

## КОНТИНУАЛЬНЫЕ И ДИСКРЕТНЫЕ МОДЕЛИ В ЗАДАЧЕ УСТОЙЧИВОСТИ ТРЕХСЛОЙНОЙ НАНОПЛАСТИНЫ

Морозов Н.Ф., Семенов Б.Н., Товстик П.Е.

*Stability of thin three-layered pre-stressed elastic plate is investigated. As the three dimensional equations of the classical theory elasticity so the discrete approach are used. The critical values of the initial deformations are found. It is established that the double-periodic buckling mode often is localized near the plate surface.*

**1. Введение.** При создании наноструктур изготавливаются тонкие многослойные пластины с начальными деформациями в слоях. После отделения от подложки в слоях пластины возникают начальные напряжения, следствием которых являются деформации пластины. Простейшим видом деформаций являются деформации скручивания, исследованные в работе [1]. Однако, если начальные напряжения самоуравновешены по толщине пластины, деформации скручивания не имеют места. В этом случае возможна потеря устойчивости плоской формы равновесия пластины. Именно эта задача рассматривается ниже в рамках, как классической теории упругости, так и при дискретном моделировании пластины системой атомов с учетом их межатомного взаимодействия. Как правило, стремятся избежать потери устойчивости. Здесь же, напротив, желательнее получить условия, при которых пластина теряет устойчивость, и исследовать после-критическую форму равновесия. Дело в том, что нанопластина, поверхность которой покрыта периодической системой горбов и вмятин, может быть использована в задачах наноизлучения.

**2. Континуальный подход.** Рассмотрим трехслойную бесконечную пластину толщины  $h$  из трансверсально изотропных однородных материалов с одинаковыми по толщине и по упругим свойствам крайними слоями. Крайние слои пластины сжаты в своей плоскости начальным напряжением  $\sigma_1^0 < 0$ , а средний слой растянут напряжением  $\sigma_2^0 > 0$ , причем выполнено условие самоуравновешенности

$$2\sigma_1^0 h_1 + \sigma_2^0 h_2 = 0, \quad (2.1)$$

где  $h_1$  и  $h_2$  -- толщины крайних слоев и среднего слоя ( $h = 2h_1 + h_2$ ).

Уравнения равновесия предварительно напряженной пластины имеют вид

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \sigma^0(z) \left( \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_2^2} \right) = 0, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (2.2)$$

где  $x_1, x_2, x_3 = z$  -- декартовы координаты в тангенциальных и нормальном направлениях,  $u_i$  --- соответствующие смещения,  $\sigma_{ij}$  -- дополнительные напряжения при бифуркации,  $\sigma^0(z)$  -- кусочно-постоянная функция со значениями  $\sigma_1^0$  и  $\sigma_2^0$ .

Для трансверсально изотропного материала выражения деформаций через напряжения имеют вид

$$\begin{aligned} e_{11} &= \frac{1}{E}(\sigma_{11} - \nu\sigma_{22}) - \frac{\nu'}{E'}\sigma_{33}, & e_{13} &= \frac{1}{G'}\sigma_{13}, & (1 \Leftrightarrow 2) \\ e_{33} &= -\frac{\nu'}{E'}(\sigma_{11} + \sigma_{22}) + \frac{1}{E'}\sigma_{33}, & e_{12} &= \frac{1}{G}\sigma_{12}, & G = \frac{E}{2(1+\nu)} \end{aligned} \quad (2.3)$$

где упругие модули  $E, E', G', \nu, \nu'$  -- кусочно постоянны и удовлетворяют соотношениям [2]

$$\nu < 1 - 2(\nu')^2 (E/E'), \quad \nu' < (E'/E)^{1/2}. \quad (2.4)$$

Деформации равны

$$e_{ii} = \frac{\partial u_i}{\partial x_i}, \quad e_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}, \quad i \neq j. \quad (2.5)$$

Поверхности пластины свободны от напряжений, что дает граничные условия

$$\sigma_{i3} = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad \text{при } z = 0, \quad z = -h. \quad (2.6)$$

Ищем двояко-периодическое решение системы (2.2) в виде

$$\begin{aligned} u_1(x_1, x_2, z) &= u_1(z) \cos(r_1 x_1) \sin(r_2 x_2), \\ u_2(x_1, x_2, z) &= u_2(z) \sin(r_1 x_1) \cos(r_2 x_2), \\ u_3(x_1, x_2, z) &= u_3(z) \sin(r_1 x_1) \sin(r_2 x_2), \end{aligned} \quad (2.7)$$

с неизвестными волновыми числами  $r_1$  и  $r_2$ . Тогда система уравнений (2.2)--(2.5) может быть записана в виде системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений 6-го порядка относительно неизвестных функций  $u_i(z), \sigma_{i3}(z)$ , которые остаются непрерывными при переходе от одного слоя к другому. Ищем ненулевое решение этой системы, удовлетворяющее условиям (2.6).

