

УДК 539.3:534.1

© 2003 г. С.А. ЗЕГЖДА, Н.Ф. МОРОЗОВ, Б.Н. СЕМЕНОВ

ДИНАМИКА ОТСЛОЕНИЯ ПРЕДВАРИТЕЛЬНО НАПРЯЖЕННОЙ ТОНКОЙ ДВУХСЛОЙНОЙ ПЛАСТИНЫ

При производстве полупроводниковых наномасштабных гетероструктур основные успехи достигнуты в изготовлении нульмерных (квантовые точки), одномерных (квантовые проволоки) и двумерных (пленки) наноструктур. В то же время, изготовление трехмерных полупроводниковых наноструктур сопряжено с определенными технологическими трудностями. Предложенная в Институте физики полупроводников СО РАН концепция технологического решения задачи изготовления микро- и нанотрубок, свойства которых модулированы в нанометровом масштабе; основана на возможности самопроизвольного сворачивания в трубки высоконапряженных двухслойных пластин, освобождаемых при помощи травления от удерживающей подложки.

В настоящей работе делается попытка методами классической механики при помощи уравнений Лагранжа второго рода с неудерживающими связями моделировать динамику процесса сворачивания двухслойной сверхнапряженной пластины в нанотрубку и на основе построенного решения найти уточненную зависимость ее диаметра от параметров слоев пластины. В рамках этой модели процесс отделиния бислоя от подложки рассматривается как процесс разрушения, инициированного ослаблением связей между напряженным бислоем и подложкой.

1. Введение. В современной микроэлектронике при производстве полупроводниковых наномасштабных гетероструктур широко используется способность напряженных наномасштабных структур к самоорганизации. Основные успехи достигнуты в изготовлении нульмерных (квантовые точки), одномерных (квантовые проволоки) и двумерных (пленки) наноструктур. При этом помимо решения чисто технологических проблем на основе определенных физических допущений проведено исследование свойств подобных структур и предложены модели их возникновения [1–5].

В то же время, изготовление трехмерных полупроводниковых наноструктур сопряжено с определенными технологическими трудностями. В 90-е годы в Институте физики полупроводников СО РАН была предложена концепция технологического решения задачи изготовления микро- и нанотрубок, свойства которых модулированы в нанометровом диапазоне [6, 7].

Суть этой концепции изготовления полупроводниковых нанотрубок можно схематично описать следующим образом. На достаточно толстую подложку наносятся через тонкий промежуточный слой последовательно наномасштабные слои с различными постоянными кристаллической решетки. Причем верхний слой имеет меньшую постоянную решетки чем расположенный под ним слой. В результате образуется напряженная наногетероструктура, которая удерживается в плоском состоянии достаточно толстой подложкой. При травлении вспомогательного слоя напряженный бислой освобождается от удерживающих связей и сворачивается в трубку, диаметр которой может быть оценен через величину рассогласования кристаллических решеток и параметры обра-

зующих его слоев. Если ввести параметр рассогласования кристаллических решеток слоев $\Delta a/a$, то описанная выше ситуация может быть смоделирована с позиций механики деформируемого твердого тела следующим образом. Предварительно напряженная тонкая двухслойная пластина прикреплена к жесткому основанию. При этом в верхнем слое пластины была задана начальная однородная деформация, равная параметру рассогласования кристаллических решеток $\epsilon_0 = \Delta a/a$, после чего он был идеально соединен с нижним слоем. Затем эта напряженная конструкция прикреплена нижним слоем к плоскому основанию. При травлении последняя связь разрывается и происходит самопроизвольное закручивание тонкой пластины.

В настоящей работе делается попытка методами классической механики при помощи уравнений Лагранжа второго рода с неудерживающими связями [8] моделировать динамику процесса сворачивания двухслойной сверхнапряженной пластины в нанотрубку и на основе построенного решения найти уточненную зависимость ее диаметра от параметров слоев пластины. В рамках этой модели процесс отделения бислоя от подложки рассматривается как процесс разрушения, инициированного ослаблением связей между напряженным бислоем и подложкой.

