



15. *Izmodenov V.V., Malama Yu.G., Gloeckler G., Geiss J.* Filtration of interstellar H, O, N atoms through the heliospheric interface: Inferences on local interstellar abundances of the elements // *Astron. Astrophys.* 2004. V. 414, № 3. P. L29–L32.
16. *Witte M.* Kinetic parameters of interstellar neutral helium. Review of results obtained during one solar cycle with Ulysses / *GAS-instrument* // *Astron. Astrophys.* 2004. V. 426, № 3. P. 835–844.
17. *Izmodenov V.V., Malama Yu.G., Ruderman M.S.* Solar cycle influence on the interaction of the solar wind with the local interstellar cloud // *Astron. Astrophys.* 2005. V. 34, № 3. P. 1069–1080.
18. *Измоленов В.В., Алексашов Д.Б.* Модель хвостовой области гелиосферного интерфейса // *Письма в Астрон. журн.* 2003. Т. 29, № 1. С. 69–75.
19. *Malama Yu.G., Izmodenov V.V., Chalov S.V.* Modeling of the heliospheric interface: multi-component nature of the heliospheric plasma // *Astron. Astrophys.* 2006. V. 445, № 2. P. 693–701.
20. *Myasnikov A.V., Alexashov D.B., Izmodenov V.V., Chalov S.V.* Self-consistent model of the solar wind interaction with three-component circumsolar interstellar cloud: Mutual influence of the thermal plasma, galactic cosmic rays and H atoms // *J. Geophys. Res.* 2000. V.105, № A3. P. 5167–5177.
21. *Alexashov D.B., Chalov S.V., Myasnikov A.V., Izmodenov V.V., Kallenbach R.* The dynamic role of anomalous cosmic rays in the outer heliosphere // *Astron. Astrophys.* 2004. V. 420, № 2. P. 729–736.
22. *Izmodenov V.V., Alexashov D.B., Myasnikov A.V.* Direction of the interstellar H atom inflow in the heliosphere: Role of the interstellar magnetic field // *Astron. Astrophys.* 2005. V. 437, № 3. P. L35–L38.
23. *Lallement R., Quemerais E., Bertaux J.-L., Ferron S., Koutroumpa D., Pellinen R.* Deflection of the interstellar neutral hydrogen flow across the heliospheric interface // *Science.* 2005. V. 307, № 5714. P. 1447–1449.

УДК 539.3

МЕХАНИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ В НАНОТЕХНОЛОГИИ

В.А. Еремеев, Е.А. Иванова*, Н.Ф. Морозов**

Южный научный центр РАН,
Южный Федеральный университет
E-mail: eremeyev@math.rsu.ru

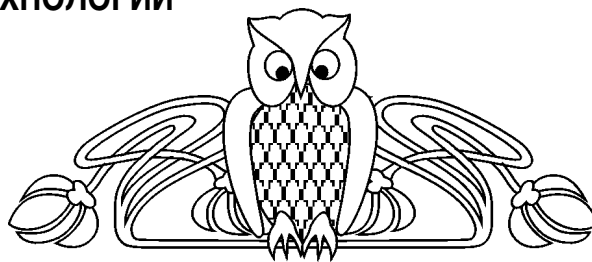
* Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, кафедра теоретической механики
E-mail: ivanova@EI5063.spb.edu

** Санкт-Петербургский государственный университет
кафедра теории упругости
E-mail: morozov@NM1016.spb.edu

В последнее десятилетие производство и внедрение наноразмерных агрегатов и включений становится актуальным в электронике, медицине, космической технике и многих других отраслях производства. В связи с этим определилась необходимость анализировать нанообъекты на предмет прочности, устойчивости, дефектологии и долговечности. Какими же методами мы можем пользоваться? Естественно, обсуждается возможность применения традиционных методов классической механики, которые развивались и опробывались столетиями. Здесь мнения ученых разделились — некоторые считают это применение невозможным, а другие используют традиционные методы в полном объеме без корректив. Истина, как нам кажется, заключается в тезисе: традиционные методы механики можно использовать в задачах нанотехнологии, но необходима определенная корректировка. И здесь, прежде всего, возникает вопрос о правомерности использования при исследовании нанообъектов традиционных механических и физических параметров.

1. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЖЕСТКОСТИ НАНООБЪЕКТОВ

В работе [1] были найдены и проанализированы величины модуля Юнга и коэффициента Пуассона для слоев наноразмерной толщины. В качестве модели исследования использовался двумерный моно-



Mechanical Problems in Nanotechnology

V.A. Eremeev, E.A. Ivanova, N.F. Morozov

During the last decade, production and adoption of nano-aggregations and nano-inclusions have become actual in electronics, medicine, space engineering and many other branches of production. In this connection, the necessity of studying the nano-subject resistance, stiffness, defectology, durability has emerged. Which of the techniques are best applicable? Feasibility of applying the traditional methods of Newtonian Mechanics, which have been developed and tested for centuries, is widely discussed. However, the researchers' opinions differ much: some of the scientists think it impossible to use this method, others are apt to employ the traditional techniques entirely without any amendments. In our opinion, the truth is in the following thesis: the traditional methods of the Mechanics could be used to solve nanotechnology problems, but still with certain corrections. And here the question arises about appropriateness of using the traditional mechanical and physical parameters of nano-subjects.



кристалл, изображенный на рис. 1, имеющий бесконечную длину в направлении x и $N \geq 2$ атомарных слоев в направлении y . Взаимодействие между атомами считается парным.

Заметим, что толщина кристалла H (его протяженность в направлении y) принципиально не может быть определена однозначно. Например, если положить, что толщина кристалла равна расстоянию между слоями атомов, лежащими на противоположных торцах (см. рис. 1), то тогда $H = (N - 1)h$, где h — межслойное расстояние, N — число слоев. Но, с другой стороны, вполне резонно определить толщину кристалла как произведение числа слоев на толщину одного слоя, что приводит к формуле $H = Nh$. Поэтому обозначим

$$H \stackrel{\text{def}}{=} N_* h, \quad N - 1 \leq N_* \leq N, \quad (1)$$

где N_* — величина, отражающая произвол в определении H .

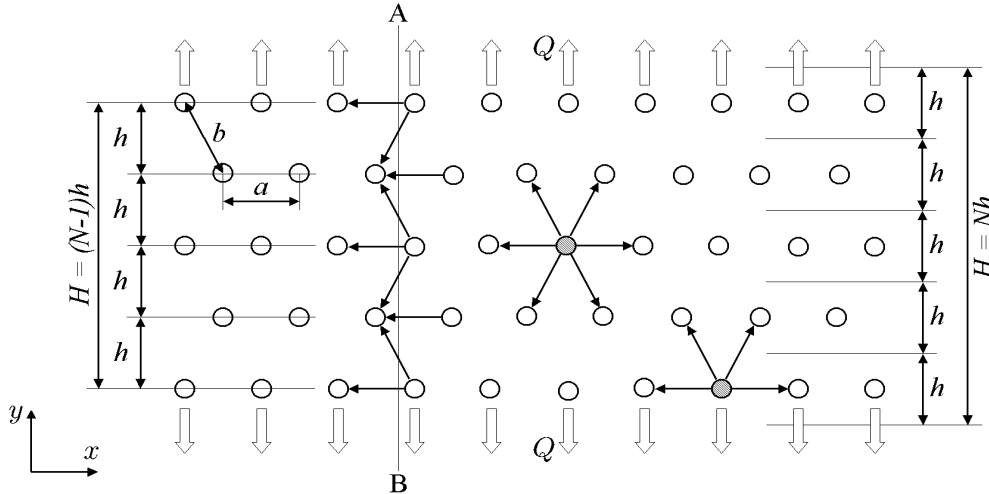


Рис. 1. Двумерная монокристаллическая полоса

Основной задачей данной работы являлось определение зависимости коэффициента Пуассона и модуля Юнга конечного (в одном из направлений) монокристалла от числа атомарных слоев. Решение этой задачи дало следующие результаты:

$$\nu_1 = \nu_\infty, \quad E_1 = \frac{N}{N_*} E_\infty; \quad \nu_2 = \frac{N - 1}{N - \frac{1}{9}} \nu_\infty, \quad E_2 = \frac{N}{N - \frac{1}{9}} E_\infty. \quad (2)$$

