# Министерство образования Республики Беларусь БЕЛОРУССКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра микро- и нанотехники

Е.А. Белогуров В.В. Хатько Я.И. Шукевич

# ФИЗИКА НАНО- И МИКРОСИСТЕМ

Методическое пособие к практическим занятиям для студентов специальностей 1-38 01 04 «Микро- и наносистемная техника» и 1-41 01 01 «Технология материалов и компонентов электронной техники»

> Минск БНТУ 2011

### УДК [620.3+621.382.049.77]: 53(075.8) ББК 32.844.1я7 Б 43

### Рецензенты: И.И. Абрамов, В.В. Баркалин

#### Белогуров, Е.А.

Б 43 Физика нано- и микросистем: методическое пособие к практическим занятиям для студентов специальностей 1-38 01 04 «Микро- и наносистемная техника» и 1-41 01 01 «Технология материалов и компонентов электронной техники» / Е.А. Белогуров, В.В. Хатько, Я.И. Шукевич. – Минск: БНТУ, 2011. – 77 с.

ISBN 978-985-525-458-5.

Методическое пособие содержит краткие сведения из области физики нано- и микросистем, задачи, которые могут быть решены как аналитическим способом, так и с помощью расчетов на персональном компьютере с использованием пакета программ ANSYS. Пособие предназначено для практического закрепления знаний, полученных студентами при прослушивании курса по дисциплине «Физика нано- и микросистем».

> УДК [620.3+621.382.049.77]: 53(075.8) ББК 32.844.1я7

ISBN 978-985-525-458-5

© Белогуров Е.А., Хатько В.В., Шукевич Я.И., 2011 © БНТУ, 2011

#### введение

Приставка «нано» означает одну миллиардную чего-либо. Нанометр равен  $10^{-9}$  метра или 10 Å. Наночастицами обычно считают образования из связанных атомов или молекул с размерами 100 нанометров (нм) [1]. Обнаружено, что свойства объемных материалов заметно изменяются при уменьшении размера структурных элементов (частиц, кристаллитов, зерен), из которых они состоят. Такие эффекты проявляются, когда средний размер кристаллических зерен не превышает 100 нм, и наиболее отчетливо наблюдается при размере зерен менее 10 нм [2].

Однако, очевидно, что некоторый характеристический размер (например, 100 нм), идентифицирующий рассматриваемый объект по некоторому геометрическому параметру (диаметр кластера или частицы, размер кристаллита или зерна, толщина тонкой пленки) должен рассматриваться не просто как абсолютная величина, а в отношении к определенному фундаментальному параметру данного объекта, имеющего аналогичную метрическую размерность. Следуя работе [3] можно сказать, что «приставка «нано» – скорее особое обобщенное отражение объектов исследований, прогнозируемых явлений, эффектов и способов их описания, чем просто характеристика протяженности базового структурного элемента».

Наиболее характерными проявлениями в исследуемых объектах наноразмеров по сравнению с микроскопическими являются [3]:

 появление нетрадиционных видов симметрии и особых видов сопряжения границ раздела, конформаций с динамически перестраиваемой структурой;

 доминирование над процессами искусственного упорядочения явлений самоупорядочения и самоорганизации;

 – высокая электрическая и магнитная активность и химическая (каталитическая) избирательность (селективность) поверхности ансамблей на основе наночастиц;

 особый характер протекания процессов передачи энергии, заряда и конформационных изменений, отличающихся низким энергопотреблением, высокой скоростью и носящие признаки кооперативного синергетического процесса. Основными причинами проявления вышеуказанных особенностей являются [3]:

 изменение отношения поверхности частицы к объему при переходе к наноразмерным системам и его вклада в различные процессы;

– энергетическая, полевая и «вещественная» неравновесность поверхности наночастиц;

– усиление роли различных видов размерных эффектов из-за значительной площади границ раздела в нанокомпозициях;

 проявление в условиях больших коллективов энергетически активных наночатиц нетрадиционных механизмов упорядочения, переноса энергии и заряда:

– малые характеристические размеры частиц и особый характер их упорядочения, обеспечивающие энергетическую и пространственную доступность транспорты заряда, энергии и конформационных изменений.