Применение данного подхода к описанию процесса формирования многослойных трубок, т.е. закручивания бислоя на углы значительно большие 2π , осуществлено при предположении, что радиус образующейся трубки существенно больше толщины бислоя.

2. Постановка задачи и равновесное состояние. Рассматривается тонкая двухслойная пластина длины L с упругими постоянными E_1, ν_1 и E_2, ν_2 . Первый слой толщины h_1 приклеен к жесткому полупространству. Второй слой толщины h_2 , получив начальную деформацию растяжения ϵ_0 , приклеивается к первому слою.

Пусть участок пластины длины l отслоился и свернулся в кольцо радиуса R . Определим этот радиус из уравнений равновесия, полагая, что при изгибе данной пластины справедлива гипотеза плоских сечений. Пусть ϵ и $\kappa = 1/R$ – деформации растяжения и изгиба нейтрального слоя. Тогда плотность потенциальной энергии изогнутой в кольцо пластины такова

$$\Pi(\epsilon_0, \epsilon, \kappa) = \frac{E_1}{2(1-\nu_1^2)} \left[\int_{h_1-d}^{-d} (\epsilon - \kappa z)^2 dz + \eta \int_{-d}^{-h_2-d} (\epsilon_0 + \epsilon - \kappa z)^2 dz \right]$$

$$\eta = \frac{E_2(1-\nu_1^2)}{E_1(1-\nu_2^2)}, \quad d = \frac{(\xi^2 \eta - 1)h_1}{2(1 + \xi \eta)}, \quad \xi = \frac{h_1}{h_2}$$

Квадратичную форму Π переменных ϵ_0, ϵ и κ представим в виде

$$\Pi = (a_{11}\epsilon^2 + a_{22}h_1^2\kappa^2 + a_{10}\epsilon\epsilon_0 + a_{20}h_1\kappa\epsilon_0) \frac{E_1 h_1}{2(1-\nu_1^2)} + \Pi_0 \quad (2.1)$$

$$\Pi_0 = \frac{E_2 h_2 \epsilon_0^2}{2(1-\nu_2^2)}, \quad a_{11} = 1 + \xi \eta, \quad a_{10} = 2\xi \eta \quad (2.2)$$

$$a_{22} = \frac{1 + (4 + 6\xi + 4\xi^2)\eta + \xi^4 \eta^2}{12(1 + \xi \eta)}, \quad a_{20} = \frac{\xi \eta (1 + \xi)}{1 + \xi \eta}$$

Заданием величин l, ϵ и κ однозначно определяется и положение и напряженно-деформированное состояние во всех точках пластины за исключением тех ее точек, которые принадлежат промежуточному участку, соединяющему приклеенную часть

пластины с той, которая свернулась в кольцо. Следовательно, для модели, в которой потенциальная и кинетическая энергия этого участка не учитываются, величины l , ε и κ можно рассматривать как обобщенные лагранжевы координаты.

Потенциальная энергия пластины V и возможная элементарная работа δA , затрачиваемая на отслоение, в этих координатах таковы:

$$V = \int_0^{L-l} \Pi_0 dx + \int_{L-l}^L \Pi(\varepsilon_0, \varepsilon, \kappa) dx \quad (2.3)$$

$$\delta A = -\gamma \delta l, \quad \delta l > 0 \quad (2.4)$$

Здесь γ – плотность энергии, необходимая для образования трещины единичной длины, т.е. аналог плотности поверхностной энергии Гриффитса.

