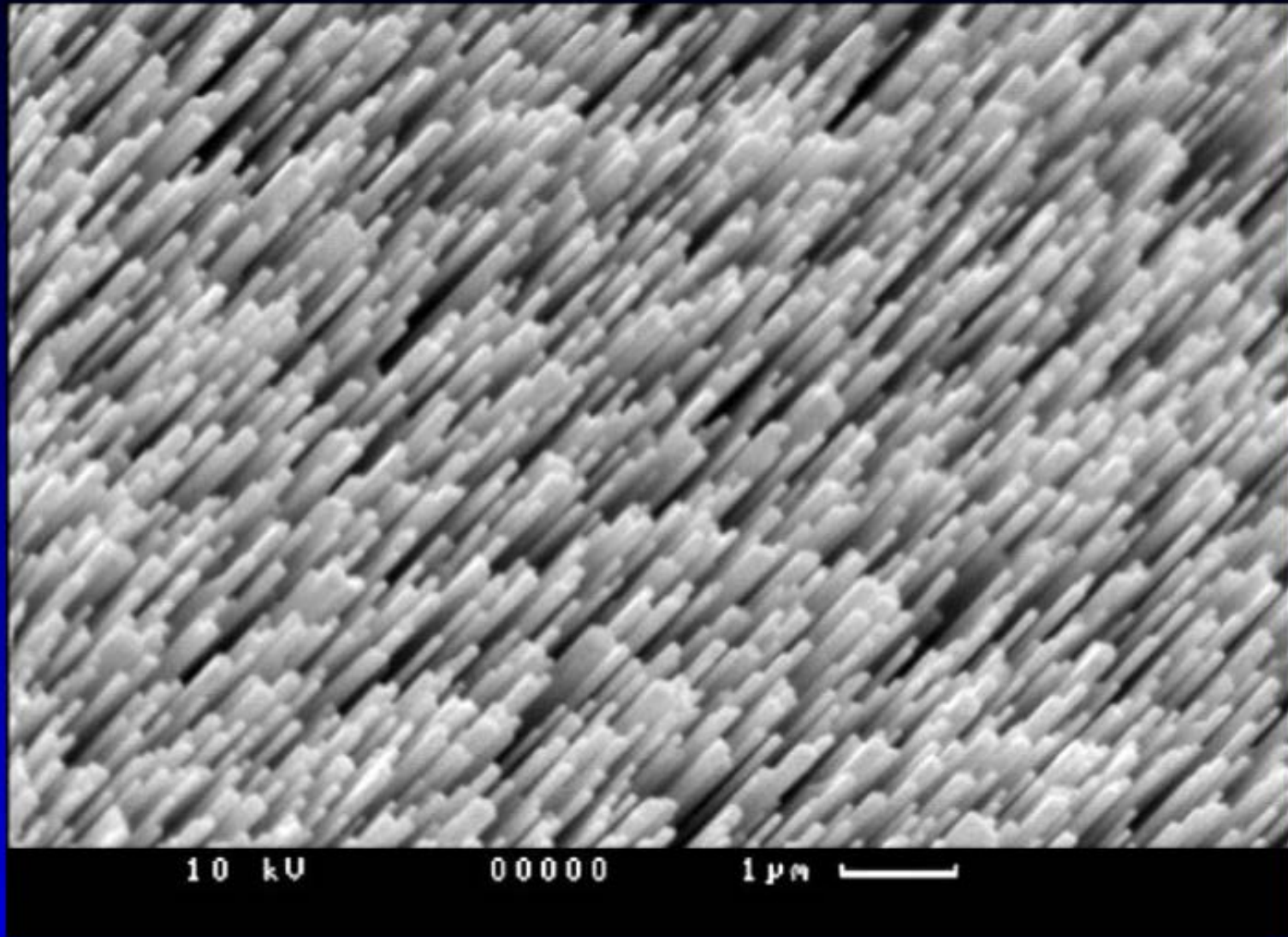
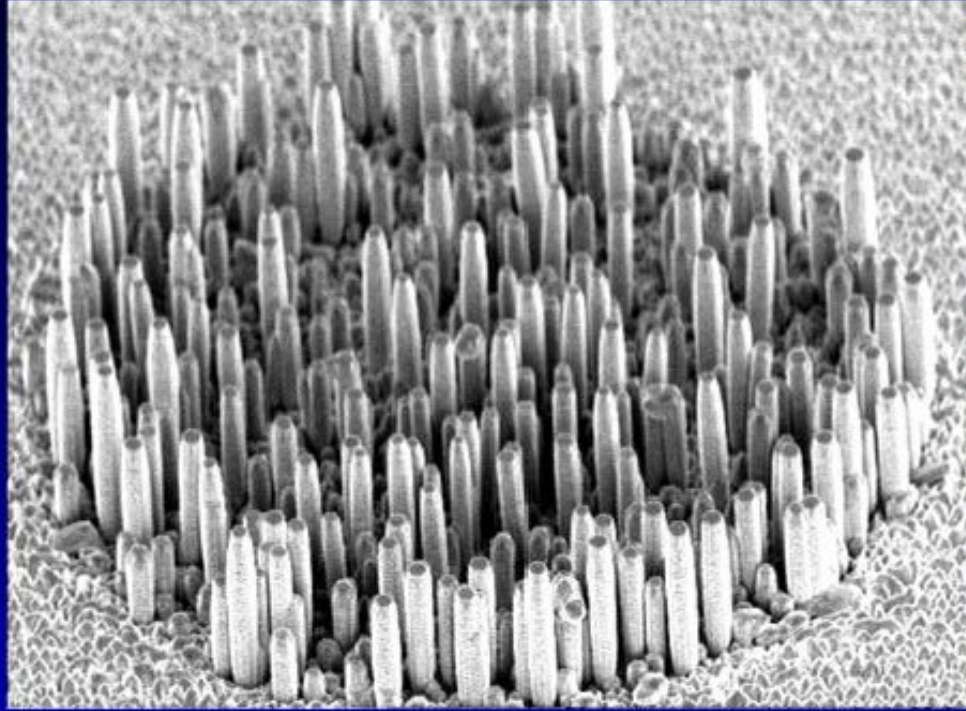


Рис. 2: Решетка нанокристаллов ZnO высокой плотности на подложке (1120) сапфира, полученным карботермическим методом