Эта задача в общем случае не имеет решения, поэтому введем формальный параметр нагружения  $q$ , заменив в формулах (2.2) начальные напряжения на  $q\sigma^0(z)$ . Тогда задача становится самосопряженной краевой задачей на собственные значения, имеющей дискретный спектр. Пусть  $q_0 = q_0(r_1, r_2)$  -- наименьшее положительное собственное значение. Несложно проверить, что функция  $q_0(r_1, r_2)$  не зависит от волновых чисел  $r_1$  и  $r_2$  по отдельности, а зависит от величины  $r = \sqrt{r_1^2 + r_2^2}$ . Критическим значением параметра нагружения будет величина

$$q^* = \min_{r_1, r_2} q_0(r_1, r_2) = \min_r q_0(r). \quad (2.8)$$

Рассматриваемая система распадается на системы уравнений четвертого и второго порядков. Первая из них служит для определения критической нагрузки и имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{dv}{dz} &= -r^2 u_3 + \frac{s}{G'}, & \frac{du_3}{dz} &= B_1 v + B_2 \sigma_{33}, \\ \frac{ds}{dz} &= (B_3 + q\sigma^0) r^2 v - B_1 r^2 \sigma_{33}, & \frac{d\sigma_{33}}{dz} &= s + q\sigma^0 u_3, \end{aligned} \quad (2.9)$$

где  $v = u_1 r_1 + u_2 r_2$ ,  $s = \sigma_{13} r_1 + \sigma_{23} r_2$ , а коэффициенты для трансверсально изотропной оболочки равны

$$B_1 = \frac{E\nu'}{E'(1-\nu)}, \quad B_2 = \frac{1-\nu-2(\nu')^2 E/E'}{E'(1-\nu)}, \quad B_3 = \frac{E}{1-\nu^2}. \quad (2.10)$$

и для изотропной оболочки равны

$$G' = G, \quad B_1 = \frac{\nu}{1-\nu}, \quad B_2 = \frac{(1+\nu)(1-2\nu)}{E(1-\nu)}, \quad B_3 = \frac{E}{1-\nu^2}. \quad (2.11)$$

При численном интегрировании возникает необходимость рассмотрения весьма больших либо малых значений параметров, что приводит к потере точности. Поэтому исходная задача в силу симметрии может быть заменена двумя задачами с половинной длиной промежутка интегрирования -- для четной и для нечетной относительно середины пластины функции  $u_3(z)$ . Для обеих задач ставим условия  $s(0) = \sigma_{33}(0) = 0$ . Для четной задачи при  $z = -h/2$  берем условия  $v = \sigma_{33} = 0$  и для нечетной -- условия  $u_3 = s = 0$ .

При используемом здесь линейном приближении критической деформации соответствует множество форм потери устойчивости при  $r = const$ . Нелинейный анализ в закритической стадии [3] показывает, что форме потери устойчивости при  $r_1 = r_2$  соответствует минимум потенциальной энергии деформации.

**3. Некоторые численные результаты.** Для первого слоя (при  $-h_1 \leq z \leq 0$ ) упругие модули снабжаем нижним индексом 1, а для второй – индексом 2. Не нарушая общности считаем  $E_1 = 1, h_1 = 1$ . Нас интересуют лишь случаи, когда докритические деформации пластины существенно меньше единицы (скажем,  $|e| \leq 0.1$ ). Удобно выражать результат через начальную деформацию  $e < 0$  первого слоя. Считая параметром нагружения в (2.9) величину  $q = -e$ , получим

$$\sigma_1^0 = -\frac{1}{1-\nu_1}, \quad \sigma_2^0 = \frac{2}{h_2(1-\nu_1)}. \quad (3.1)$$

Рассмотрим сначала слои из изотропного материала. Численный анализ показал, что приемлемые результаты (т.е.  $q \ll 1$ ) получаются лишь в случае, когда средний слой является толстым и мягким (т.е.  $h_2 \gg 1, E_2 \ll 1$ ). При таком соотношении между параметрами рассматриваемую задачу можно заменить на задачу об устойчивости сжатой пластины, лежащей на мягком упругом основании [3,4]. Для  $\nu = 0.3$  некоторые результаты приведены в таблице 1. Видим, что приемлемые результаты получаются лишь при  $E_2 \leq 0.1$ .