Так как $\delta A < 0$ при $\delta l > 0$ и $\delta A = 0$ при $\delta l < 0$, то из принципа возможных перемещений, записанного в обобщенных координатах l , ε и κ следует, что уравнения равновесия имеют вид

$$\frac{\partial V}{\partial \varepsilon} = l \frac{\partial \Pi}{\partial \varepsilon} = 0, \quad \frac{\partial V}{\partial \kappa} = l \frac{\partial \Pi}{\partial \kappa} = 0, \quad -\frac{\partial V}{\partial l} - \gamma = \Pi_0 - \Pi - \gamma \leq 0$$

Используя выражение (2.1), при $l \neq 0$, получаем систему для определения равновесных значений деформации растяжения и изгиба нейтрального слоя

$$2a_{11}\varepsilon + a_{10}\varepsilon_0 = 0, \quad 2a_{22}h_1\kappa + a_{20}\varepsilon_0 = 0 \quad (2.5)$$

Таким образом, при равновесии имеем

$$\varepsilon = \varepsilon_* = -\frac{\xi\eta}{1+\xi\eta}\varepsilon_0, \quad \kappa = \kappa_* = \frac{2\xi\eta p \varepsilon_0}{(1+\xi)h_1} \quad (2.6)$$

$$\frac{\xi\eta}{1+\xi\eta}(1+p)\varepsilon\Pi_0 \leq \gamma \quad (2.7)$$

$$p = \frac{\Pi(0, 0, \kappa_*)}{\Pi(0, \varepsilon_*, 0)} = \frac{3(1+\xi)^2}{1+(4+6\xi+4\xi^2)\eta+\xi^4\eta^2} \quad (2.8)$$

3. Уравнения динамики. Неравенство (2.7) при $\Pi_0 = \Pi_0^{cr}$ переходит в равенство. Если же $\Pi_0 > \Pi_0^{cr}$, то равновесие пластины с отслоившейся частью нарушится и начнется отслоение. Введем

$$q = (\Pi_0 - \Pi_0^{cr})/\Pi_0, \quad 0 < q \ll 1 \quad (3.1)$$

Отсюда и из выражения (2.8) следует, что

$$\gamma = \frac{\xi\eta(1+p)(1-q)}{1+\xi\eta}\Pi_0 \quad (3.2)$$

При описании динамики образования трубки пренебрежем кинетической энергией, связанной со сжатием нейтрального слоя, то есть будем считать, что эта энергия такова:

$$T = (\rho_1 h_1 + \rho_2 h_2) \left(l - R \sin \frac{l}{R} \right) \left[\left(\frac{dl}{dt} \right)^2 + \left(\frac{dr}{dt} \right)^2 \right] \quad (3.3)$$

Здесь ρ_1 и ρ_2 – плотности материала соответственно первого и второго слоя. При этом выражении для кинетической энергии уравнение по ϵ в системе (2.5) не изменится и потому $\epsilon = \epsilon_*$. Функция $\Pi(\epsilon_0, \epsilon_*, 1/R)$, как следует из формул (2.1), (2.2), (2.5), (2.6), (2.8), может быть представлена в виде

$$\Pi = \left(1 - \frac{\xi\eta}{1 + \xi\eta}\right)\Pi_0 - \frac{\xi\eta}{1 + \xi\eta} \frac{R_*}{R} \left(2 - \frac{R_*}{R}\right)p \quad (3.4)$$

$$R_* = 1/\kappa_*$$

Используя выражения (2.3), (2.4), (3.2), (3.3) и (3.4), составим уравнения Лагранжа второго рода относительно обобщенных координат l и R . Переходя в этих уравнениях к безразмерным переменным

$$\varphi = \frac{l}{R_*}, \quad r = \frac{R}{R_*}, \quad \tau = \omega t, \quad \omega^2 = \frac{\Pi_0 \xi \eta}{(\rho_1 h_1 + \rho_2 h_2) R_*^2 (1 + \xi \eta)} \quad (3.5)$$