Используя развитые в работах [3, 4] представления о наносистемах дадим формулировку ряду базовых определений с приставкой «нано».

Наносистема – материальный объект в виде упорядоченных или самоупорядоченных, связанных между собой элементов с нанометрическими характеристическими размерами, кооперация которых обеспечивает возникновение у объекта новых свойств, проявляющихся в виде квантово-размерных, синергетически-кооперативных, «гигантских» эффектов и других явлений и процессов, связанных с проявлением наномаштабных факторов [3].

Наноматериалы – вещества и композиции веществ, представляющие собой искусственно или естественно упорядоченную или неупорядоченную систему базовых элементов с нанометрическими характеристическими размерами и особым проявлением физического и (или) химического взаимодействий при кооперации наноразмерных элементов, обеспечивающих возникновение у материалов и систем ранее неизвестных механических, химических, электрофизических, оптических, теплофизических и других свойств, определяемых проявлением наномаштабных факторов [3].

Нанотехнология – совокупность методов и способов синтеза, сборки структуро- и формообразования, нанесения, удаления и модифицирования материалов, включая систему знаний, навыков, умений, аппаратурное, материаловедческое, метрологическое, информационное обеспечение процессов и технологических операций, направленных на создание материалов и систем с новыми свойствами, обусловленных проявлением наномаштабных факторов [3].

Наноэлектроника – это совокупности приборов и устройств, основанных на использовании квантово-размерных эффектов, в первую очередь, это приборы, реализующие электронные эффекты, и приборы, основанные на использовании фотоэлектрических явлений [4].

Наносистемотехника – совокупность методов моделирования, проектирования и конструирования изделий различного функционального назначения, в том числе наноматериалов, микро- и наносистем с широким использованием квантово-размерных, синергетически-кооперативных, «гигантских» эффектов и других явлений и процессов, проявляющихся в условиях материальных объектов с нанометрическими характеристическими размерами элементов [3].

Формирование наносистем формально может происходить по двум направлениям. Первое связано с последовательным уменьшением геометрических размеров элементов интегральных микросхем от микро-размеров до наноразмеров. В настоящее время уже существуют технологии их изготовления с проектными нормами менее 100 нм, а именно 90 нм, 70 нм и 50 нм. Это классическая *нанотехнология* интегральных микросхем. Другое направление связано с созданием искусственно синтезируемого или самоорганизующегося объекта путем использования *технологий наноматериалов*, с помощью которых интеграция формируемых наноэлементов приведет к возникновению новых функциональных свойств наносистемы.

По аналогии с тенденцией перехода к наноразмерам элементов интегральных микросхем (от большего к меньшему) происходит также переход к наноразмерам элементов в функциональных микросистемах. Под **микросистемой** или **микросистемной техникой** подразумевают проектирование, изготовление и применение миниатюрных технических систем, элементы и компоненты которых имеют характеристические размеры, лежащие в микро- или нанометровом диапазоне [5, 6]. В микросистемах можно выделить ряд компонентов, которые, в свою очередь, состоят из элементов, отличающихся функциональным назначением или формой. Переход к микронным, а далее – к субмикронным и наноэлектронным размерам влияет по-разному на характеристики систем: иногда их улучшает, а иногда и ухудшает. Кроме того, размеры некоторых компонентов микросистем плохо поддаются уменьшению (например, источников питания, газовых систем, обеспечивающих вакуум, отдельных элементов общей конструкции и т. д.). В результате некоторые микросистемы имеют характеристические размеры порядка сантиметра, в то время как их компоненты – сотни микрон.

Итак, мы видим, что на определенном этапе развития науки и техники, характерному для нашего времени, происходит переход от микросистемных технологий к наносистемным технологиям, от микросистем к наносистемам. При этом, как отмечено выше, этому переходу соответствует два направления движения: от большого к малому (от микро к нано) и от малого к большому (от нано к микро). И если для большинства изделий микросистемной техники физика функционирования их элементов развита в полной мере [5, 6], то для построения физики и химии функционирования элементов наноситем требуется еще достаточно усилий. Это в полной мере относится и вопросу подготовки научно-образовательного процесса по дисциплине «Физика нано- и микросистем».