# Микрокристаллы



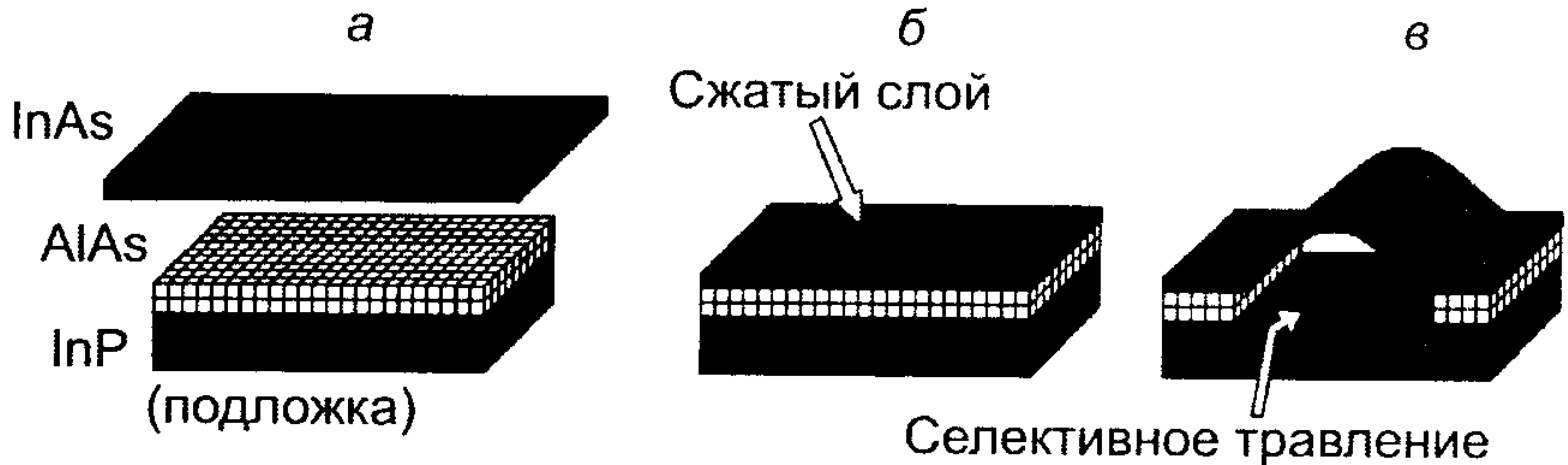
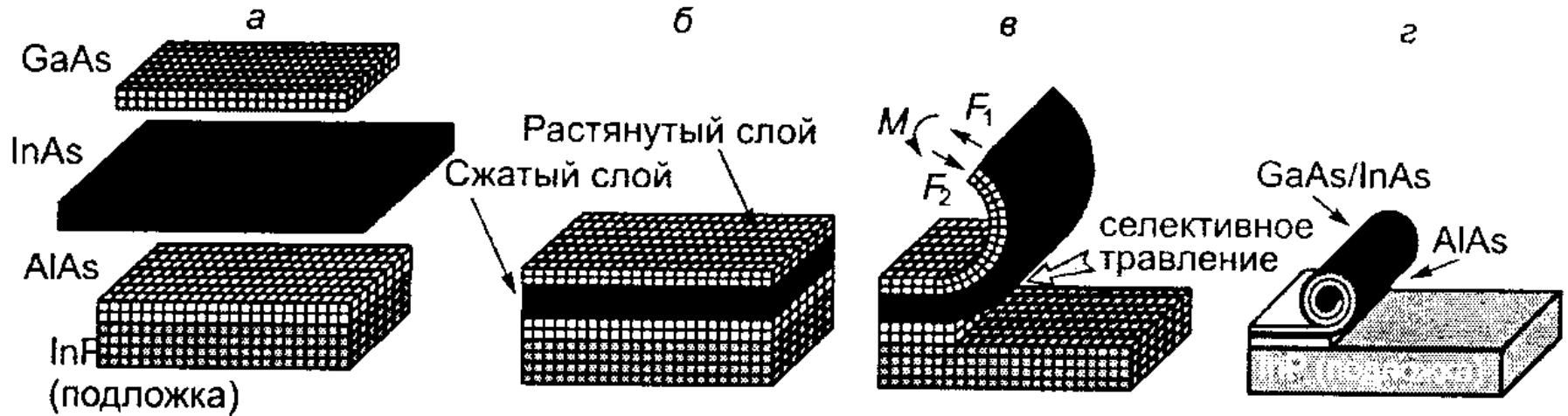
Решетки микрокристаллов ZnO на (1120) сапфире. Подложка покрыта слоем золота ( $h$  20-30 нм) через маску с отверстиями диаметром 100 мкм. Диаметр – 3 мкм, длина – 20 мкм



# Полупроводниковые наноструктуры

Институт физики полупроводников СО РАН (Новосибирск)

В.Я. Принц и др.



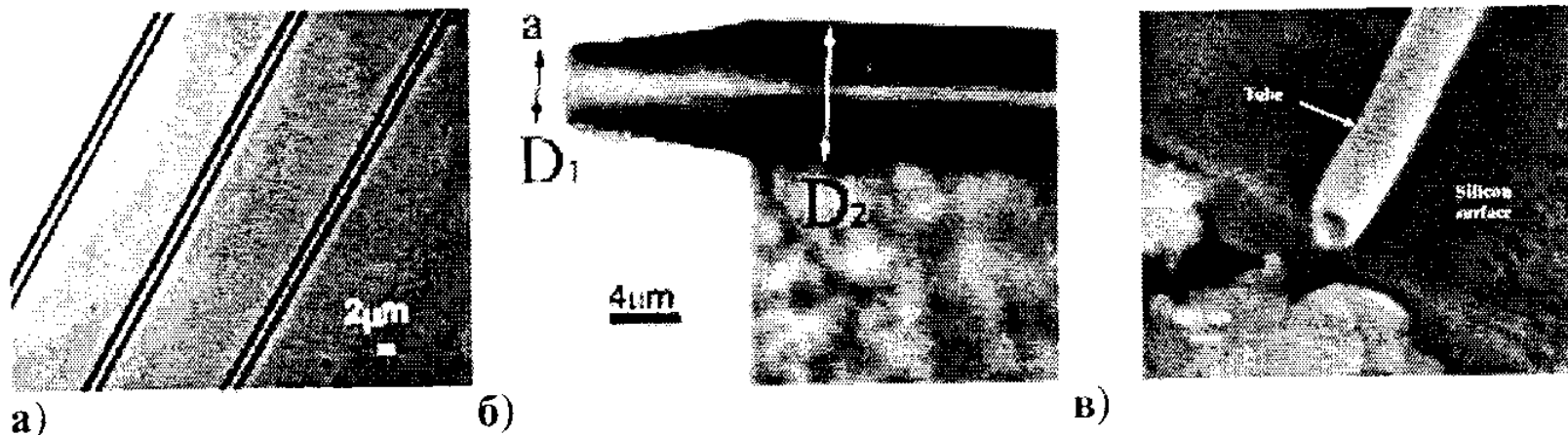


Рис. 1.2. Фотографии трубок, закрепленных на подложке: а) – массив GaAs/InGaAs трубок с диаметром 2 мкм и толщиной стенок 10 нм, ориентированных вдоль направления  $\langle 100 \rangle$ ; б) – фотография InGaAs/GaAs трубки, содержащей 40 витков.  $D_1$  и  $D_2$  – соответственно внутренний и наружный диаметры; в) изображение Au/Ti нанотрубки, сформированной на кремниевой подложке.