получаем систему дифференциальных уравнений для $\varphi(\tau)$ и $r(\tau)$:

$$\begin{aligned} 2\ddot{\varphi} \left(\varphi - r \sin \frac{\varphi}{r}\right) + (\dot{\varphi}^2 - \dot{r}^2) \left(1 - \cos \frac{\varphi}{r}\right) - \frac{2\dot{r}\dot{\varphi}}{r} \left(r \sin \frac{\varphi}{r} - \varphi \cos \frac{\varphi}{r}\right) &= q(1+p) - \frac{p(1-r)^2}{r^2} \\ 2\dot{r} \left(\varphi - r \sin \frac{\varphi}{r}\right) - (\dot{\varphi}^2 - \dot{r}^2) \left(\frac{\varphi}{r} \cos \frac{\varphi}{r} - \sin \frac{\varphi}{r}\right) - 2\dot{\varphi}\dot{r} \left(1 - \cos \frac{\varphi}{r}\right) &= \frac{2p\varphi(1-r)}{r^3} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Здесь точкой обозначена производная по безразмерному времени τ .

4. Анализ уравнений динамики и обсуждение результатов их численного интегрирования. Из теоремы об изменении кинетической энергии пластины следует, что при нулевых начальных скоростях будем иметь $T = (\Pi_0 - \Pi - \gamma)(l - l_0)$. Используя выражения (3.2)–(3.5), получаем

$$\left(\varphi - r \sin \frac{\varphi}{r}\right)(\dot{\varphi}^2 + \dot{r}^2) = \left[q(1+p) - \frac{p(1-r)^2}{r^2}\right](\varphi - \varphi_0) \quad (4.1)$$

Система уравнений (3.6) имеет, таким образом, интеграл энергии. В этом можно убедиться и непосредственно.

При наличии интеграла энергии действие по Лагранжу [8]:

$$W = \int_0^t 2T dt$$

имеет наименьшее значение. Из выражения (4.1) следует, что в рассматриваемой задаче в соответствии с принципом Лагранжа минимальным должен быть следующий интеграл

$$\begin{aligned} J &= q \int_0^t f(r)(\varphi - \varphi_0) d\tau \\ f(r) &= 1 + p - \frac{p(1-r)^2}{qr^2} \end{aligned} \quad (4.2)$$

Так как $f(r) > 0$, то

$$|r - 1| < r \sqrt{\frac{q(1+p)}{p}} \quad (4.3)$$

Параметр p , введенный по формуле (2.8), характеризует отношение потенциальной энергии изгиба трубки к потенциальной энергии ее сжатия в условиях равновесия трубки. Если эти энергии соизмеримы, тогда, как следует из формул (4.3), всегда найдется такое $q \ll 1$, при котором функция $r(\tau)$ будет отличаться от единицы с заданной степенью точности. Уравнение (3.6) при $r = 1$, $\dot{r} = 0$ принимает вид

$$2\ddot{\phi}(\phi - \sin \phi) + \dot{\phi}^2(1 - \cos \phi) = q(1+p) \quad (4.4)$$

Это уравнение имеет интеграл энергии

$$\dot{\phi}^2(\phi - \sin \phi) = q(1+p)(\phi - \phi_0)$$

из которого следует, что при достаточно большом ϕ будем иметь

$$\dot{\phi} = \sqrt{q(1+p)} \quad (4.5)$$

Сравнение функций $\phi(\tau)$, найденных в интервале $0 \leq \tau \leq 50$ при $q = 0.01$, $p = 4/11$, $3/4$, $16/11$ посредством численного интегрирования системы (3.6) при начальных данных $\phi(0) = 0.01$, 0.1 , 0.5 , $r(0) = 1$, $\dot{\phi}(0) = \dot{r}(0) = 0$, с функциями $\phi(\tau)$, удовлетворяющими уравнению (4.4) в том же интервале времени и при тех же начальных данных, показывает их незначительное отличие.