Здесь ν_1 и E_1 — коэффициент Пуассона и модуль Юнга при растяжении вдоль оси x , величины ν_2 и E_2 соответствуют растяжению вдоль оси y , $\nu_\infty = 1/3$, $E_\infty = 2C/\sqrt{3}$ — значения модуля Юнга и коэффициента Пуассона, соответствующие бесконечному кристаллу. Рассмотрим полученные формулы. При растяжении вдоль атомарных слоев модуль Юнга E_1 существенно зависит от величины N_* , то есть от того, как определяется толщина нанокристаллической полосы. Если положить $N_* = N$ (максимальное значение N_*), то тогда при растяжении вдоль атомарных слоев коэффициент Пуассона и модуль Юнга не зависят от числа слоев. Связано это, очевидно, с тем, что в продольном направлении рассматриваемый кристалл бесконечен. Модуль Юнга E_1^{max} , соответствующий минимальному значению $N_* = N - 1$, напротив, отнюдь не постоянен, он увеличивается при уменьшении числа атомарных слоев, достигая при $N = 2$ значения, в два раза превышающего E_∞ . Таким образом, неоднозначность в определении модуля Юнга оказывается весьма существенной для малых N . При растяжении перпендикулярно атомарным слоям и коэффициент Пуассона, и модуль Юнга зависят от N , причем при уменьшении числа слоев коэффициент Пуассона убывает, а модуль Юнга возрастает. Отметим, что при $N = 2$ коэффициент Пуассона почти в два раза меньше ν_∞ . При $N \rightarrow \infty$ упругие модули стремятся к значениям, соответствующим бесконечному кристаллу, которые не зависят от направления деформирования.

В работе [2] исследовалась величина изгибной жесткости для пластин и оболочек наноразмерной толщины. Рассматривался двумерный монокристалл, имеющий $N \geq 2$ слоев в направлении y и $J \gg N$ слоев в направлении x . Предполагается, что каждый атом взаимодействует только с ближайшими



соседями (см. рис. 2). К атомам на боковых гранях кристалла приложены силы Q_n , где индекс n означает номер слоя ($n = 1, 2, \dots, N$). При переходе от одного слоя к другому силы меняются по линейному закону, причем таким образом, что суммарная нагрузка, действующая на боковую грань кристалла, является чисто моментной.

При попытке выразить изгибную жесткость через макроскопические параметры возникают трудности, связанные с неоднозначностью определения толщины H нанокристалла. Предположим, что $N_* = N$. Тогда изгибная жесткость определяется формулой

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

$$D_\infty = \frac{E_\infty H^3}{12}, \quad H = Nh.$$

Здесь D_∞ — значение изгибной жесткости полосы, известное из макроскопической теории упругости. Согласно формуле (3), изгибная жесткость нанокристалла изменяется в пределах $0 \leq D \leq D_\infty$. При малых N она существенно зависит от числа атомарных слоев. При увеличении N она возрастает, стремясь при $N \rightarrow \infty$ к своему значению, принятому в теории упругости. График зависимости изгибной жесткости от числа атомарных слоев представлен на рис. 3, где по оси ординат отложена величина $k = D/D_\infty$.

Эти исследования, несмотря на свою простоту, нам представляются важными. Приведем два разъясняющих примера. Знание модуля Юнга позволяет сравнительно оценивать упругую и поверхностную энергию пленки и предсказывать ее устойчивость (сохранение или несохранение плоского состояния). Знание изгибной жесткости кантилевера АСМ (атомно-силового микроскопа) позволяет пересчитать по деформации консоли силовое воздействие на нанообъект.