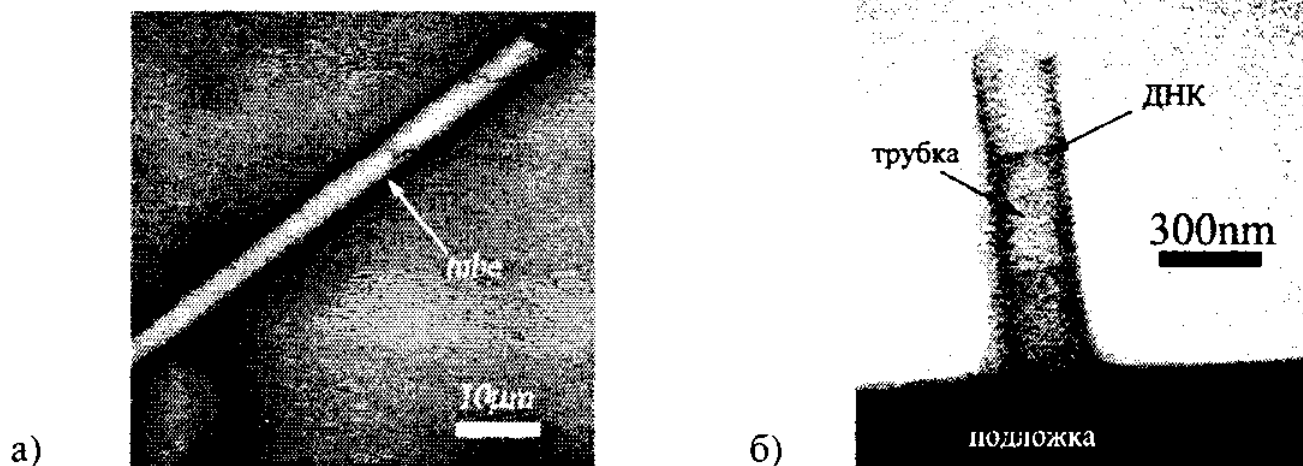


Рис. 5.1. Иглы – шприцы с атомно-резкими краями. а) трехвитковая трубка-игла с атомнорезким зазубренным краем. б) прозрачная для электронных лучей трубка, содержащая ДНК.

## Задачи механики

1. Диаметр трубки меньше  $3\text{ нм}$ , количество слоев меньше 6. Происходит сращивание слоев.
2. Трехвитковая трубка  $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ . Диаметр  $1\text{ мкм}$ , длина  $100\text{ мкм}$ , толщина  $10\text{ нм}$ . При нагрузке  $10\text{ г}$  на трубку, силами, перпендикулярными к оси трубки, максимальные упр. деф. (отношение горизонтального диаметра к его начальному значению) достигает  $35\%$ . Плотный массив трубок может выдержать нагрузку в несколько  $\text{т/кв.см}$ .
3. Трубки, сформированные из пленок толщиной  $5\text{ ML}$  и меньше, плохо описываются континуальной теорией упругости. Диаметр получается меньше, чем предсказывает теория.
4. Гофрировки с наноразмерным периодом. Рассогласование решеток  $7,2\%$ . Внутренние напряжения порядка  $1\text{ ГПа}$ .
5. Одна сторона полосы присоединена к подложке, три свободны. Рассогласование решеток – в направлении присоединенной стороны. Возникают гофрировки. Период зависит от ширины полосы.
6. Гофрировку отрезают, образуется спираль. В оставшейся полоске перестраивается период гофрировки.
7. Упругие свойства слоев  $2\text{ ML}$  и  $1\text{ ML}$ , связанных с подложкой описываются континуальной теорией упругости. Для свободных пленок это не так. Толщина должна быть больше  $4\text{ ML}$ .
8. Замена атома атомом большего размера. Напряжения сжатия, выпучивание. Одноатомные и одномолекулярные приборы. Квант. компьютер.

## Механические свойства нанобъектов

1. Хорошо известно, что при больших деформациях нанобъекты сохраняют упругие свойства.
2. Многими исследователями отмечалось, что значения модулей упругости, полученные из микро- и макро экспериментов существенно различаются.
3. Существуют в устойчивом состоянии однослойные нанобъекты (в частности, однослойные углеродные нанотрубки).

### Вопрос:

Можно ли использовать макроскопические континуальные теории (трехмерную теорию упругости, теорию оболочек и теорию стержней) для расчета напряженно-деформированного состояния нанобъектов?

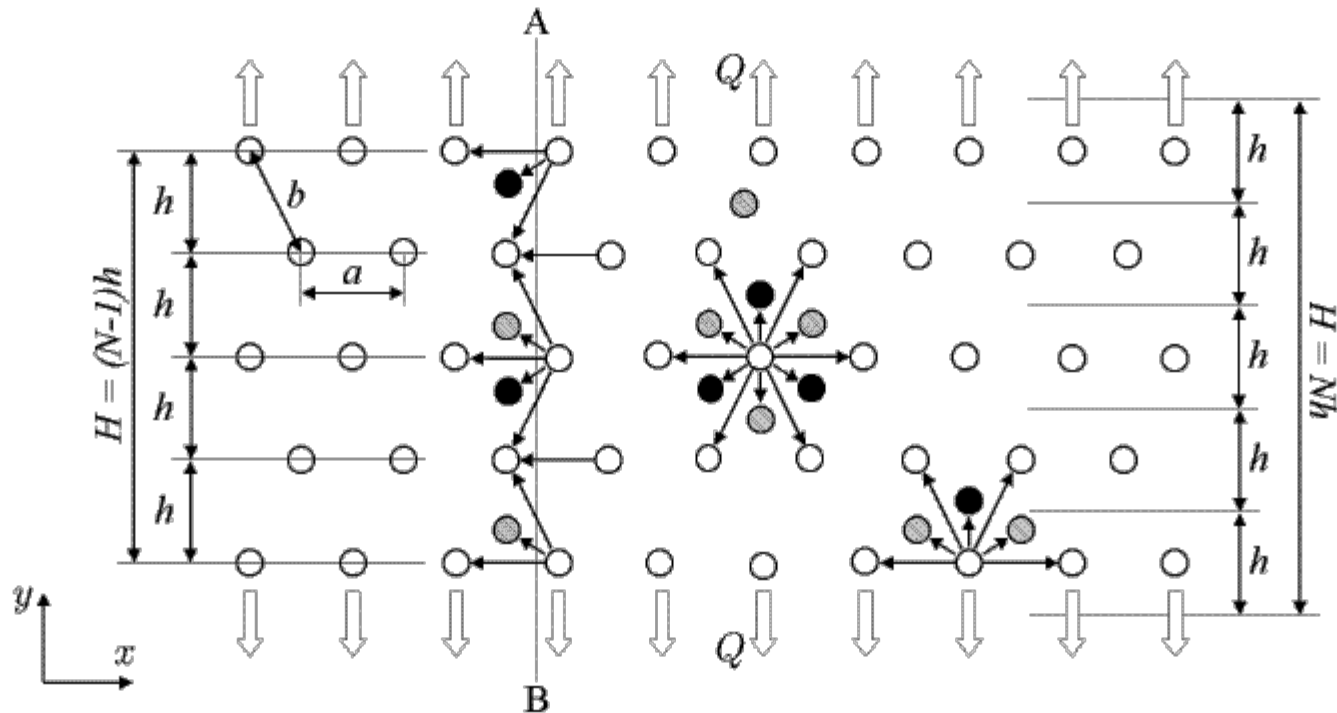
# Предлагаемые подходы к построению механических моделей нанобъектов

И.А. Беринский, А.П. Бызов, Е.А. Иванова, А.М. Кривцов, О.С. Лобода, Н.Ф. Морозов, А.Д. Фирсова

*Санкт-Петербург*



# Anomalism in mechanical properties of nanosize objects



Model of finite 2D (3D) crystal.

White circles represent 2D crystal or medium layer of 3D crystal.

Gray / black circles represent atoms from upper / lower layers (3D).