$E_2$	$q^*$	$r^*$
0.3	0.183	0.67
0.1	0.096	1.27
0.03	0.043	2.06

Таблица 1. Критические деформации для изотропной пластины.

При численном интегрировании системы (2.9) обнаружено, что при значениях  $E_2$  порядка единицы критические нагрузки, соответствующие четной и нечетной формам потери устойчивости, практически не различаются, а сами формы локализуются в окрестности свободной поверхности пластины. Поэтому ниже в упрощенной постановке рассматриваются такие формы. Для изотропной пластины эта задача решена в [3].

#### 4. Формы потери устойчивости, локализованные вблизи свободной поверхности.

Рассмотрим трансверсально изотропное полупространство, равномерно сжатое в горизонтальной плоскости напряжением  $\sigma^0$ . Для исследования его устойчивости используем систему (2.9) при тех же условиях на свободной поверхности и при условиях затухания при  $z \rightarrow -\infty$ . Общее решение системы (2.9), затухающее при  $z \rightarrow -\infty$ , имеет вид

$$v = C_1 \exp(r\lambda_1 z) + C_2 \exp(r\lambda_2 z), \quad \operatorname{Re} \lambda_1 > 0, \quad \operatorname{Re} \lambda_2 > 0 \quad (4.1)$$

где  $\lambda_1, \lambda_2$  -- корни характеристического уравнения системы (2.9) при  $r = 1$ . Для остальных неизвестных функций в (2.9) формулы аналогичны. Удовлетворяя граничным условиям на свободной поверхности, находим критическую деформацию.

Введем коэффициент ортотропии по формуле  $\delta = E'/E$  и рассмотрим материал с параметрами  $\nu' = \delta \nu, G' = \delta G$ . Критические значения  $q^*$  для различных значений  $\delta$  и  $\nu$  приведены в Таблице 2. Видим, что критические деформации сильно зависят от коэффициента ортотропии  $\delta$  и от коэффициента Пуассона  $\nu$ . Зависимость  $q^*$  от  $\delta$  близка к линейной.

$\delta = E'/E$	1.0	0.7	0.5	0.4	0.3	0.2	0.1
$\nu = 0.15$	0.3008	0.2302	0.1675	0.1368	0.1046	0.0712	0.0353
$\nu = 0.30$	0.2316	0.1703	0.1255	0.1019	0.0775	0.0524	0.0265
$\nu = 0.45$	0.1708	0.1236	0.0904	0.0730	0.0553	0.0372	0.0188

Таблица 2. Критические деформации для ортотропной пластины.

От параметра волнообразования  $r$  критическая деформация  $e^* = -q^*$  не зависит, ибо в случае полупространства в системе (2.9) нет характерного линейного масштаба, с которым можно было бы сравнивать характерную длину волны деформации  $L = 2\pi/r$ . В случае трехслойной пластины с мягким средним слоем такой масштаб появляется в виде толщины верхнего слоя. Растянутый средний слой препятствует потере устойчивости, поэтому потеря устойчивости происходит при  $r \gg 1$  (т.е. при весьма коротких волнах на поверхности), ибо в этом случае затухание прогиба в силу формулы (4.1) при приближении к среднему слою происходит быстрее. Критическая же деформация оказывается близкой к критической деформации для полупространства (см. Таблицу 2).

Приведенные здесь результаты относятся к случаю полупространства, равномерно сжатого в обоих горизонтальных направлениях. Если же оно сжато лишь в одном направлении, то критическая деформация увеличивается в  $1/(1-\nu)$  раз.

Отметим, что критические деформации  $q^*$  при потере устойчивости вблизи свободной поверхности лишь немногим меньше критических деформаций  $q^{**}$ , при которых теряет устойчивость материал как неограниченная сплошная среда (появляются волны деформации, нарушается условие Адамара). Например, при  $\delta = 0.5$ ,  $\nu = 0.3$  будет  $\delta^* = 0.1255$ ,  $\delta^{**} = 0.1346$ .