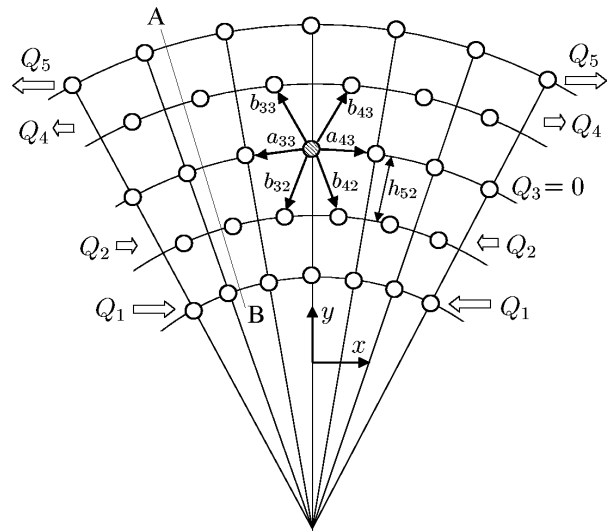


Рис. 2. Изгиб нанокристаллической полосы

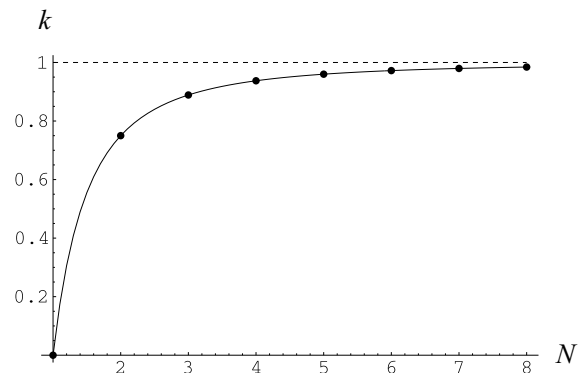


Рис. 3. Зависимость изгибной жесткости от числа атомарных слоев

2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ЖЕСТКОСТИ НАНООБЪЕКТОВ

При изучении стандартных нанообъектов — стержней, пластин и оболочек — было обращено внимание на формулы, связывающие изгибные жесткости и частоты свободных колебаний. Тем самым было предложено обсудить экспериментальные возможности определения частот нанообъектов. Здесь в настоящее время существуют две возможности: применять АСМ или оптические методы, причем в обоих случаях главным вопросом является проблема выделения параметров нанообъектов, поскольку в результате эксперимента, как правило, определяется общий параметр нанообъекта, подложки и измерительного оборудования. Ниже мы покажем, как можно решать эту проблему.

Существует принципиальное отличие условий, в которых проводятся эксперименты с нанообъектами, от условий экспериментов с макрообъектами. При исследовании макрообъектов размеры измерительных приборов (например, тензодатчиков) существенно меньше размеров исследуемого объекта. При исследовании объектов наноразмерного масштабного уровня используется микроразмерное обо-



дование, поэтому важное значение приобретает задача исследования взаимодействия нанобъектов с измерительным оборудованием. В работах [3], [4] эта проблема обсуждалась применительно к задаче экспериментального определения упругих характеристик нанобъектов с помощью АСМ. Фактически, возникают две задачи, лежащие на стыке механики и экспериментальной физики.

Первая задача — определение упругих модулей нанобъектов по частотам системы нанобъект – кантилевер.

Вторая задача — разработка условий эксперимента, при котором из спектра системы нанобъект – кантилевер можно выделить собственные частоты нанобъекта.

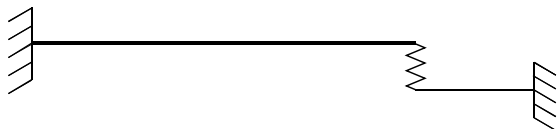


Рис. 4. Кантилевер (слева) и наностержень (справа)

Ниже приводится теоретическая основа определения собственных частот колебаний стержневых конструкций с помощью АСМ. Итак, рассмотрим следующую механическую модель объекта исследования (рис. 4). Стержень, изображенный слева, моделирует кантилевер. Используются обозначения: L_1 — длина кантилевера, D_1 и ρ_1 — его изгибная жесткость и погонная плотность. Стержень, изображенный справа, моделирует исследуемый объект, изгибную жесткость которого требуется определить. Правый конец стержня жестко зашпелен, левый конец взаимодействует с кантилевером. Приняты обозначения: L_2 — длина наностержня, D_2 и ρ_2 — его изгибная жесткость и погонная плотность. Полевое взаимодействие между наностержнем и кантилевером моделируется линейной пружиной жесткостью C , что соответствует линеаризации потенциала Леннарда – Джона в области статически равновесного состояния. В отсчетной конфигурации стержни считаются недеформированными, а пружина — ненапряженной. Решение задачи о свободных колебаниях описанной системы приводит к следующему частотному уравнению:

$$\left[1 + \cos(\mu L_2) \operatorname{ch}(\mu L_2) + \frac{C}{D_2 \mu^3} (\sin(\mu L_2) \operatorname{ch}(\mu L_2) - \cos(\mu L_2) \operatorname{sh}(\mu L_2))\right] (1 + \cos(\lambda L_1) \operatorname{ch}(\lambda L_1)) + \frac{C}{D_1 \lambda^3} [\sin(\lambda L_1) \operatorname{ch}(\lambda L_1) - \cos(\lambda L_1) \operatorname{sh}(\lambda L_1)] (1 + \cos(\mu L_2) \operatorname{ch}(\mu L_2)) = 0. \quad (4)$$

