

УДК 539.3, 539.4

## УЧЕТ МОМЕНТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРИ РАСЧЕТЕ ИЗГИБНОЙ ЖЕСТКОСТИ НАНОСТРУКТУР

© 2003 г. Е. А. Иванова, А. М. Кривцов, академик Н. Ф. Морозов, А. Д. Фирсова

Поступило 25.04.2003 г.

В последние годы наряду с исследованием электронных и оптических свойств наноструктур [1] особенно важным оказывается изучение их механических свойств. Большое количество работ посвящено созданию и исследованию свойств наноразмерных трубок [2–8]. Согласно данным работы [4], нанотрубки могут подвергаться большим деформациям, не теряя при этом упругих свойств. При расчете напряженно-деформированного состояния нанотрубок, как правило, используется теория упругих оболочек [9], при этом упругие модули определяются в результате исследования дискретных моделей, в которых учитывается только силовое взаимодействие между формирующими трубку атомами. Однако существование однослойных нанотрубок [5–8] 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. Целью настоящей работы является разработка методики определения изгибной жесткости наноразмерных структур с учетом моментного взаимодействия на наноуровне.

В первой части работы получены общие формулы, описывающие моментное взаимодействие между атомами или молекулами, во второй части полученные формулы применены к дискретной модели [10, 11] для получения поправок, связанных с учетом моментного взаимодействия и позволяющих описать механические свойства однослойных наноструктур.

Рассмотрим некоторый кристалл, состоящий из частиц (атомов или молекул), взаимодействие которых зависит не только от их взаимного рас-

положения в пространстве, но и от их взаимной ориентации. Взаимодействие между частицами характеризуется вектором силы и вектором момента. Определим силу и момент взаимодействия частиц кристалла, соблюдая полную аналогию с тем, как это делается в теории оболочек и стержней [12, 13].

Рассмотрим две взаимодействующие частицы (рис. 1). В актуальной конфигурации положение частиц задается радиусами-векторами  $\mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{r}_2$ , а ориентация частиц – векторами поворотов  $\boldsymbol{\varphi}_1$ ,  $\boldsymbol{\varphi}_2$ . В равновесном положении  $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_0$ ,  $\boldsymbol{\varphi}_1 = 0$ ,  $\boldsymbol{\varphi}_2 = 0$ . Введем следующие обозначения:  $\mathbf{F}_1$ ,  $\mathbf{M}_1$  – сила и момент, действующие на частицу 1 со стороны частицы 2;  $\mathbf{F}_2$ ,  $\mathbf{M}_2$  – сила и момент, действующие на частицу 2 со стороны частицы 1;  $\mathbf{F}_1^e$ ,  $\mathbf{M}_1^e$ ,  $\mathbf{F}_2^e$ ,  $\mathbf{M}_2^e$  – внешние воздействия на частицы 1 и 2 соответственно. Моменты  $\mathbf{M}_1$  и  $\mathbf{M}_1^e$  вычислены относительно частицы 1, моменты  $\mathbf{M}_2$  и  $\mathbf{M}_2^e$  вычислены относительно частицы 2. Следуя моментной теории упругости [14], запишем уравнения движения частицы 1, частицы 2 и системы, состоящей из обеих частиц:

$$\begin{aligned} m_1 \dot{\mathbf{v}}_1 &= \mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_1^e, & (\boldsymbol{\theta}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_1)' &= \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_1^e, \\ m_2 \dot{\mathbf{v}}_2 &= \mathbf{F}_2 + \mathbf{F}_2^e, & (\boldsymbol{\theta}_2 \cdot \boldsymbol{\omega}_2)' &= \mathbf{M}_2 + \mathbf{M}_2^e, \\ (m_1 \mathbf{v}_1 + m_2 \mathbf{v}_2)' &= \mathbf{F}_1^e + \mathbf{F}_2^e, \\ (\mathbf{r}_1 \times m_1 \mathbf{v}_1 + \boldsymbol{\theta}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_1 + \mathbf{r}_2 \times m_2 \mathbf{v}_2 + \boldsymbol{\theta}_2 \cdot \boldsymbol{\omega}_2)' &= \\ &= \mathbf{r}_1 \times \mathbf{F}_1^e + \mathbf{M}_1^e + \mathbf{r}_2 \times \mathbf{F}_2^e + \mathbf{M}_2^e. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь  $m_1$ ,  $m_2$ ,  $\boldsymbol{\theta}_1$ ,  $\boldsymbol{\theta}_2$  – массы и тензоры инерции частиц,  $\mathbf{v}_1$ ,  $\mathbf{v}_2$ ,  $\boldsymbol{\omega}_1$ ,  $\boldsymbol{\omega}_2$  – их линейные и угловые скорости. Заметим, что в системе тел –  $m$  точек, в отличие от системы материальных точек, уравнение баланса моментов не является следствием уравнения баланса сил. Эти уравнения являются независимыми законами. Следствием уравнений (1)

