

МОДЕЛИРОВАНИЕ СПИРАЛЬНЫХ ДВУХСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУР В ПРОГРАММНОМ КОМПЛЕКСЕ ABAQUS

А.А. Гирченко¹, В.А. Еремеев^{1,2} *д.ф.-м.н., доцент*

¹Южный федеральный университет, ²Южный научный центр РАН, Ростов-на-Дону, Россия

Активные материалы привлекают значительный интерес благодаря широкому использованию при создании различных сенсоров и актуаторов, см., например, [1]. Развитие нанотехнологии позволяет получать широкий спектр наноматериалов, в том числе и получивших название нанооболочек (фуллеренов, однослойных и многослойных нанотрубок и др), обладающих пьезоэффектом, см., например, [2,3]. Одной из перспективных концепций создания наноразмерных сенсоров и актуаторов является изготовление многослойных геликоидальных (хиральных) наноструктур на основе технологии послойного нанесения на твердую подложку материалов с различными свойствами и последующего отделения созданной структуры, которая при отделении сворачивается в спираль за счет действия остаточных напряжений в слоях.

Такие спиральные структуры обладают рядом привлекательных для приложений свойств. Их высокая гибкость, пьезоэффект (если учитывать пьезоэлектрические свойства материалов) и другие важные характеристики делают подобные структуры незаменимыми при использовании в создании наноразмерных сенсоров, переключателей и движителей, а также в других нанoeлектромеханических устройствах (NEMS) [2,3].

Типичные размеры подобных объектов составляют: диаметр спирали 3...5 мкм, шаг 2...5 мкм, толщина слоев 8...20 нм, ширина ленты 1...3 мкм, количество витков 3...10.

При исследовании подобных структур возникает широкий спектр сложных проблем, таких как разномасштабность, нетривиальность геометрии, учет наноразмерных эффектов и др. Существенным моментом конечно-элементного моделирования таких структур является влияние размерного фактора на свойства материала, поскольку известно [2], что свойства наноматериалов отличаются от их макроаналогов. Например, модуль Юнга для нанообразцов оказывается больше [2, 4]. При конечноэлементном моделировании учет наноразмерных эффектов возможен за счет пересчета свойств материала согласно предложенному в [4] закону. Отметим, что исключить некоторые погрешности конечноэлементного моделирования связанных электроупругих процессов можно при помощи учета физических эффектов типа диффузии носителей заряда в полупроводниковых слоях путем использования соответствующих уравнений переноса.

В данной работе проводилось моделирование структур в программном комплексе Simulia ABAQUS [5, 6]. Основное внимание посвящено определению динамических характеристик, в частности, собственных частот и соответствующих форм колебаний данных наноструктур. Данная задача имеет непосредственное отношение к моделированию поведения наносенсоров, использующих изменение собственных частот при присоединении к оболочке других веществ, к использованию спиральных оболочек в качестве нанодвижителей, основанных на возбуждении движения оболочки на частотах, близких к нужной собственной частоте.

Определение нескольких собственных частот спиральной нанооболочки также может служить способом определения изгибной жесткости пленки, из которой образована оболочка [7].

В качестве примера приведен статический и модальный анализ структуры, представляющей двухслойную пленку ($\text{In}_{0.14}\text{Ga}_{0.86}\text{As}/\text{GaAs}$ и $\text{In}_{0.14}\text{Ga}_{0.86}\text{As}/\text{Pzt-5H}$). Все тела моделировались как трехмерные тела. В случае необходимости (для GaAs и Pzt-5H) учитывались пьезоэлектрические свойства материала.

Далее ограничимся рассмотрением задачи, когда один слой состоит из изотропного материала GaAs, а другой из PZT-5H. Ориентация пьезоэлектрического слоя задана так, что ось поляризации проходит по касательной к витку спирали. Данный случай описывает ситуацию, когда оболочка поляризована еще до формирования ее в геликоидальный объект. Таким образом, учитывается криволинейная анизотропия оболочки.

Приведем основные уравнения электроупругости в приближении электростатики при отсутствии массовых сил. Они имеют вид

$$\begin{aligned}\rho \ddot{\mathbf{u}} &= \nabla \cdot \mathbf{y}, \\ \nabla \cdot \mathbf{D} &= 0, \\ \mathbf{y} &= \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{e} \cdot \mathbf{E}, \\ \mathbf{D} &= \mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}, \\ \boldsymbol{\varepsilon} &= \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T), \\ \mathbf{E} &= -\nabla \varphi,\end{aligned}\tag{1}$$

где \mathbf{u} – вектор перемещения, \mathbf{E} – вектор напряженности электрического поля, выраженный через потенциал φ , $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений, \mathbf{D} – вектор электрической индукции, $\boldsymbol{\varepsilon}$ – тензор деформации, ρ – плотность, \mathbf{C} , \mathbf{e} и \mathbf{d} – соответственно тензоры упругих, пьезоэлектрических и диэлектрических постоянных, ∇ – набла оператор Гамильтона.