Здесь использованы обозначения $\lambda^2 = \sqrt{\frac{\rho_1}{D_1}} \omega$, $\mu^2 = \sqrt{\frac{\rho_2}{D_2}} \omega$, где ω — собственная частота системы. Как видно из уравнения (4), все собственные частоты зависят от всех параметров системы и из частотного спектра системы невозможно выделить собственные частоты наностержня. Рассмотрим вынужденные гармонические колебания системы. Пусть перемещение u левого конца кантилевера имеет вид

$$u(0, t) = A \sin(\Omega t), \quad A = \text{const}. \quad (5)$$

Экспериментально можно фиксировать не только резкое возрастание амплитуды колебаний, но и обращение амплитуды колебаний в ноль. В системах с распределенными параметрами, состоящими из нескольких тел, обращение амплитуды колебаний в ноль может иметь место в двух случаях: когда точка, в которой измеряется амплитуда, является узлом данной формы колебаний и когда происходит динамическое демпфирование колебаний одного тела на парциальной частоте другого тела (зачастую это явление называют «антирезонанс»). Поставим вопрос так: существуют ли частоты вынужденных колебаний Ω , при которых правый конец кантилевера, контактирующий с нанобъектом, остается неподвижным в любой момент времени? Ответом на этот вопрос будет решение уравнения

$$u(L_1, t) = 0. \quad (6)$$

Решив уравнение (6), можно определить частоты Ω_n , при которых амплитуда колебаний правого конца кантилевера обращается в ноль. Можно показать, что уравнение (6) распадается на два независимых уравнения. Первое уравнение зависит только от параметров кантилевера и не представляет интереса. Второе уравнение имеет вид

$$1 + \cos(\mu_* L_2) \operatorname{ch}(\mu_* L_2) + \frac{C}{D_2 \mu_*^3} [\sin(\mu_* L_2) \operatorname{ch}(\mu_* L_2) - \cos(\mu_* L_2) \operatorname{sh}(\mu_* L_2)] = 0. \quad (7)$$



Изгибную жесткость наностержня можно определять как по резонансным частотам, воспользовавшись уравнением (4), так и по «антирезонансным» частотам, воспользовавшись уравнением (7). Оба уравнения содержат два неизвестных параметра: изгибную жесткость наностержня D_2 и жесткость связи иглы кантилевера с наностержнем C . (Параметры кантилевера известны; массу m_2 и длину L_2 наностержня можно измерить, погонная плотность для однородного стержня вычисляется по формуле $\rho_2 = m_2/L_2$.) Если измерены две частоты (резонансные или «антирезонансные»), их значения можно подставить в соответствующие уравнения (4) или (7), в результате чего задача определения изгибной жесткости наностержня сведется к решению системы двух трансцендентных уравнений относительно двух неизвестных. Следует отметить, что уравнение (7) для «антирезонансных» частот проще уравнения (4), и в отличие от уравнения (4), уравнение (7) не содержит малого параметра $\frac{C}{D_1 \lambda^3}$. Таким образом, с вычислительной точки зрения метод определения изгибной жесткости наностержня по «антирезонансным» частотам имеет преимущество.

В работах [5], [6] предложен метод определения собственных частот некоторых наноструктур (нанотрубок и нанокристаллов), основанный на измерении собственных частот «большой системы», состоящей из вертикально ориентированного массива (решетки) одинаковых нанотрубок или нанокристаллов, выращенных на подложке на одинаковом расстоянии друг от друга (рис. 5).

Теоретически показано, что по найденному спектру «большой системы» (решетка – подложка) и спектру подложки можно определить собственные частоты одного нанобъекта. Это позволяет по экспериментальным данным для «больших систем» определить собственные частоты нанобъекта, которые трудно непосредственно определить другим способом. Приведен пример расчета собственных частот решетки микро- или нанокристаллов из оксида цинка на подложке сапфира.

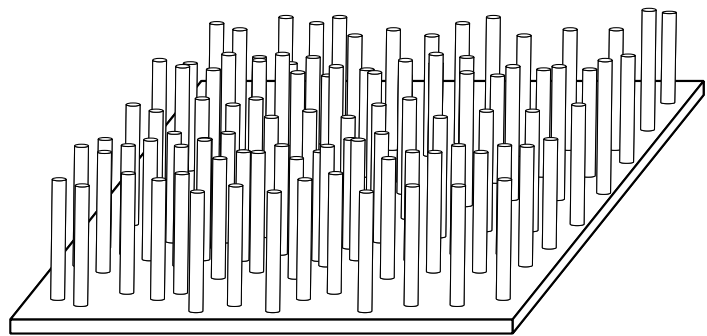


Рис. 5. «Большая система» — решетка нанокристаллов или нанотрубок на подложке

При теоретическом исследовании была рассмотрена стержневая модель «большой системы», состоящая из горизонтального стержня длины L , моделирующего подложку, и N вертикальных стержней длиной H , моделирующих нанобъекты (рис. 6). 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.