The calculated values for the moduli (2D)

$$\begin{aligned}\nu_1 &= \nu_\infty, & E_1 &= \frac{N}{N_*} E_\infty; \\ \nu_2 &= \frac{N-1}{N-\frac{1}{9}} \nu_\infty, & E_2 &= \frac{N}{N-\frac{1}{9}} E_\infty.\end{aligned}$$

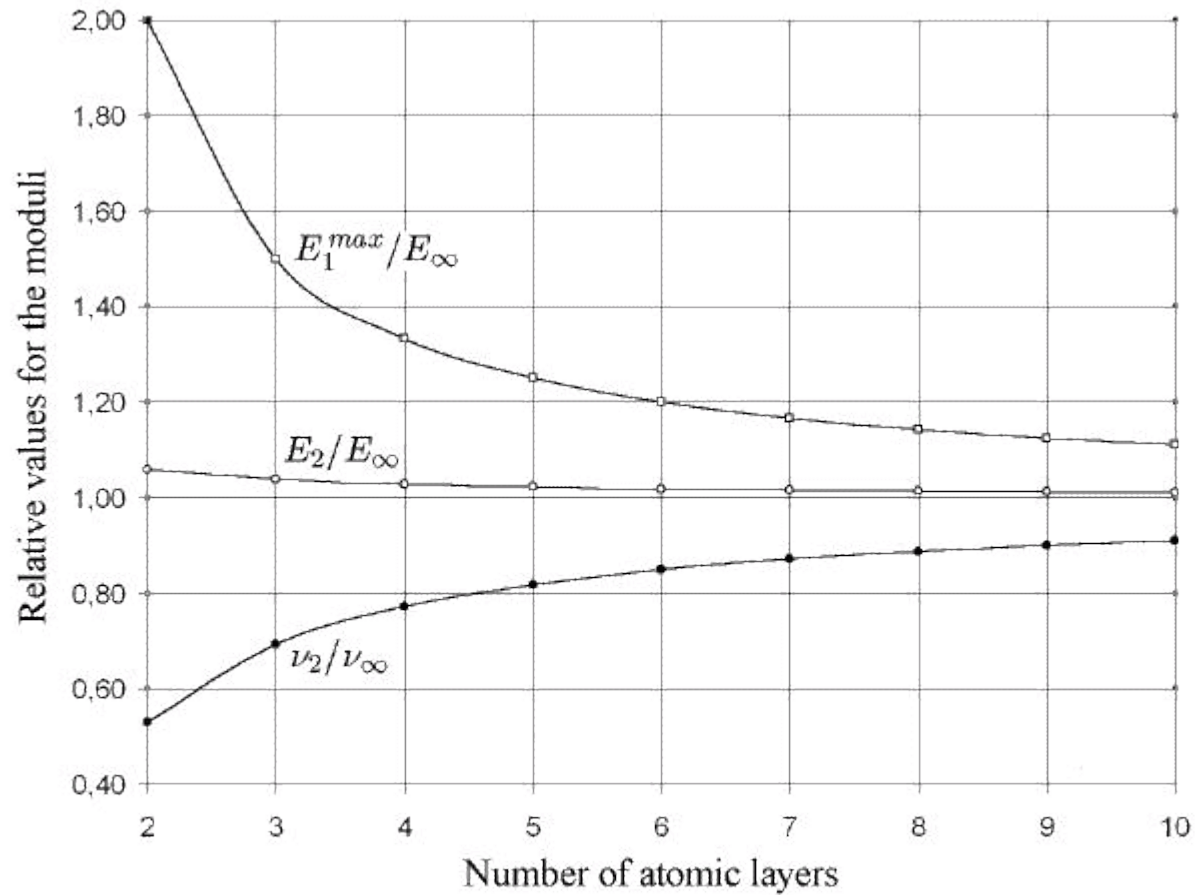
$\nu$  — Poisson coefficient,  $E$  — Young modulus;

$N$  — number of atomic layers in  $x$  (2D) and  $z$  (3D) directions;

$N_*$  — an ambiguous parameter ( $N-1 \leq N_* \leq N$ ).

Indexes 1 and 2 correspond to tension in  $x$  and  $y$  directions.

Index  $\infty$  corresponds to macroscopic case ( $N \rightarrow \infty$ ).



Dependence of the Young modulus and Poisson ratio on the number of atomic layers (2D).

Dimension	Parameter	Designation	Min value	Max value
2D	Young modulus	$E/E_\infty$	1.00	2.00
3D	Young modulus	$E/E_\infty$	0.87	3.83
2D	Poisson coefficient	$\nu/\nu_\infty$	0.53	1.00
3D	Poisson coefficient	$\nu/\nu_\infty$	0.57	1.12

Maximum deviations from macroscopic values, 2-layer nanocrystals.  
(3D calculations by O. S. Loboda.)

## Conclusions

- Deviation of mechanical properties from macroscopic values is proportional to  $1/N$ , where  $N$  is the number of atomic layers.
- The values of mechanical properties essentially depends on the definition of material volume, which is ambiguous at nanoscale.
- Nanoscale effects are more propaounced in 3D then in 2D.

E.A. Ivanova, A.M. Krivtsov, N.F. Morozov

## Bending stiffness of nanocrystals

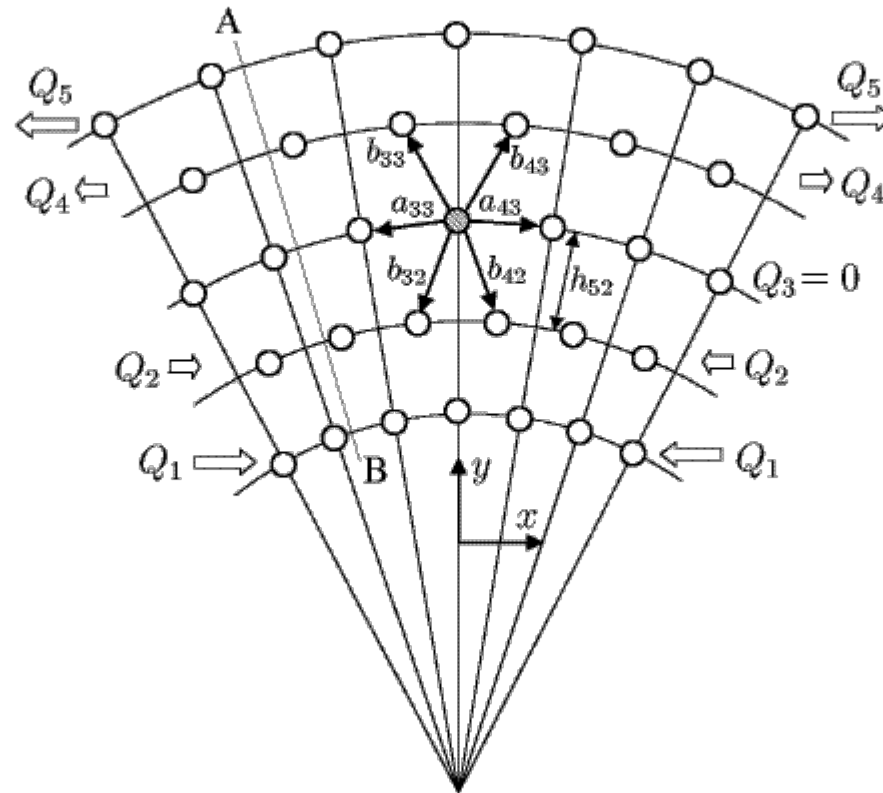


Figure 1: Bending of nanocrystal strip.

## Formulation of problem:

$N \geq 2$  layers in  $y$  direction,  $J \gg N$  layers in  $x$  direction.