является третий закон Ньютона для сил и аналог третьего закона Ньютона для моментов:

$$\mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2 = 0, \quad \mathbf{r}_1 \times \mathbf{F}_1 + \mathbf{M}_1 + \mathbf{r}_2 \times \mathbf{F}_2 + \mathbf{M}_2 = 0. \quad (2)$$

Запишем уравнение баланса энергии для системы, состоящей из двух частиц:

$$\begin{aligned} & \left( \frac{1}{2} [m_1 \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_1 + \boldsymbol{\omega}_1 \cdot \boldsymbol{\theta}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_1 + \right. \\ & \left. + m_2 \mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{v}_2 + \boldsymbol{\omega}_2 \cdot \boldsymbol{\theta}_2 \cdot \boldsymbol{\omega}_2] + U \right)' = \\ & = \mathbf{F}_1^e \cdot \mathbf{v}_1 + \mathbf{M}_1^e \cdot \boldsymbol{\omega}_1 + \mathbf{F}_2^e \cdot \mathbf{v}_2 + \mathbf{M}_2^e \cdot \boldsymbol{\omega}_2, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $U$  – внутренняя энергия системы (энергия взаимодействия частиц 1 и 2). Предполагая смещения из положения равновесия малыми величинами и принимая во внимание уравнения (1), (2), уравнение баланса энергии (3) можно привести к виду

$$\dot{U} = \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{M} \cdot \mathbf{k}, \quad \mathbf{F} = \mathbf{F}_1 = -\mathbf{F}_2,$$

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \mathbf{M}_1 + \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times \mathbf{F}_1 = \\ &= -\mathbf{M}_2 - \frac{1}{2}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \times \mathbf{F}_2, \end{aligned} \quad (4)$$

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

$$\mathbf{k} = \boldsymbol{\varphi}_2 - \boldsymbol{\varphi}_1, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1.$$

Здесь  $\mathbf{M}$  имеет смысл момента, действующего на частицу 1 со стороны частицы 2, вычисленного относительно середины отрезка, соединяющего эти частицы. Вектор  $\boldsymbol{\varepsilon}$  и  $\mathbf{k}$ , на которых совершают работу вектор силы и вектор момента (см. формулы (4)), назовем векторами деформации. Далее будем рассматривать упругое деформирование системы. Будем предполагать, что внутренняя энергия, вектор силы и вектор момента зависят только от векторов деформации и не зависят от скоростей. Тогда

$$\mathbf{F} = \frac{\partial U}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}, \quad \mathbf{M} = \frac{\partial U}{\partial \mathbf{k}}. \quad (5)$$

Будем считать, что внутренняя энергия является квадратичной формой векторов деформации

$$U = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{k} + \frac{1}{2} \mathbf{k} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{k}. \quad (6)$$

Коэффициенты квадратичной формы (6) называются тензорами упругости. В линейной теории тензоры упругости – постоянные величины, причем тензоры  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{C}$  симметричные, а тензор  $\mathbf{B}$  произвольный. Согласно формулам (5), (6), вектор силы и вектор момента имеют вид

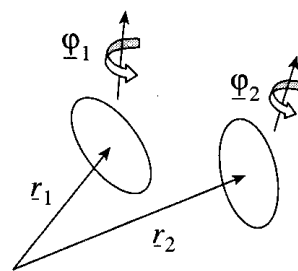


Рис. 1. Моментное взаимодействие двух частиц.