Предлагаемое методическое пособие содержит краткие сведения из области физики нано- и микросистем, ряд практических задач, которые могут быть решены как аналитическим способом, так и с помощью расчетов на персональном компьютере с использованием пакета программ ANSYS [7]. Она направлено на практическое закрепление знаний, полученных студентами при прослушивании курса по дисциплине «Физика нано- и микросистем».

# Практическое занятие № 1

# ОБЗОР ВОЗМОЖНОСТЕЙ ПАКЕТА ANSYS WORKBENCH 12.0. ОБЗОР ОСНОВНЫХ ЭТАПОВ ПРОЕКТИРОВАНИЯ И РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ

Цель: познакомиться с возможностями пакета ANSYS Workbench 12.0, рассмотреть основные этапы проектирования конструкции, выполнить первый статический анализ

#### Сведения о пакете ANSYS

ANSYS – универсальная программная система конечно-элементного (МКЭ) анализа, существующая и развивающаяся на протяжении последних 30 лет, является довольно популярной у специалистов в области компьютерного инжиниринга (САЕ, Computer-Aided Engineering) и КЭ решения линейных и нелинейных, стационарных и нестационарных пространственных задач механики деформируемого твердого тела и механики конструкций (включая нестационарные геометрически и физически нелинейные задачи контактного взаимодействия элементов конструкций), задач механики жидкости и газа, теплопередачи и теплообмена, электродинамики, акустики, а также механики связанных полей. Моделирование и анализ в некоторых областях промышленности позволяет избежать дорогостоящих и длительных циклов разработки типа «проектирование – изготовление – испытания».

Программная система ANSYS сопрягается с известными CAD-системами Unigraphics, CATIA, Pro/ENGINEER, SolidEdge, SolidWorks, Autodesk Inventor и некоторыми другими.

С точки зрения вычислительной математики, идея метода конечных элементов заключается в том, что минимизация функционала вариационной задачи осуществляется на совокупности функций, каждая из которых определена на своей подобласти, для численного анализа системы позволяет рассматривать его как одну из конкретных ветвей диакоптики – общего метода исследования систем путем их расчленения. В результате выполнения указанной процедуры происходит замещение уравнения или системы уравнений в частных производных системой недифференциальных уравнений, имеющих в качестве коэффициентов аппроксимирующие функции, которые фактически являются значениями искомой функции в вершинах разбиения.

Метод конечных элементов основан на идее аппроксимации непрерывной функции (в физической интерпретации – температуры, давления, перемещения и т. д.) дискретной моделью, которая строится на множестве кусочно-непрерывных функций, определенных на конечном числе подобластей, называемых конечными элементами. Исследуемая геометрическая область разбивается на элементы таким образом, чтобы на каждом из них неизвестная функция аппроксимировалась пробной функцией (как правило, полиномом). Причем эти пробные функции должны удовлетворять граничным условиям непрерывности, совпадающим с граничными условиями, налагаемыми самой задачей. Выбор для каждого элемента аппроксимирующей функции будет определять соответствующий тип элемента.

### Основные этапы проектирования и структура САЕ

Все САЕ программы имеют четко выраженную модульную структуру, которая состоит из четырех основных больших модулей (рис. 1.1):

- основные допущения;
- препроцессор-подготовка модели к расчету;
- процессор-непосредственный расчет модели;
- постпроцессор-визуализация и анализ полученных результатов.

В свою очередь каждый модуль имеет в своем составе подмодули. В основных допущениях осуществляются следующие этапы:

- выбор типа анализа;
- выбор контактной модели: деталь или сборка;

• выбор типа элементов: оболочечные или твердотельные.

Препроцессор состоит из следующих подмодулей:

- создание геометрической модели;
- выбор свойств материалов;
- генерация сетки;
- нагружение и закрепление конструкции;
- выбор расчетных параметров.



Рис. 1.1. Схема проектирования в САЕ-программах

В постпроцессоре пользователь осуществляет:

- просмотр результатов;
- дополнительную визуализацию;
- проверку достоверности решения.

Решение задачи о напряженно-деформированном состоянии включает следующие шаги.

- 1. Транслировать геометрическую модель из САD системы.
- 2. Задать свойства материалов.
- 3. Создать сетку конечных элементов.
- 4. Закрепить модель (задать граничные условия).
- 5. Приложить нагрузки.
- 6. Выбрать параметры решателя.
- 7. Задать список расчетных результатов и провести расчет.
- 8. Проанализировать полученные результаты и сгенерировать отчет.