From one layer to another forces  $Q_n$  vary linearly, so that

$$\sum_{n=1}^N Q_n = 0, \quad \sum_{n=1}^N R_n Q_n = M.$$

Interaction between atoms:

$$F(a_{jn}) = C \Delta a_{jn}, \quad F(b_{jn}) = C \Delta b_{jn}, \quad C \stackrel{\text{def}}{=} F'(a_0) > 0.$$

**Solution of equations of equilibrium for atoms of strip:**

$$\Delta b_{jn} = 0, \quad \Delta a_{jn} = \frac{Q_n}{C}.$$

Angle between heighboring atomic layers  $\alpha$  and curvature  $\varepsilon$ :

$$\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\Delta a_{jN}/2 - \Delta a_{j1}/2}{h_0(N-1)}, \quad \varepsilon \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\alpha}{a_0/2}.$$

Bending stiffness of monocrystal strip:

$$D \stackrel{\text{def}}{=} \frac{M}{\beta} = \frac{Ca_0^3}{16}(N-1)N(N+1).$$

Bending stiffness in terms of macroscopic parameters:

$$D = \frac{E_1 H^3 (N^2 - 1)}{12N_*^2}.$$

Let be  $N_* = N$ . Then  $E_1 = E_\infty$ . In this case:

$$D = D_\infty \left(1 - \frac{1}{N^2}\right), \quad D_\infty = \frac{E_\infty H^3}{12}, \quad H = Nh_0.$$

Here  $D_\infty$  is bending stiffness of strip, known from microscopic theory.

Dependence of parameter  $k = D/D_\infty$  from number of atomic layers:

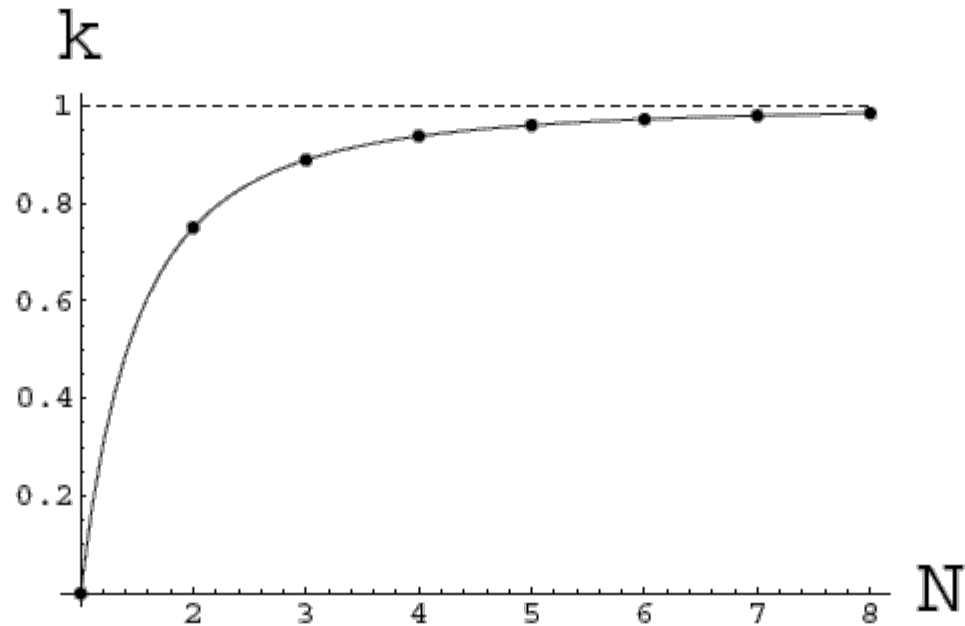


Figure 2: Dependence of bending stiffness from number of layers.

**Problem:** The single atomic layer forming the nanotube would have zero bending stiffness, so that such nanotube would be unstable.



## Different mechanical models of atom

- Atom is considered as a material point. Microstructure of atom is ignored. Atom has translation degrees of freedom only. Atoms interact by the central forces.
- Atom is considered as a body-point. Microstructure of atom is ignored. Atom has translation and rotation degrees of freedom. Atoms interact by the forces and moments. Forces are not central.
- Atom is considered as a particle with microstructure. Atom has internal degrees of freedom.

# Теоретические разработки

При описании взаимодействия частиц с вращательными степенями свободы использовался [метод П.А. Жилина](#), разработанный им применительно к теории оболочек и применявшийся при построении различных моментных моделей механики сплошной среды.

Метод основан на идее использования уравнения баланса энергии для определения тензоров (векторов) деформации.

Метод распространен на случай дискретной системы. Получены формулы, аналогичные соотношениям Коши-Грина, позволяющие вычислить вектор силы и вектор момента по заданной энергии взаимодействия частиц.

# Взаимодействие частиц общего вида с учетом моментного взаимодействия

Векторы деформации:

$$\underline{\varepsilon} = \underline{u}_{12} + \frac{1}{2} \underline{r}_* \times (\underline{\varphi}_1 + \underline{\varphi}_2)$$

$$\underline{\kappa} = \underline{\varphi}_1 + \underline{\varphi}_2$$

$$\underline{r} = \underline{r}_2 - \underline{r}_1.$$

$$\underline{r} = \underline{r}_* + \underline{u}_{12};$$

Расстояние в начальный момент времени

$$\dot{U} = \underline{F} \cdot \underline{\dot{\varepsilon}} + \underline{M} \cdot \underline{\dot{\kappa}}$$

Приведенное уравнение изменения энергии

*Рассматриваются частицы общего вида, моделирующие атомы кристаллической решетки.*

*Взаимодействие характеризуется векторами силы и момента.*

# Структура тензоров жесткостей связей

$$U = \frac{1}{2} \underline{\underline{\varepsilon}} \cdot \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}} + \underline{\underline{\varepsilon}} \cdot \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{\kappa}} + \frac{1}{2} \underline{\underline{\kappa}} \cdot \underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{\kappa}} \quad \text{– энергия деформации}$$

$$\underline{\underline{F}} = \frac{\partial U}{\partial \underline{\underline{\varepsilon}}}, \quad \underline{\underline{M}} = \frac{\partial U}{\partial \underline{\underline{\kappa}}} \quad \text{– соотношения Коши - Грина}$$

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{\varepsilon}} + \underline{\underline{B}} \cdot \underline{\underline{\kappa}}, \quad \underline{\underline{M}} = \underline{\underline{\varepsilon}} \cdot \underline{\underline{B}} + \underline{\underline{C}} \cdot \underline{\underline{\kappa}},$$

*С учетом симметрии тензоров жесткости относительно двух ортогональных плоскостей, можем получить:*

Эти тензоры второго ранга характеризуют жесткость связей частиц

$$\begin{aligned} \underline{\underline{A}} &= A_{xx} \underline{\underline{ii}} + A_{yy} \underline{\underline{jj}}, \\ \underline{\underline{B}} &= 0, \\ \underline{\underline{C}} &= C_{zz} \underline{\underline{kk}} \end{aligned}$$

E.A. Ivanova, A.M. Krivtsov, N.F. Morozov, A.D. Firsova

## Bending stiffness of nanocrystals

Rotational degrees of freedom and moment interactions of atoms are taken into account.

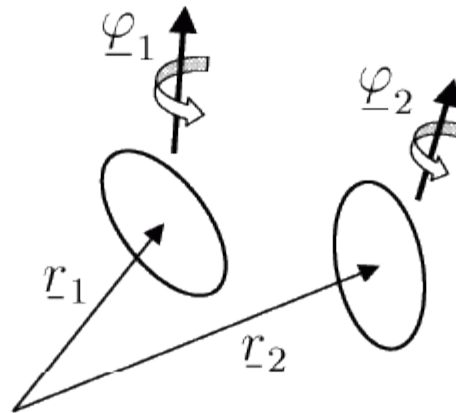


Figure 4: Moment interaction of two atoms.