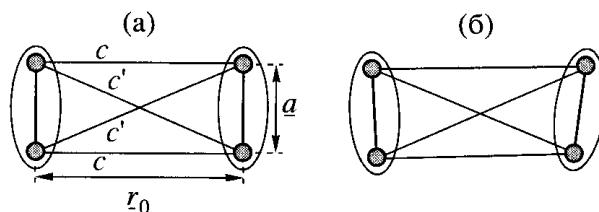


Рис. 2. Две взаимодействующие частицы: а – отсчетное (равновесное) положение, б – фактическое положение.

$$\mathbf{F} = \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{k}, \quad \mathbf{M} = \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{C} \cdot \mathbf{k}. \quad (7)$$

Для иллюстрации рассмотрим простейшую модель моментного взаимодействия, в которой каждая частица моделируется двумя жестко связанными материальными точками (рис. 2). Используются обозначения:  $\mathbf{a}$  – вектор, соединяющий две материальные точки внутри одной частицы;  $\mathbf{r}_0$  – вектор, задающий равновесное расстояние между различными частицами. Оба вектора соответствуют отсчетной (равновесной) конфигурации для системы из двух частиц (рис. 2а), фактическое положение системы показано на рис. 2б. Взаимодействие между материальными точками, принадлежащими разным частицам, описывается чисто силовым взаимодействием (жесткости соответствующих связей обозначены  $c$  и  $c'$ ), однако суммарное взаимодействие между частицами имеет и силовую, и моментную составляющие. Величина  $a$  на рис. 2 характеризует плечо моментного взаимодействия, при стремлении  $a \rightarrow 0$  осуществляется переход от моментного к чисто силовому взаимодействию. Вычисление силы и момента, действующих на частицу 1 со стороны частицы 2, показало, что эти величины имеют вид (7), где

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= C_1 \mathbf{ii} + C_1^* \mathbf{jj}, \quad \mathbf{B} = 0, \quad \mathbf{C} = C_2 \mathbf{kk}, \\ \mathbf{i} &= \frac{\mathbf{r}_0}{|\mathbf{r}_0|}, \quad \mathbf{j} = \frac{\mathbf{a}}{a}, \quad \mathbf{k} = \mathbf{i} \times \mathbf{j}, \\ C_1 &= 2(c + c' \cos^2 \alpha), \\ C_1^* &= 2c' \sin^2 \alpha, \quad C_2 = \frac{ca^2}{2}, \quad \operatorname{tg} \alpha = \frac{\alpha}{r_0}. \end{aligned} \quad (8)$$

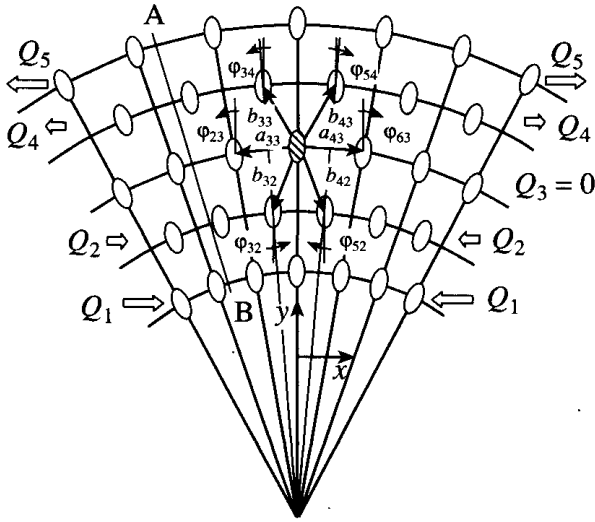


Рис. 3. Изгиб нанокристаллической полосы.

Как правило, атомы нанокристалла моделируются материальными точками. Моделирование атомов нанокристалла частицами, имеющими вращательные степени свободы, приводит к усложнению теории взаимодействия частиц. Однако это усложнение является оправданным, поскольку оно дает возможность описать ряд физических эффектов, которые в системе материальных точек могут быть описаны только с помощью многочастичных потенциалов взаимодействия [8, 15]. В частности, расширяется класс кристаллических решеток, являющихся устойчивыми. Вместе с тем при использовании теории моментных взаимодействий математические формулировки задач оказываются значительно проще, чем при использовании многочастичных потенциалов. Как будет показано ниже, учет моментных взаимодействий позволяет получить аналитическое выражение для изгибной жесткости нанокристалла, не обращающееся в нуль в случае, когда кристалл состоит из одного слоя атомов.