Систему (1) замыкают соответствующие краевые условия. А именно, пусть поверхность тела Γ состоит

из двух частей: $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$ ($\Gamma_1 \cap \Gamma_2 = 0$). Пусть на части Γ_1 заданы перемещения \mathbf{u}_0 , а на Γ_2 – нагрузки \mathbf{f} . Соответствующие краевые условия задаются формулами

$$\mathbf{u}|_{\Gamma_1} = \mathbf{u}_0, \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{y}|_{\Gamma_2} = \mathbf{f} \quad (2)$$

Здесь \mathbf{n} – вектор единичной нормали к Γ . Для пьезоэлектрика механические краевые условия (2) дополняются краевыми условиями электрической природы. Пусть $\Gamma = \Gamma_3 \cup \Gamma_4$ ($\Gamma_3 \cap \Gamma_4 = 0$), где на Γ_3 задан электрический потенциал φ_0 , а на Γ_4 – поверхностный заряд q :

$$\varphi|_{\Gamma_3} = \varphi_0, \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{D}|_{\Gamma_4} = q \quad (3)$$

Задача на собственные колебания сводится к решению однородной краевой задачи (1)-(3), т.е. при $\mathbf{u}_0=0$, $\mathbf{f}=0$, $\varphi_0=0$, $q=0$. При этом решение разыскивается в виде $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{U}(\mathbf{x})e^{i\omega t}$, $\varphi(\mathbf{x}, t) = \Phi(\mathbf{x})e^{i\omega t}$, где ω – частота колебаний. С практической точки зрения обычно интересно определение нескольких первых собственных частот.

Геометрию структуры определим следующими параметрами: толщина первого слоя $\text{In}_{0,14}\text{Ga}_{0,86}\text{As}$ – 11 nm; толщина второго слоя Pzt-5H – 16 nm; диаметр – 2.02 μm ; высота витка – 4.7 μm ; количество витков – 9 (рис. 1). Физические свойства материала оболочки для расчетов были взяты из базы данных ФТИ РАН им. Иоффе (<http://www.ioffe.ru/>). Правый конец спирали жестко заземлен. Остальная поверхность – свободна. Для потенциала φ рассматривались краевые условия второго рода (3)₂.

При конечно-элементном моделировании использованы призматические 8-узловые конечные элементы в гибридной формулировке (в обозначениях Abaqus – C3D8E). Конечно-элементная сетка состоит из 13104 элементов, что соответствует 34 858 узлам и 94 418 неизвестным. В ходе анализа различных методов решения задачи на собственные значения, использованных в Abaqus, показано, что для данной задачи наиболее эффективно работает решатель по методу Ланцоша.

Первые пять собственных частот оказались равными $2.7 \cdot 10^4$, $2.8 \cdot 10^4$, $1.4 \cdot 10^5$, $9.6 \cdot 10^5$, $9.9 \cdot 10^5$ Hz. Соответствующие им моды колебаний показаны на рис. 1. Наряду с изгибными модами здесь присутствуют также и более сложные формы колебаний, сопровождающиеся закручиванием и удлинением спиральной оболочки.

Также рассматривались задачи о вынужденных колебаниях, вызванных приложения переменного электрического потенциала.

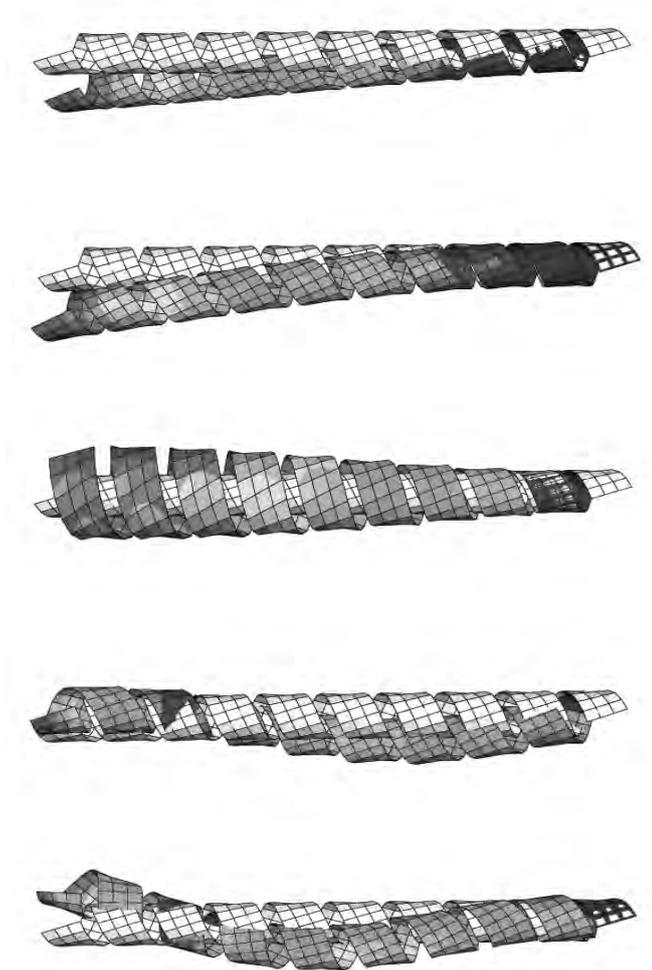


Рисунок 1

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Vasilescu R., Dancila D. S., Modeling and analysis of active flap using coiled bender piezoelectric actuators. *J. Intelligent Material Systems and Structures*. 2004. **15**. 783.
2. Bushan B. (ed.) Springer Handbook of Nanotechnology, 2nd Edition. Springer Science+Business Media, Berlin et al., 2007.
3. Prinz V. Ya., A new concept in fabricating building blocks for nanoelectronic and nanomechanic devices. *Microelectronics Eng.* 2003. **69**. 466.
4. Duan H. L., Wang J., Karimhaloo B. L., Theory of Elasticity at the Nanoscale. *Advances in Applied Mechanics*. 2008. **42**. 1.
5. Манилык Т., Ильин К., Практическое применение программного комплекса Abaqus в инженерных задачах (Версия 6.5). МФТИ, ТЕСИС, 2006.
6. Крылов Я. В., Курс лекций по основам численного расчета на прочность в программном комплексе ABAQUS 6.4 / CAE. ФАЛТ МФТИ, ТЕСИС, 2003.
7. Иванова Е.А., Морозов Н.Ф. Об одном подходе к экспериментальному определению изгибной жесткости нанооболочек. *Доклады РАН*. 2005. **400**. 475.