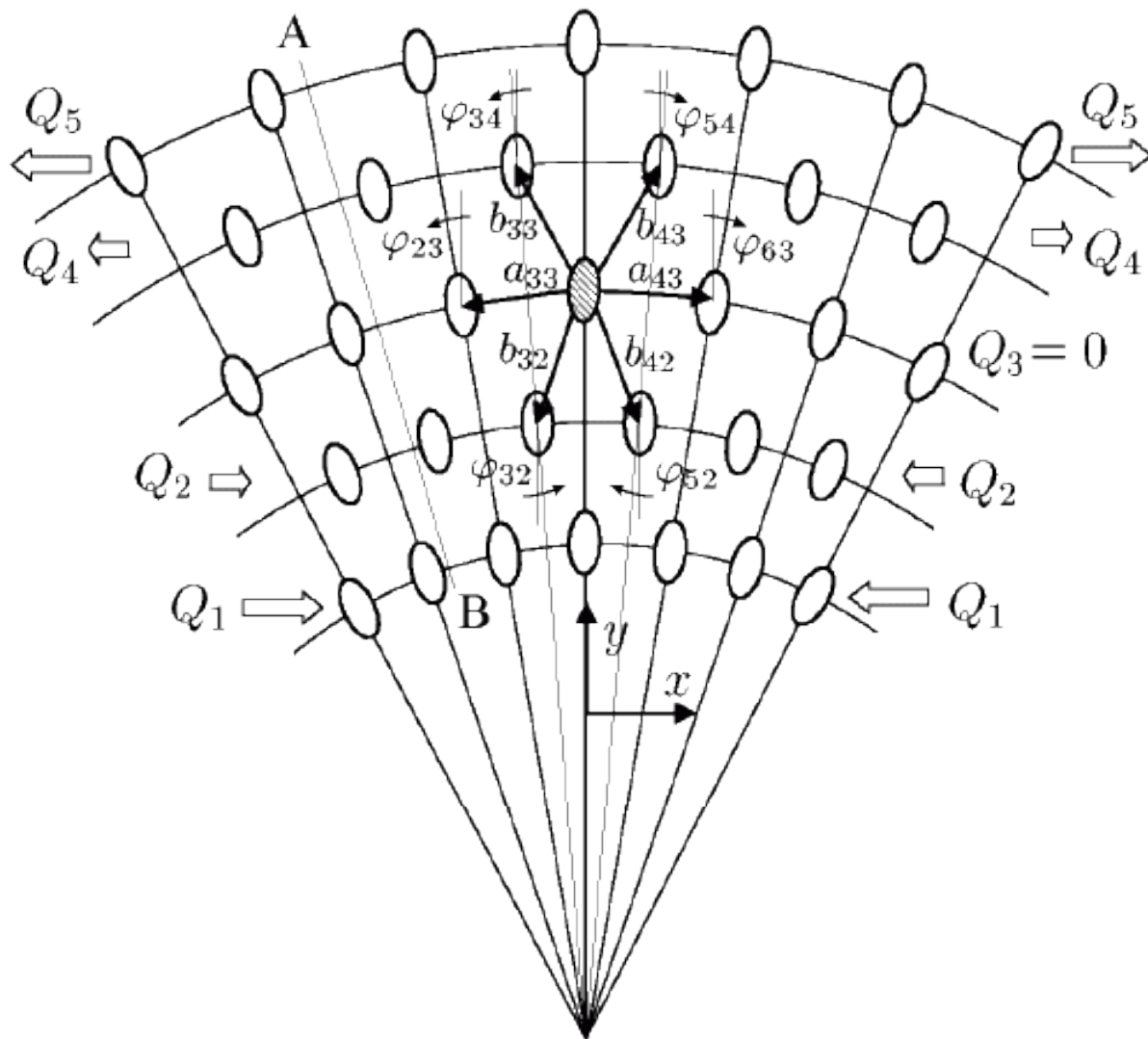


Figure 5: Bending of nanocrystal strip.

## Formulation of problem:

From one layer to another forces  $Q_n$  vary linearly, so that

$$\sum_{n=1}^N Q_n = 0, \quad \sum_{n=1}^N R_n Q_n = M_\Sigma.$$

The crystal sides rotate as a rigid body.

## Bending stiffness:

$$D = \frac{C_1 a_0^3}{16} (N-1)N(N+1) + \frac{C_2 a_0}{2} (3N-1).$$

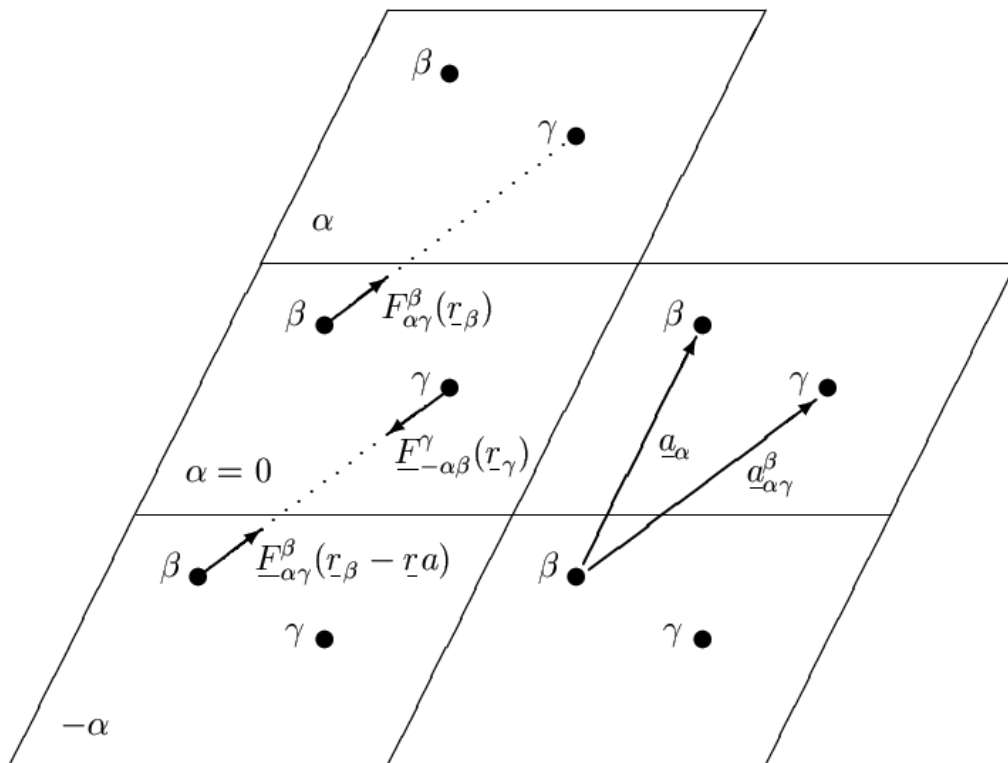
Bending stiffness in terms of macroscopic parameters:

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

Here  $\tilde{E}_\infty$  is elastic modulus, characterizing rotational stiffness, known from the moment microscopic theory of elasticity.