В качестве примера применения моментной теории воспользуемся модельной задачей изгиба двумерной нанокристаллической полосы [10, 11]. Рассматривается двумерный монокристалл, имеющий  $N$  слоев в направлении  $y$  и  $K$  слоев в направлении  $x$ , причем  $K \gg N$  (рис. 3). Для силы и момента, характеризующих взаимодействие частиц, будем использовать выражения (7), где тензоры упругости представлены в форме

$$A = C_1 \frac{\mathbf{r}_0 \mathbf{r}_0}{|\mathbf{r}_0|^2} + C_1^* \frac{\mathbf{k} \times \mathbf{r}_0 \mathbf{k} \times \mathbf{r}_0}{|\mathbf{r}_0|^2}, \quad (9)$$

$$B = 0, \quad C = C_2 \mathbf{k} \mathbf{k}.$$

Здесь  $\mathbf{k}$  – единичный вектор, перпендикулярный плоскости полосы. Коэффициенты  $C_1$ ,  $C_1^*$ ,  $C_2$  зависят от структуры и размеров взаимодействующих

частиц. Формулы (9) дают общий вид тензоров  $A$ ,  $B$  и  $C$  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 [12].

В данном сообщении мы ограничимся рассмотрением треугольной кристаллической решетки. В качестве модели частиц, описываемых соотношениями (9) и удовлетворяющих симметрии треугольной решетки, можно предложить совокупность шести материальных точек, расположенных в углах правильного шестиугольника. Однако далее мы будем пользоваться общим выражением (9) без конкретизации внутренней структуры частицы, а для наглядности изображать частицы в виде овалов, позволяющих показать их относительные повороты (рис. 3).

На частицы, находящиеся на боковых гранях кристалла, действуют силы  $Q_j$  (рис. 3), изменяющиеся при переходе от одного слоя к другому по линейному закону таким образом, что суммарная нагрузка оказывается чисто моментной:

$$\sum_{j=1}^N Q_j = 0, \quad \sum_{j=1}^N R_j Q_j = M_\Sigma. \quad (10)$$

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 (рис. 3). 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  $\phi_{i,j}$ . Индексы  $i, j$  определяют номера слоев в направлениях  $x$  и  $y$  соответственно (рис. 3). Расстояния между соседними слоями оп-

ределяются из соотношения  $h_{i,j}^2 = b_{i,j}^2 - \frac{a_{i,j}^2}{4}$ . В неде-

деформированном состоянии кристаллическая решетка состоит из равносторонних треугольников со стороной  $a = b = a_0$ ; углы поворота атомов  $\phi_{i,j}$  считаются равными нулю. Легко убедиться в том, что в недеформированном состоянии имеют

место соотношения  $h_0 = \frac{\sqrt{3}a_0}{2}$ ,  $R_j = (j-1)h_0$ , где  $R_j$  – расстояние между  $j$ -м и 1-м слоями атомов.

Записав уравнения равновесия атомов, получим систему уравнений, решение которой имеет вид

$$\Delta b_{i,j} = 0, \quad \Delta a_{i,j} = \frac{4\sqrt{3}M_{\Sigma}(2j-N-1)}{C_1 a_0(N-1)N(N+1)},$$

$$\varphi_{i,j} = (i-1)\alpha, \quad \alpha = \frac{\frac{\Delta a_{i,N}}{2} - \frac{\Delta a_{i,1}}{2}}{h_0(N-1)}. \quad (11)$$

Как видно из соотношений (11), при деформировании кристалла слои атомов в направлении оси  $u$  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.