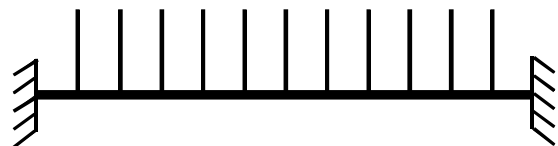


Рис. 6. Стержневая модель

Задача о свободных колебаниях системы решалась в двух постановках: «дискретной» и «континуальной». Анализ уравнений и дискретной, и континуальной модели показал, что существуют две группы решений. К первой группе решений относятся колебания с частотами, определяемыми уравнением

$$1 + \cos(\mu H) \operatorname{ch}(\mu H) = 0, \quad \mu = \sqrt[4]{\frac{\rho_2}{D}} \sqrt{\omega}, \quad (8)$$

где D — изгибная жесткость вертикальных стержней, ρ_2 — их погонная плотность. В данном случае вертикальные стержни движутся как консольные балки. При этом амплитуды колебаний горизонтального стержня малы по сравнению с амплитудами колебаний вертикальных стержней. Ко второй группе решений относятся колебания с частотами, близкими к собственным частотам горизонтального стержня. При этом амплитуды колебаний вертикальных стержней малы по сравнению с амплитудами



колебаний горизонтального стержня. Колебания горизонтального стержня описываются уравнением

$$Cu^{IV} + \rho_1 \ddot{u} = - \sum_{n=1}^N \left[\rho_2 H \ddot{u} \delta(x - nl) + \frac{D\mu}{g(\mu H)} u' \delta'(x - nl) \right], \quad (9)$$

где u — перемещение точек горизонтального стержня, C , ρ_1 — его изгибная жесткость и погонная плотность, n — номер вертикального стержня, параметр $g(\mu H)$ имеет вид

$$g(\mu H) = \frac{1 + \cos(\mu H) \operatorname{ch}(\mu H)}{\sin(\mu H) \operatorname{ch}(\mu H) - \cos(\mu H) \operatorname{sh}(\mu H)}. \quad (10)$$

Если вертикальных стержней достаточно много, можно считать, что они непрерывно распределены по длине горизонтального стержня. Тогда осреднение правой части уравнения (9) позволяет упростить математическую постановку задачи, сведя ее к уравнению

$$u^{IV} - \frac{ND\mu}{Cg(\mu H)L} u'' + \frac{\rho_1}{C} \left(1 + N \frac{\rho_2 H}{\rho_1 L} \right) \ddot{u} = 0. \quad (11)$$

Таким образом, показано, что в случае моделирования «большой системы» и подложки в рамках механики стержней возможно выделение из спектра «большой системы» собственных частот, соответствующих частоте одного нанообъекта.

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 ZnO-нанокристаллы изготавливаются различными методами: термическим испарением, химическим осаждением из газовой фазы, методом импульсного лазерного напыления и др. Высота получаемых 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. В численном эксперименте найдены собственные частоты консольно закрепленного нанокристалла ZnO высотой 1 мкм (отношение высоты к диаметру $h/d = 10$). В качестве модели подложки рассматривался микрокристалл сапфира прямоугольной формы (10×20 мкм), закрепленный по большей стороне. «Большая система» моделировалась описанным микрокристаллом сапфира с набором из восьми одинаковых нанокристаллов, расположенных на большей свободной стороне подложки. Некоторые собственные формы колебаний представлены на рис. 7.

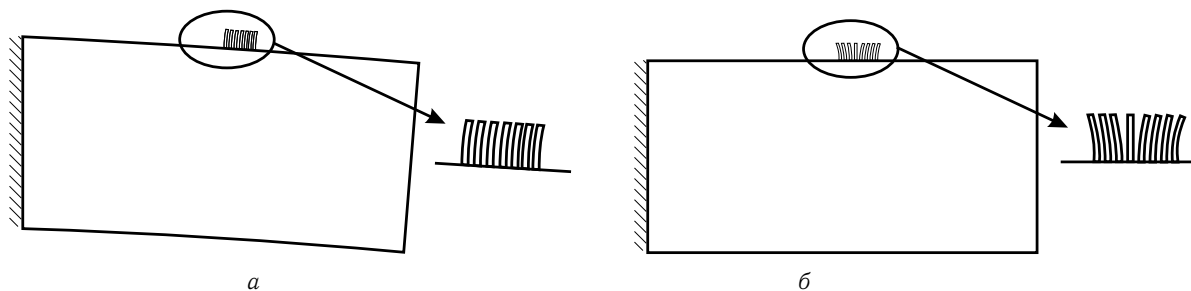


Рис. 7. Собственные моды: а) определяемые подложкой, б) локализованные в решетке нанокристаллов