## Разработка устойчивой модели кристаллической решетки графита

Предложена дискретная механическая модель сложной кристаллической решетки, атомы которой отождествляются с частицами общего вида, обладающими как поступательными, так и вращательными степенями свободы, и взаимодействующими между собой посредством сил и моментов.



С использованием длинноволнового приближения осуществлен переход к континуальной модели сложной кристаллической решетки, при этом показано, что динамика континуальной модели описывается уравнениями макроскопической моментной теории упругости.



# Основные результаты исследования

- Получены выражения для макроскопических тензоров жесткости, зависящие от тензоров жесткости межатомных связей и векторов, определяющих геометрию решетки.
- Осуществлен переход к безмоментной теории упругости и на примере двухатомных кристаллических решеток показано, что макроскопические упругие модули безмоментной теории зависят как от силовых, так и от моментных характеристик межатомного взаимодействия.

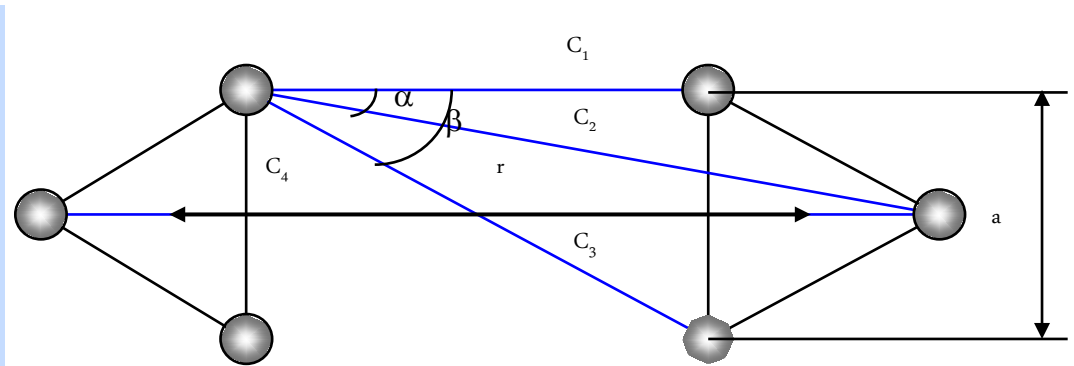
Таким образом, модули упругости безмоментной макроскопической теории позволяют определить не только чисто силовую характеристику межатомной связи  $A$ , но и коэффициент  $D$ , характеризующий поперечную жесткость межатомной связи и присутствующий только при наличии моментного взаимодействия на межатомном уровне.

$$A = \frac{\sqrt{3}}{a^2} (A_{1111} + A_{1122}), \quad D = \frac{\sqrt{3}}{a^2} \frac{A_{1111}^2 - A_{1122}^2}{A_{1111} + 3A_{1122}}.$$

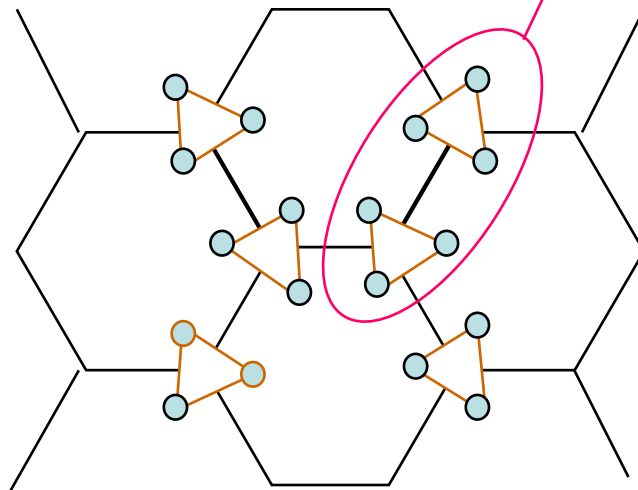
- Вычислены жесткости межатомных связей в слое графита и показано, что поперечная жесткость межатомной связи составляет 55 % продольной жесткости. Данный результат показывает, что ковалентная связь является существенно нецентральной, что возможно только при наличии моментных взаимодействий на микроуровне

# И.Е. Беринский, А.П. Бызов, Е.А. Иванова

ПОСТРОЕНИЕ ПАРНОГО  
МОМЕНТНОГО ПОТЕНЦИАЛА  
ДЛЯ ОПИСАНИЯ  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ  
РЕШЕТКИ ГРАФИТА

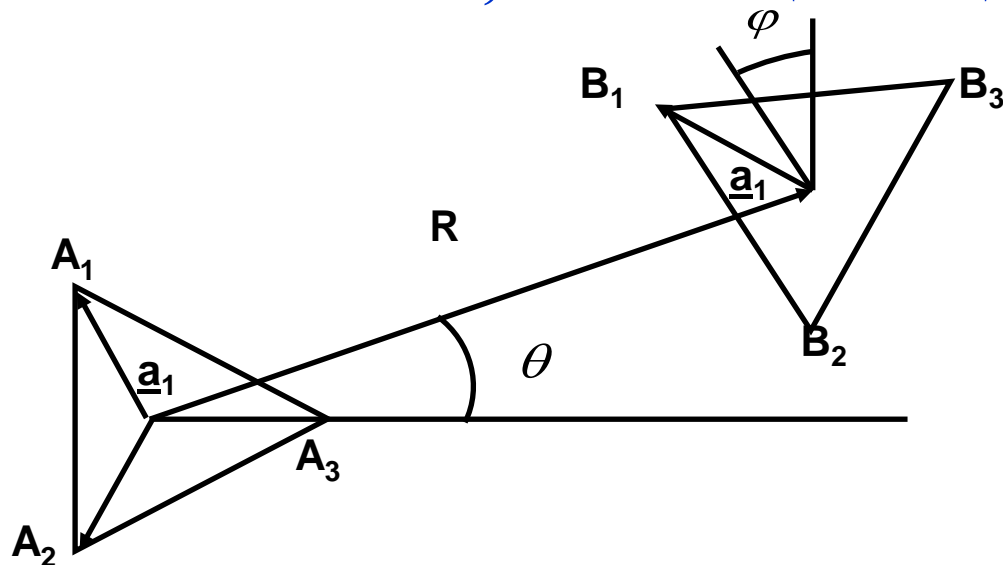


“Микромодель”



Модель решетки графита с учетом  
моментного взаимодействия  
 (“Макромодель”)

# Рассматривается система, состоящая из двух частиц



Положение системы определяется величинами:  $\underline{R}_1$ ,  $\underline{R}_2$ ,  $\varphi_1$ ,  $\varphi_2$

Взаимодействие частиц зависит только от их взаимного расположения.