При $q = 0.1$ и тех же значениях параметра p и начальных условиях значения функции $\phi(\tau)$, удовлетворяющей системе (3.6), меньше значений функции $\phi(\tau)$, задаваемой уравнением (4.4). Расчеты показывают, что при $q = 0.1$ и $p = 4/11$, $3/4$, $16/11$ в интервале $\pi \leq \phi \leq 50$ угол наклона касательной к кривым $\phi(\tau)$, удовлетворяющим системе (3.6) меньше значений, вычисленных по формуле (4.5), соответственно на 6, 5, 5%. Погрешность формулы (4.5) определялась и для других значений параметров p и q , а также при больших временах. Эти вычисления показали, что при $q \leq 0.1$ и $p \geq 1$ с погрешностью не более 6% формулу (4.5) можно рассматривать как закон образования нанотрубки.

Рассмотрим теперь случай, когда параметры p и q соизмеримы. Пусть $p = q \ll 1$. Тогда, пренебрегая в выражении для функции $f(r)$, входящей в интеграл (4.2), величиной p по сравнению с единицей, получаем $f(r) = (2r - 1)/r^2$. Эта функция при $r = 1$ имеет максимум, а ее производная в интервале $1 < r < \infty$ отрицательна. Поэтому решение системы (3.6), при котором $r \rightarrow \infty$ при $\tau \rightarrow \infty$ будет минимизировать интеграл (4.2).

Расчеты показали, что $r \rightarrow \infty$ при $\tau \rightarrow \infty$ не только при $q = p$, но и при $p < q$. Таким образом, образование нанотрубки возможно только при $p > q$. В частности, при $p = 2q = 0.2$ максимальное значение величины r достигается при $\tau = 36$ равно 1.8. Однако затем амплитуда колебаний функции $r(\tau)$ начинает убывать и при $\tau = 200$ она становится приближенно равной 0.2. Заметим, что погрешность формулы (4.5) в интервале $\pi \leq \phi \leq 200$ лежит в пределах 6%.

4. Заключение. Таким образом показано, что основанный на применении методов классической механики подход может быть успешно применен для моделирования нестационарного отслоения сверхнапряженной двухслойной тонкой пластины от жесткого основания и дает возможность не только оценить диаметр образующейся трубки, но и описать собственно динамику процесса отслоения. Предложенный подход может быть распространен и на другие задачи отслоения, в частности, для моделирования процесса отслоения многослойного покрытия при термонагрузении. При исследова-

нии задач деформирования наноразмерных объектов следует учитывать влияние наноразмерности на упругие свойства материала [1–3].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 03-01-00721).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ru C.Q.* Effective bending stiffness of carbon nanotubes // *Phys. Rev. B.* 2000. V. 62. No. 15. P. 9973–9976.
2. *Miller R.E., Shenoy V.B.* Size-dependent elastic properties of nanosized structural elements // *Nanotechnology.* 2000. V. 11. No. 3. P. 139–147.
3. *Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.* Аномалии механических характеристик наноразмерных объектов // *ДАН.* 2001. Т. 381. № 3. С. 345–347
4. *Кукушкин С.А., Осипов А.В.* Процессы конденсации тонких пленок // *Успехи физ. наук.* 1998. Т. 168. № 10. С. 1083–1116.
5. *Леденцов Н.Н., Устинов В.М., Шукин В.А., Копьев П.С., Алферов Ж.И., Бимберг Д.* Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры // *Физика и техника полупроводников.* 1998. Т. 32. № 4. С. 385–410.
6. *Prinz V.Ya., Grützmacher D., Beyer A., David C., Ketterer B., Deckardt E.* A new technique for fabricating three-dimensional micro- and nanostructures of various shapes // *Nanotechnology.* 2001. V. 12. No. 4. P. 399–402.
7. *Prinz V.Ya., Chekhovskiy A.V., Preobrazhenskii V.V., Semyagin B.R., Gutakovskiy A.K.* A technique for fabricating InGaAs/GaAs nanotubes of precisely controlled lengths // *Nanotechnology.* 2002. V. 13. No. 2. P. 231–233.
8. *Поляхов Н.Н., Зегжда С.А., Юшков М.П.* Теоретическая механика. М.: Высш. шк. 2000. 592 с.

С.-Петербург

Поступила в редакцию
14.11.2002