**5. Дискретный подход.** При формировании нанопластин верхний слой может приобретать естественную деформацию сжатия, связанную с различием характерных межатомных расстояний у верхнего и нижележащего слоев. Здесь верхний слой моделируется простейшей плоской решеткой из правильных треугольников (см. рис. 1) и рассматривается устойчивость его сжатого состояния. Силы межатомного взаимодействия берутся соответствующими потенциалу Леннарда—Джонса [5]

$$\Pi(r) = D \left[ \left( \frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{a}{r} \right)^6 \right], \quad (5.1)$$

где  $D$  – энергия связи,  $a$  – равновесное межатомное расстояние.

Пусть решетке сообщена деформация сжатия  $e = -q < 0$  в направлении оси  $x$  и верхний край решетки свободен. Рассмотрим устойчивость решетки. Предположим сначала, что второй слой атомов неподвижен, а атомы первого слоя могут перемещаться. Предположим, что атомы первого слоя периодически перемещаются в направлении оси  $z$  на расстояния  $z_1$  и  $z_2$  (см. рис. 1). В деформированном положении потенциальная энергия ячейки периодичности будет функцией трех аргументов  $f(z_1, z_2, q)$ . Условием бифуркации прямолинейной формы равновесия будет нарушение положительной определенности квадратичной формы

$$\frac{\partial^2 f}{\partial z_1^2} Z_1^2 + 2 \frac{\partial^2 f}{\partial z_1 \partial z_2} Z_1 Z_2 + \frac{\partial^2 f}{\partial z_2^2} Z_2^2, \quad (5.2)$$

где производные вычисляются при  $z_1 = z_2 = 0$ .

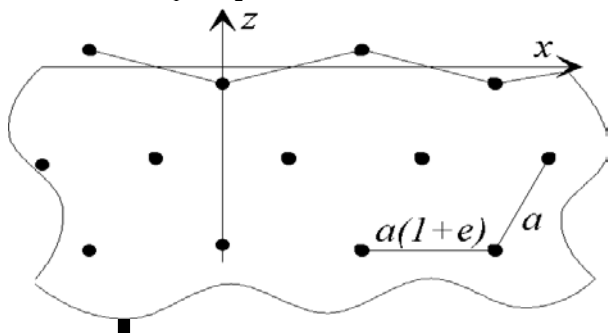


Рис. 1. Плоская дискретная модель.

Критическое значение равно  $q = 0.107$ . Если же подвижными считать два верхних слоя, то критическое значение незначительно уменьшается:  $q = 0.1064$  (при этом задача сводится к квадратичной форме с 4 аргументами).

Рассмотрим сплошную среду, получающуюся при осреднении решетки [5]. При  $e = 0$  среда изотропна с коэффициентом Пуассона  $\nu = 1/3$ . При  $q = 0.107$  анизотропия упругих модулей оказывается весьма сильной

$$E = 440.96 \frac{D}{a^3}, \quad E' = 91.12 \frac{D}{a^3}. \quad (5.3)$$

Как следует из п.4, анизотропия сильно влияет на критическую деформацию. Следовательно, необходимо учитывать нелинейную упругость материала, ибо различие модулей в (5.3) связано с сильной нелинейностью функции  $\partial\Pi/\partial r$ .

Работа выполнена при поддержке РФФИ, гранты 03.01.00721, 04.01.00257

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Морозов Н.Ф., Семенов Б.Н., Товстик П.Е. Моделирование методами механики сплошных сред процесса формирования нанообъектов // Физическая наномеханика. - 2002. -- Т.5. -- Вып. 3.
2. Родионова В.А., Тугаев Б.Ф., Черных К.Ф. Прикладная теория анизотропных пластин и оболочек. – СПб.: Изд. СПбГУ, 1996. -- 280 с.
3. Морозов Н.Ф., Паукшто М.В., Товстик П.Е. Устойчивость поверхностного слоя при термонагрузении // Изв. РАН МТТ. – 1998. -- N1. – С. 130-139.
4. Товстик П.Е. Локальная устойчивость пластин и пологих оболочек на упругом основании // Изв. РАН МТТ. – 2005. -- N1. – С. 147-160.
5. Иванова Е.А., Кривцов А.М., Морозов Н.Ф., Фирсов А.Д. Теоретическая механика. Определение эквивалентных упругих характеристик дискретных систем. – СПб.: Изд. СПбГТУ, 2004. – 32 с.