Геометрическую модель можно транслировать в САЕ двумя спо-собами:

1) прямая трансляция из интерфейса CAD и одновременный запуск расчетного модуля (действует только для поддерживаемых CAD программ) (рис. 1.2);



Рис. 1.2. Прямая трансляция из интерфейса САD программы

2) трансляция CAD модели через интерфейс CAE программы (действует для поддерживаемых форматов файлов) (рис. 1.3).



Рис. 1.3. Трансляция САД модели через интерфейс САЕ

Для того чтобы назначить свойства материала, выберите деталь и позицию «Material» в окне настроек.

Материалы могут быть добавлены из списка или из внешних файлов XML. Можно добавить в список или базу данных новые ма-10 териалы, выбрав раздел «Engineering Data» в меню. Для поверхностных тел задается толщина оболочки (рис. 1.4).

Ŧ	Graphics Properties				
	Definition	Contraction and a second s			
	Suppressed	No	*********		
i e geo	Material	Structural Steel	CODE-151		
	Thickness	0. in			
Ð	Bounding Bo	x	d the protect		
Ð	Properties				
Ð	Statistics				
			ererererererererererererererererererer		

Рис. 1.4. Определение конструкционного материала

Выбрав раздел «Mesh» в дереве проекта, можно изменить или задать плотность сетки. Существует несколько инструментов контроля за плотностью сетки (рис. 1.5).



Рис. 1.5. Инструмент контроля за сеткой КЭ

Узлы и элементы сетки используются в дискретном решении инженерной задачи. Сетка генерируется на модели и является основой для составления и решения системы уравнений в матричном виде. Можно просмотреть предварительно сетку, до запуска на расчет, чтобы оценить необходимое качество и соответствие поставленной задаче (рис. 1.6).



Рис. 1.6. Опция предварительного просмотра сетки КЭ

При построении сеточной модели необходимо искать оптимальную дискретность сетки и балансировать между располагаемыми ресурсами вычислительной системы и точностью вычислений. Сетка с большим числом расчетных узлов позволяет находить более точное решение, но увеличивает расчетное время и объем памяти. В идеале решение не должно зависеть от плотности сетки. Эта проблема решается через контроль за сходимостью (Convergence control). Измельчение сетки не компенсирует ложные допущения физико-математической модели и ошибки входных данных.

Выбор позиции «Method» в меню дает возможность контролировать форму элементов при автоматической генерации сетки; при этом в окне настроек становятся доступными следующие условия создания элементов: • «Auto sweep if Possible»: заполнить объем трансляций параллелепипедов, где это невозможно, использовать трехгранные призмы;

• «All Tetrahedrons»: создавать элементы тетраэдрической формы;

• «Hex Dominant»: создавать по возможности параллелепипеды, где это невозможно, использовать трехгранные призмы (рис. 1.7).

🔍 Mesh	Control 👻 📝 View Meshe
🔍 Metho	d
🔍 Sizing Conta Straig	ct Sizing ment
Mappe Match	ed Face Meshing Face Mesh
해를 Part R 해도 Part P	elevance roximity
💼 Gap T	ool
Details of "Elemer	nt Shape"
∃ Scope	
Geometry	1 Body
Definition	
Suppressed	No
Element Shape	Auto Sweep if Possible 📃 💌
	Auto Sweep if Possible All Tetrahedrons Hex Dominant

Рис. 1.7. Опции контроля и редактирования сетки КЭ

Также доступен ряд опций, которые позволяют измельчить сетку локально. Выбрав позицию «Sizing» (размер элементов) в меню, можно изменить локальную плотность сетки (рис. 1.8).

	0	Mesh Control 👻 🗹 View Meshe			
	₽.	Method			
	) <b>B</b>	Sizing			
		Contact Sizing Refinement			
	8	Mapped Face Meshing Match Face Mesh			
	<b>(</b> )	Part Relevance Part Proximity			
		Gap Tool			
	Details of "Sizi	ng 2" - Sizing			
	Scope				
	Method	Geometry Selection			
	Geometry	1 Edge			
Ξ	Definition				
	Suppressed	No			
	Туре	Element Size			
	Element Size	Element Size Number of Divisions Sphere of Influence			

Рис. 1.8. Опции для локального контроля и изменение сетки КЭ

Для оболочек применяется генерация сетки по разметке. Сетка формируется четырехугольными или треугольными элементами. Не рекомендуется применять треугольные элементы для оболочек, т. к. они не обеспечивают требуемой точности.