Форма колебаний, соответствующая первой изгибной моде, изображена на рис. 7, а. Кинематический анализ форм, соответствующих следующим 8 собственным частотам, показывает, что движения «большой системы» локализованы в нанокристаллической «щетке» (рис. 7, б), при этом форма колебаний нанокристаллов соответствует первой собственной частоте. 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. 8, на котором каждое плато на изображенной на нем кривой соответствует собственным частотам единичного нанокристалла.

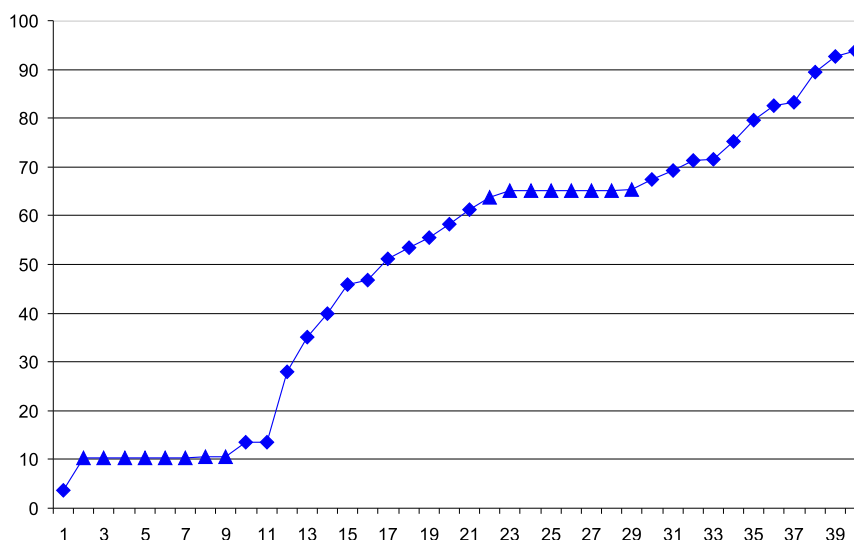


Рис. 8. Распределение собственных частот «большой системы»

Здесь треугольниками обозначены частоты, соответствующие частоте одного нанокристалла, а ромбами — частотам подложки. Тем самым 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.

В случае вертикально расположенных нанотрубок метод позволяет оценить собственные частоты, соответствующие первым изгибным собственным модам нанотрубки. По этим частотам можно определить стержневую изгибную жесткость нанотрубки. Для определения изгибной жесткости нанопленки, из которой изготовлена нанотрубка, необходимо знать собственные частоты нанотрубок, лежащих на подложке.

В работе [7] метод определения собственных частот нанообъектов распространен на случай нанотрубок, закрепленных горизонтально (рис. 9). Показано, что из спектра «большой системы», состоящей из подложки нанотрубок, 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.

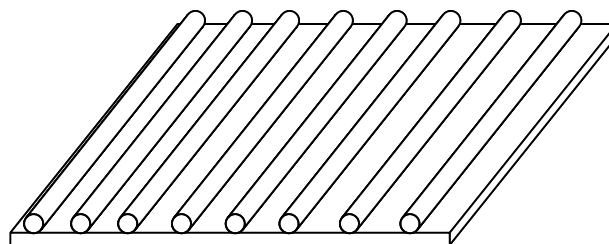


Рис. 9. Система параллельных друг другу нанотрубок, лежащих на подложке

На основании проведенного исследования разработан метод экспериментального определения изгибной жесткости нанооболочек. Идея метода в том, чтобы: 1) возбудить колебания нанооболочки, при которых деформация оболочки связана только с изгибом материала, а растяжение и сдвиг отсутствуют, либо пренебрежимо малы; 2) измерить первые собственные частоты колебаний нанооболочки; 3) по собственным частотам колебаний нанооболочки вычислить ее изгибную жесткость.

Основные трудности на пути реализации этого метода связаны с измерением собственной частоты одного нанообъекта. Предложен метод, позволяющий экспериментально определить первые собственные частоты одной нанотрубки путем сравнения спектра системы решетка – подложка и спектра одной подложки. Метод особенно эффективен и обладает высокой точностью, когда первые собственные частоты нанообъектов сравнимы с первыми собственными частотами подложки. Таким образом, при использовании данного метода определяющим фактором является правильный подбор соотношения геометрических и физических характеристик нанообъектов и подложки.