Определим изгибную жесткость монокристаллической полосы. Для этого разрежем мысленно кристалл вертикальной прямой  $AB$  (рис. 3). Согласно формулам (11), суммарная нормальная сила, действующая с одной части кристалла на другую, равна нулю, а суммарный изгибающий момент  $M^*$  имеет вид

$$M^* = M_{\Sigma} + C_2 \alpha(3N-1). \quad (12)$$

Изгибная жесткость определяется как отношение момента  $M^*$  к кривизне  $\beta$ :

$$D \stackrel{\text{def}}{=} \frac{M^*}{\beta}, \quad \beta = \frac{2\alpha}{a_0}. \quad (13)$$

Подстановка формул (11) и (12) в (13) дает

$$D = \frac{C_1 a_0^3}{16}(N-1)N(N+1) + \frac{C_2 a_0}{2}(3N-1). \quad (14)$$

Первое слагаемое в (14) совпадает с формулой для изгибной жесткости, полученной в работе [11], где рассматривалась аналогичная задача без учета моментных взаимодействий частиц кристалла. Второе слагаемое описывает поправку, вызванную моментным взаимодействием между частицами. При  $N=1$  первое слагаемое в формуле (14) обращается в нуль и значение изгибной жесткости полностью определяется величиной  $C_2$ , характеризующей моментные взаимодействия атомов кристалла

$$N=1: \quad D = C_2 a_0. \quad (15)$$

При  $N \rightarrow \infty$  второе слагаемое в (14) становится пренебрежимо малым по сравнению с первым, а первое слагаемое стремится к значению, принятому в макроскопической теории пластин

$$N \rightarrow \infty: \quad D \rightarrow D_{\infty} = \frac{E_{\infty} H^3}{12}, \quad E_{\infty} = \frac{2C_1}{\sqrt{3}}, \quad (16)$$

где  $E_{\infty}$  – модуль Юнга бесконечного кристалла,  $H \stackrel{\text{def}}{=} N h_0$  – макроскопическая толщина полосы.

Таким образом, в данной работе получены общие формулы, описывающие моментное взаимодействие между атомами или молекулами в рамках линейного упругого деформирования. Применение полученных формул проиллюстрировано на упрощенной задаче об изгибе двумерной нанокристаллической полосы, однако аналогичным образом данные формулы могут применяться и в общей трехмерной постановке. В работе показано, что использование моментного взаимодействия на наноуровне позволяет с единых позиций описать упругое деформирование однослойных и многослойных наноструктур, определить поправку к изгибной жесткости, не обращающуюся в нуль для однослойных нанобъектов.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант 02-01-00514.

Авторы благодарят И.И. Блехмана за обсуждение работы.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Леденцов Н.Н., Устинов В.М., Шукин В.А. и др. // Физика и техника полупроводников. 1998. Т. 32. № 4. С. 385–410.
2. Prinz V.Ya., Chekhovskiy A.V., Preobrazhenskii V.V. et al. // Nanotechnology. 2002. V. 21. № 2. P. 231–233.
3. Маслов А.В., Корыткова Э.Н., Гусаров В.В. Минералогические музеи: Материалы IV Междунар. симп. СПб., 2002. С. 286–287.
4. Kizuka T. // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. № 7. P. 4646–4649.
5. Peng L.-M., Zhang Z.L., Xue Z.Q. et al. // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 85. № 15. P. 3249–3252.
6. Salvetat J.-P., Briggs G.A.D., Bonard J.-M. et al. // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 82. № 5. P. 944–947.
7. Lee Y.H., Kim S.G., Tomanek D. // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 78. № 12. P. 2393–2396.
8. Zhang P., Huang Y., Gao H., Hwang K.C. // J. Appl. Mech. Trans. ASME. 2002. V. 69. P. 454–458.

9. *Ri C.Q.* // *Phys. Rev. B.* 2000. V. 62. № 15. P. 9973–9976.
10. *Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.* // *ДАН.* 2001. Т. 381. № 3. С. 825–827.
11. *Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.* // *ДАН.* 2002. Т. 385. № 4. С. 494.
12. *Жилин П.А.* // *Тр. Ленингр. политехн. ин-та.* 1982. Т. 386. С. 29–46.
13. *Жилин П.А., Сергеев А.Д., Товстик Т.П.* *Тр. XXIV Всесоюз. шк.-сем. “Анализ и синтез нелинейных механических колебательных систем”*, 1996. СПб., 1997. С. 313–337.
14. *Новацкий В.* *Теория упругости.* М.: Мир, 1975. 872 с.
15. *Tersoff J.* // *Phys. Rev. B.* 1988. V. 37. P. 6991–7000.