Твердые тела (Solid Bodies) являются трехмерными (3D) или двухмерными (2D) геометрическими объектами.

• Сетка на трехмерных объектах создается с помощью тетраэдрических или гексаэдрических элементов с линейной или квадратичной функцией формы.

• Сетка на двухмерных объектах создается с помощью треугольных или прямоугольных твердотельных элементов с линейной или квадратичной функцией формы.

• Каждый узел имеет три степени свободы (degrees of freedom DOF) перемещения для конструкционного анализа или одну степень для температурного анализа.

Для двухмерных (2D) геометрических моделей существуют ограничения.

• Геометрическая модель должна состоять из плоских фигур, лежащих в плоскости ХҮ.

• В проекте следует переключить тип модели на «2D» перед импортированием модели.

• После импортирования модели нельзя переключить тип модели с 2D на 3D.

• Поддерживается расчет плоского напряженно-деформированного состояния, а также осесимметричность при расчете объемных тел с осью вращения по сечению.

Поверхностные тела (Surface Bodies) или оболочки являются двухмерными геометрическими объектами с трехмерным координатным представлением в пространстве.

• Поверхностными телами моделируются тонкостенные конструкции, толщина которых вводится в виде параметра – реальной константы.

• Сетка на поверхностных телах создается с помощью линейных оболочковых элементов (shell).

• Каждый узел имеет три степени свободы перемещения и три степени свободы поворота для конструкционного анализа, но только одну степень свободы для температурного анализа.

Линейные тела (Line bodies) являются одномерными объектами с трехкоординатным представление в пространстве.

• Линейными телами моделируют конструкции, два поперечных размера которых малы по сравнению с длиной и вводятся как параметры.

• Сетка создается с помощью линейных балочных элементов (beam).

• Каждый узел имеет три степени свободы перемещения и три степени свободы поворота для конструкционного анализа, но только одну степень свободы для температурного анализа.

• Линейные элементы используются для расчета стержневых конструкций.

Препроцессорный модуль Design Modeler позволяет соединить в одной детали несколько разнородных геометрических объектов – твердотельных и оболочковых, и получить, таким образом, составную деталь.

• САD системы позволяют транслировать в препроцессор САЕ отдельные тела, из которых созданы детали. Но в этом случае сетка для каждого тела генерируется отдельно. Для составной детали генерируется единая сетка.

• Создание составной детали в модуле Design Modeler предполагает, что на границе различных объектов при генерации сетки узлы объединяются. При объединении граничных узлов не требуется определения контактных условий на границе.

Расчетные алгоритмы позволяют моделировать контакт, не задавая точное совпадение узлов сетки на границе.

Составные детали позволяют связывать в единую сетку различные тела с общими узлами на границах (рис. 1.9).



Рис. 1.9. Генерация единой сетки КЭ для различных тел

Составная деталь состоит из поверхностных и линейных тел с общими узлами на границах. Это позволяет моделировать, например, оболочки вместе с жесткими стержнями.

После назначения материалов в мастере расчетов требуется выбрать позицию «Insert Supports» (задать закрепление). В контекстных инструментах появляются пиктограммы конструкционных и тепловых нагрузок (рис. 1.10).



Рис. 1.10. Инструменты для закрепления модели

Нагрузки и закрепления применяются к геометрическим объектам. Существует два способа приложения нагрузок: либо сначала выбрать геометрический объект в графическом окне, затем выбрать нагрузку или закрепление в контекстных инструментах, либо сначала выбрать нагрузку или закрепление в контекстном меню и нажать «Apply» (применить) в окне настроек.

После начального выбора в мастере расчетов шаблона Stress Branch (расчет напряжений) в дерево проекта помещаются некоторые расчетные параметры по умолчанию. Пользователь может изменить и добавить расчетные параметры. В мастере расчетов следует выбрать позицию «Insert Results» (добавить расчетные параметры) (рис. 1.11).