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В предлагаемой работе мы продемонстрировали широкие возможности методов механики сплошных сред, применительно к проблемам нанотехнологии, а также возможность и необходимость новых научных исследований, ориентированных на задачи наномеханики.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 06-01-00452-а), Фонда содействия отечественной науке, гранта Президента РФ (проекты МД-4829.2007.1, НШ-4518.2006.1).

Библиографический список

1. Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. Аномалии механических характеристик наноразмерных объектов // Докл. АН. 2001. Т. 381, № 3. С. 825–827.
2. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. Особенности расчета изгибной жесткости нанокристаллов // Докл. АН. 2002. Т. 385, № 4. С. 494–496.
3. Иванова Е.А., Индейцев Д.А., Морозов Н.Ф. К вопросу об определении параметров жесткости нанобъектов // Журн. технической физики. 2006. Т. 76, вып. 10. С. 74–80.
4. Иванова Е.А., Индейцев Д.А., Морозов Н.Ф. Об определении параметров жесткости нанобъектов // Докл. АН. 2006. Т. 410, № 6. С. 754–758.
5. Еремеев В.А., Иванова Е.А., Морозов Н.Ф., Соловьев А.Н. Об определении собственных частот нанобъектов // Докл. АН. 2006. Т. 406, № 6. С. 756–759.
6. Еремеев В.А., Иванова Е.А., Морозов Н.Ф., Соловьев А.Н. Об одном методе определения собственных частот упорядоченной системы нанобъектов // ЖТФ. 2007. Т. 77, вып. 1. С. 3–8.
7. Еремеев В.А., Иванова Е.А., Морозов Н.Ф., Строчков С.Е. Собственные колебания нанотрубок // Докл. АН. 2007. Т. 415, № 5. С. 605–610.

УДК 531.38, 575

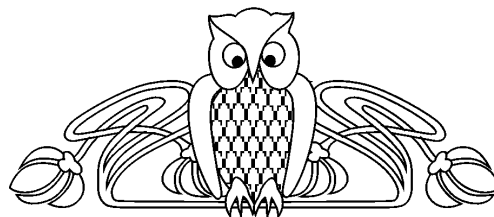
МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЗАМКНУТЫХ МОЛЕКУЛ ДНК

А.А. Илюхин, Д.В. Тимошенко

Таганрогский государственный педагогический институт,
кафедра математического анализа,
E-mail: stab@tspi.org.ru, dmitrytim@yandex.ru

В рамках стержневой модели разработан метод определения параметров пространственной конфигурации молекул нуклеиновых кислот. С помощью разработанного метода получены необходимые и достаточные условия существования семейства замкнутых молекул ДНК. Найденные условия можно использовать при синтезе замкнутых молекул с заданными параметрами.

Математическое моделирование пространственной структуры биологических макромолекул, таких как ДНК и белки, является в настоящее время одной из наиболее бурно развивающихся ветвей молекулярной биологии. Фундаментальность этой проблемы определяется тем, что основные процессы жизнедеятельности клетки во многом зависят от пространственных конфигураций упомянутых макромолекул. В частности, основная биологическая функция молекулы ДНК состоит в хранении и передаче генетической информации, записанной в виде последовательности нуклеотидов в двойной спирали. Связанное с этим основное требование к структуре ДНК — стабильность и сохранность генов — должно вполне определённым образом сочетаться с изменениями её пространственной конфигурации, например, в процессах взаимодействия с белками. Кроме того, в последнее время в фармакологической промышленности интенсивно развивается метод создания лекарственных препаратов на основе ДНК и РНК-содержащих соединений. Он основан на том, что даже сравнительно короткие молекулы ДНК (РНК) (около 100 нуклеотидов) обладают гигантским количеством пространственных форм. Такое разнообразие в принципе позволяет подобрать подходящую по форме молекулу ДНК, закрывающую активные центры патогенного соединения (белка или фермента) и препятствующую



Mathematical Model of the Closed Molecules of DNA

A.A. Iliykhin, D.V. Timoshenko

Within the limits of rod model the method of definition of parameters of a spatial configuration of molecules of nucleic acids is developed. By means of the developed method necessary and sufficient conditions of existence of family of the closed molecules of DNA are received. The found conditions can be used at synthesis of the closed molecules with the set parameters.