Объективные переменные, не меняющиеся при перемещении системы как твердого целого:

$$R = |\underline{R}_2 - \underline{R}_1|$$

Угол сдвига

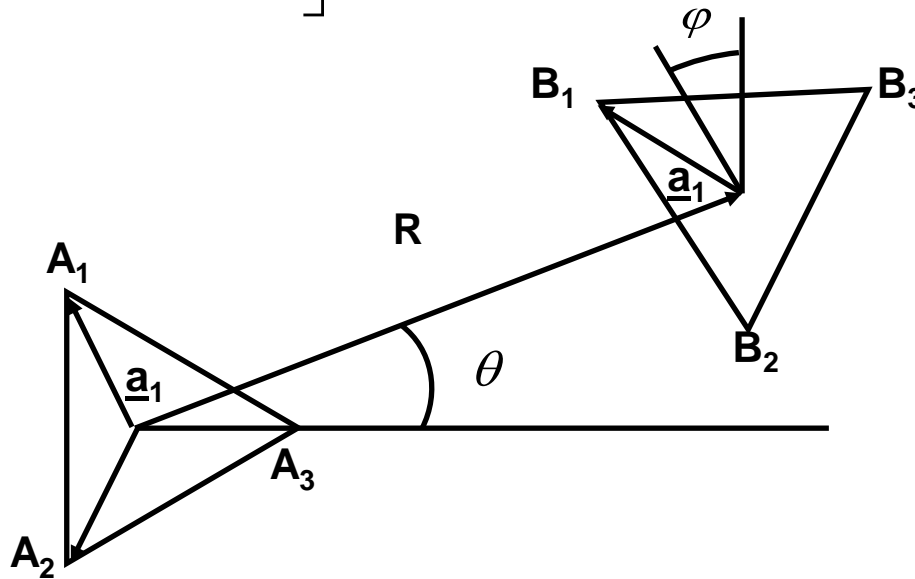
$$\gamma = \theta - \frac{1}{2}(\varphi_1 + \varphi_2)$$

Относительный поворот частиц

$$\kappa = \varphi_2 - \varphi_1$$

# Потенциал взаимодействия материальных точек

$$\Pi(r_{ij}) = D \left[ \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r_{ij}} \right)^6 \right] - \text{потенциал Леннарда-Джонса}$$



$$\underline{r}_{ij} = -\underline{a}_i + \underline{R}(R, \gamma, \kappa) + \underline{\underline{P}}(\kappa) \cdot \underline{a}_j$$

# Потенциал взаимодействия частиц

$$U_{ij}(R, \gamma, \kappa) = \Pi(r_{ij}) \quad U(R, \gamma, \kappa) = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 U_{i,j}(R, \gamma, \kappa)$$

$$\underline{r}_{ij} = -\underline{a}_i + \underline{R}(R, \gamma, \kappa) + \underline{\underline{P}}(\kappa) \cdot \underline{a}_j$$

$$\Pi_0(R) = 9D \left[ -2 \left( \frac{r_0}{R} \right)^6 + \left( \frac{r_0}{R} \right)^{12} \right] + 324D \left[ - \left( \frac{r_0}{R} \right)^8 + \left( \frac{r_0}{R} \right)^{14} \right] \left( \frac{a}{r_0} \right)^2$$

Безразмерный малый параметр

$$\varepsilon = \frac{a}{r_0}$$

$$U(R, \gamma, \kappa) = \Pi_0(R) + \Pi_1(R) \sin(3\gamma) \sin\left(\frac{3\kappa}{2}\right)$$

$$\Pi_1(R) = 144D \left[ -14 \left( \frac{r_0}{R} \right)^{15} + 5 \left( \frac{r_0}{R} \right)^9 \right] \left( \frac{a}{r_0} \right)^3$$

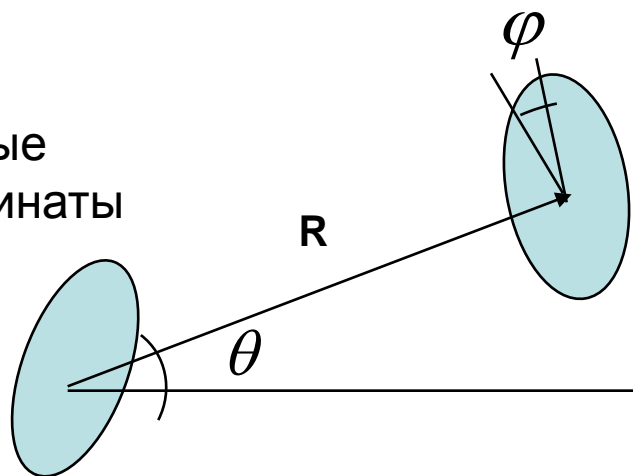
# ПОСТРОЕНИЕ ОБОБЩЕННОГО ПАРНОГО ПОТЕНЦИАЛА

Наиболее общий вид потенциала взаимодействия однотипных частиц, способных образовать кристаллическую решетку в плоскости :

$$U(R, \gamma, \kappa) = \Pi_0(R) + \Pi_1(R) \sin(n\gamma) \sin\left(\frac{n\kappa}{2}\right)$$

$$\left. \begin{aligned} \gamma &= \theta - \frac{1}{2}\varphi \\ \kappa &= \varphi \end{aligned} \right\}$$

Угловые  
координаты



$n$  – параметр, характеризующий порядок симметрии частицы

Для частиц, образующих 6-угольную решетку в плоскости,  $n = 3$

$\Pi_0(R)$  – безмоментный потенциал взаимодействия типа Леннарда - Джонса

$\Pi_1(R)$

$R$

## ДЛЯ РЕШЕТКИ ГРАФИТА ПРИНИМАЕМ ПОТЕНЦИАЛ:

$$U(R, \gamma, \kappa) = D_1 \left[ \left( \frac{R_0}{R} \right)^{12} - 2 \left( \frac{R_0}{R} \right)^6 \right] + D_2 \left( \frac{R_0}{R} \right)^{12} \sin(3\gamma) \sin\left(\frac{3\kappa}{2}\right)$$

$R_0$  – параметр Леннарда – Джонса

КОМПОНЕТНЫ УСИЛИЙ ВЫЧИСЛЯЮТСЯ ПО ФОРМУЛАМ:

$$F_R = \frac{\partial U}{\partial R} \quad F_\theta = \frac{1}{R} \frac{\partial U}{\partial \gamma}$$

радиальная и поперечная  
составляющие вектора силы

$$M^c = \frac{\partial U}{\partial \kappa}$$

величина вектора момента,  
вычисленного относительно  
середины отрезка,  
соединяющего частицы

В положении равновесия  
все компоненты усилий  
должны быть равны нулю



$$R_*(D_1, D_2) = R_0 \cdot \left( 1 - \frac{D_2}{D_1} \right)^{1/6}$$

# ЖЕСТКОСТИ МЕЖАТОМНЫХ СВЯЗЕЙ МОГУТ БЫТЬ НАЙДЕНЫ ПО ФОРМУЛАМ:

$$A_{RR} = U_R'' \Big|_{R=R_*, \gamma=\gamma_*, \kappa=\kappa_*}$$

$$A_{\gamma\gamma} = \frac{1}{R^2} U_\gamma'' \Big|_{R=R_*, \gamma=\gamma_*, \kappa=\kappa_*}$$

$$A_{\kappa\kappa} = U_\kappa'' \Big|_{R=R_*, \gamma=\gamma_*, \kappa=\kappa_*}$$

В положении  
устойчивого  
равновесия

$$A_{RR} > 0$$

$$A_{\gamma\gamma} > 0$$

$$A_{\kappa\kappa} > 0$$



ДЛЯ РЕШЕТКИ ГРАФИТА:

$$\frac{A_{RR}}{A_{\gamma\gamma}} = 2.1 \quad \longrightarrow \quad \frac{D_1}{D_2} = 1.2625$$

$$R_* = 0.142 \text{ нм} \quad A_{RR} = 730 \text{ Н/м}$$

$$D_1 = 22.15 \text{ эВ} \quad D_2 = 17.54 \text{ эВ}$$

$$R_0 = 0.114 \text{ нм}$$

Благодарю за внимание!