Рис. 1.11. Инструменты раздела «Решение»

После назначения материалов, закрепления модели, ее нагружения и выбора расчетных параметров задача готова к вычислению. Для расчета необходимо выбрать позицию «Solve» (решить) в мастере расчетов. Расчет выполняется в режиме пакетной обработки (batch). При запуске решения формируется входной файл (input file) ANSYS, информацию о файле расчетных результатов можно запросить в позиции «Solution Information» раздела «Solution» (решение) дерева проектов. Расчет можно транслировать в ANSYS (рис. 1.12).



Во вкладке таблиц (Worksheet view графического окна при выделення позиции "Solution Information" выводится содержание файла расчетных результатов. Это текстовый файл, который можно дополнить, например, информаци частотах.

По умолчанию входной файл (inpi file ds.dat), файл расчетных результатов (output file solve.out) и вспомогательные файлы располагаются в системном временном каталоге TEMP.

Папку для записи рабочих файлов можно изменить в меню: "Tools > Options... > Simulation: Solution > Solver Working Directory"

Рис. 1.12. Просмотр информации о решении

### Пример решения статической задачи

Для примера рассмотрим кремниевую пластину, из которой изготавливаются зонды для различных типов микроскопов. Размеры пластинки  $1\times0,1\times0,02$  мм. Геометрическая модель построена в CAD-программе и сохранена в файле Parasolid формата \*x\_t. Предположим, что на пластинку действует сила 0,5 Н. Необходимо выяснить выдержит ли пластинка такую нагрузку.

В разделе Toolbox выберем пункт Analysis Systems, из видов анализа выберем Static Structural (рис. 1.13).



Рис. 1.13. Окно выбора нужного вида анализа

В появившемся окне выбрать правой клавишей мыши пункт Engineering Data и нажать Edit. Вашему вниманию будет представлена группа окон, в окне Outlook of Schematic A2: Engineering Data введите название нового материала Silicon (кремний) (рис. 1.14).



Рис. 1.14. Окно для определения свойств конструкционного материала

Теперь зададим необходимые свойства для нового материала. Для этого откроем списки Physical Properties и Linear Elastic. Предположим, что материал имеет изотропные свойства, т. е. свойства вещества не зависят от направления измерения. Зададим следующие параметры: плотность 3500 кг/м<sup>3</sup>, модуль Юнга – 180 ГПа, коэффициент Пуассона – 0,22.

Для создания геометрической модели кликните правой кнопкой на пункте Geometry и выберите пункт Import Geometry и укажите \*x\_t файл геометрической модели. Теперь на импортированной геометрической модели необходимо создать сетку конечных элементов. Для этого правой клавишей мыши выберите пункт Model и нажмите Edit, после этого запустится модуль Static Structural– Mechanical.

Для генерации сетки КЭ воспользуйтесь командой Mesh–Generate Mesh. Предварительно установите значения параметров Relevance Center и Span Angle Center как Fine. Мы получили сетку, которая состоит из 966 элементов, которые имеют 5926 расчетных узла. Для решения данной задачи такое количество КЭ является вполне достаточным (рис. 1.15).

A : Static Structural (AN	SYS) - Mechanical (MNSY)	5 Multiphysics]	-	-	and the second se		
File Edit View Units	Tools Help	Solve + 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	12 D- M			00 2 /08 5-	
Mark dilater mt	Jush a IR March Courter	- B.Catana					
ment A chone day	under . af uister course	- Schoon					
Proport     Product (AA)     Produc	ystems External (AS) External auton Information						
Details of "Mesh"	-						
Use Advanced Stre Function	ito Off	1.					
Relevance Center	Fine					and the second sec	
Element Size	Default						
Initial Size Seed	Active Assembly	1					~
Smoothing	Medium	111		-	0.00025 0.0	165 (m)	2
Transition	Fast			0.00213	8,00520		
Span Angle Center	fine						
Minimum Edge Length	2,e-005 m	Geometry (Worksheet) Print Preview) Rep	ort Preview/				
Inflation		a la china ha china ha china					
Advanced		<ul> <li>braptics Annufactures</li> </ul>			1.		**
- Pinch		Tet			Timestamp		
E Statistics							
Nodes	\$926						
Elements	566	I have been a second as a second seco					
Mesh Metric	None	Messages Graphics Annotations					
Press F1 for Help		Q. No	Messages	No Selection		Metric (m, kg, N, s, V, A) Degree	a rad/s Celsian

Рис. 1.15. Изображение полученной сетки КЭ

Теперь необходимо задать граничные условия. Для этого выберите пункт Setup. Потом Support–Fixed Supports. Выберете указанную грань для закрепления и нажмите Apply (рис. 1.16).



Рис.1.16. Изображение полученного закрепления

Теперь необходимо приложить нагрузку 0,5 H, например, приложим силу вот сюда (рис. 1.17).



Рис. 1.17. Изображение приложенной силы

Для этого необходимо выполнить Loads–Force и выбрать точку приложения силы.

Теперь жмем кнопку Solutions (решение). Оценим полученное решение по двум параметрам Total Deformation и Normal Stress (рис. 1.18).



Рис. 1.18. Визуализация полученного решения

Как видно, максимальные деформации образца составили около 4 мм. Теперь оценим напряжения, которые возникли в образце (рис. 1.19).



Рис. 1.19. Распределение возникших напряжений

Максимальные напряжение в образце составили около 40 ГПа, что превышает предельные напряжения образца на растяжения. Следовательно, балка разрушится при приложении такой силы.

### Задания для самостоятельной работы

Оценить возникающие напряжение и деформации в образце в форме параллелепипеда при нагружении верхней грани нагрузкой 100 Па.

Таблица 1.1

Размеры образца, мм	Материал образца
0,5×0,04×0,002	Кремний
0,7×0,1×0,01	Диоксид кремния
1×0,1×0,005	Нитрид кремния
0,5×0,05×0,001	Алмаз
0,8×0,1×0,01	Кремний
0,6×0,08×0,01	Нитрид кремния
0,7×0,1×0,04	Алмаз
0,5×0,05×0,005	Карбид кремния
1×0,1×0,01	Диоксид кремния

#### Практическое занятие № 2

# НЕСТАЦИОНАРНЫЙ АНАЛИЗ МНОГОСЛОЙНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ МЕМБРАНЫ ПРИ СТАТИЧЕСКИХ НАГРУЗКАХ

**Цель:** ознакомиться с возможностями проведения нестационарного анализа в пакете ANSYS Workbench 12.0. Познакомиться с теорией расчета многослойных диэлектрических структур.

#### Теоретические сведения

Мембрана – трехмерный геометрический объект, у которого один из размеров (толщина) гораздо меньше (на несколько порядков меньше) чем остальные. Мембраны играют одну из ведущих ролей в качестве конструкционных элементов в MEMS. Тонкие пленки и мембраны применяются в качестве чувствительных элементов в газовых сенсорах. Их пористая поверхность способна адсорбировать молекулы различных газов, на основе этого можно определять качественный и количественный состав газовых смесей. На данный момент существует очень мало работ, которые посвящены изучению механических свойств тонких пленок. Эффективным подходом определения механических характеристик оболочечных образцов является определение интегральных (приведенных) механических характеристик оболочечных пленок и мембран. Для получения достоверных результатов требуется применение синтеза экспериментальных исследований с теоретическими, как это сделано, например, для плоских пленок и мембран. Мембраны могут быть выполнены в виде плоских листов, труб, капилляров и полых волокон. Мембраны выстраиваются в мембранные системы. Наиболее распространенные искусственные мембраны – полимерные мембраны. При определенных условиях, преимущественно могут быть использованы керамические мембраны.

Математической базой для прочностного анализа являются основные уравнения теории сопротивления материалов. Одной из важных величин является деформация образца. Нормальные деформации, которые возникают в образце под нагрузкой, являются первыми производными от смещения и описываются выражениями:

$$\varepsilon_{x} = \frac{\partial u}{\partial x}$$

$$\varepsilon_{y} = \frac{\partial u}{\partial y}$$

$$\varepsilon_{z} = \frac{\partial u}{\partial z}$$
(2.1)

Помимо нормальных деформаций в образце возникают также касательные деформации, которые описываются уравнениями:

$$\varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial x} \right)$$
  

$$\varepsilon_{yz} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)$$
  

$$\varepsilon_{xz} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial x} \right)$$
(2.2)

Как видно из выше приведенных систем, в общем случает величина деформации является тензором 2-го ранга и описывается следующей матрицей:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_{x} & \boldsymbol{\varepsilon}_{xy} & \boldsymbol{\varepsilon}_{xz} \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{xy} & \boldsymbol{\varepsilon}_{y} & \boldsymbol{\varepsilon}_{yz} \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{xz} & \boldsymbol{\varepsilon}_{yz} & \boldsymbol{\varepsilon}_{z} \end{pmatrix}$$
(2.3)

Второй важной величиной в анализе является механическое напряжение образца. Механические напряжения могут накапливаться в образце и приводить к так называемым усталостным напряжениям. В общем случае – это также тензорная величина, которая описывается тензором 2-го ранга:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{xy} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_z \end{pmatrix}$$
(2.4)

Вдоль главной диагонали матрицы находятся нормальные напряжения, а на остальных местах касательные напряжения. Именно по величине касательных напряжений происходит анализ конструкции на прочность. Касательные напряжение по определенной плоскости не должны превышать допустимые напряжения на различные виды деформации.

### Пример решения нестационарной задачи для многослойной диэлектрической мембраны

В качестве примера рассмотрим следующую задачу: на трехслойную диэлектрическую мембрану (нитрид кремния–диоксид кремния– нитрид кремния) действует нагрузка 10 кПа. Толщины слоем мембраны соответственно 1, 1,4, 1 мкм, размеры 100×100 мкм (рис. 2.1).



Рис. 2.1. Изображение конструкционных частей мембраны

Для решения выбираем модуль Static Structural Analysis, импорт геометрической модели произведем из \*x\_t файла. Предварительно создадим набор новых материалов: нитрида и диоксида кремния. Потом зададим их свойства слоям мембраны (рис. 2.2).

De	tails of "Part 1"	<b>9</b>			
Ŧ	Graphics Properties				
Ξ	Definition				
	Suppressed	No			
	Stiffness Behavior	Flexible			
	Coordinate System	Default Coordinate System			
	Reference Temperature	By Environment			
Ξ					
	Assignment	•			
	Nonlinear Effects	Yes			
	Thermal Strain Effects	Yes			
Ŧ	Bounding Box				
Ŧ	Properties				
Ŧ	Statistics				

Рис. 2.2. Выбор конструкционных частей материала

Сгенерируем сетку КЭ, состоящую из 900 элементов и 6912 расчетных узлов (рис. 2.3).



Рис. 2.3. Сгенерированная сетка КЭ для мембраны

Для нестационарного решения задачи зададим временной промежуток от 0 до 1 с, с шагом 0,1 с.

# Задания для самостоятельной работы

Провести анализ напряжений и деформаций, которые возникают в трехслойной диэлектрической мембране при соответствующей нагрузке.

Таблица	2.	1
---------	----	---

Длина и ширина, мкм	Толщина слоев, мкм	Материалы слоев	Нагрузка, Па
100×100	1,5 2,3 1,5	Нитрид кремния– Диоксид кремния–	8000
		Нитрид кремния	
		Диоксид кремния-	
75×75	1 1,5 1	Карбид кремния-	5000
		Диоксид кремния	
		Нитрид кремния-	
120×120	2 3,2 2	Диоксид кремния–	8500
		Нитрид кремния	
		Диоксид кремния–	
400×400	5 6,4 5	Карбид кремния-	10000
		Диоксид кремния	
		Нитрид кремния-	
50×50	1 1,4 1	Диоксид кремния–	3500
		Нитрид кремния	
		Диоксид кремния–	
90×90	2 2,5 2	Карбид кремния-	4200
		Диоксид кремния	
		Нитрид кремния-	
110×110	1,5 2 1,5	Диоксид кремния-	3800
		Нитрид кремния	

#### Практическое занятие № 3

# АНАЛИЗ СВОБОДНЫХ МЕХАНИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ, ВОЗНИКАЮЩИХ В ТРЕХСЛОЙНОЙ ДИЭЛЕКТРИЕЧСКОЙ МЕМБРАНЕ

**Цель:** найти собственные частоты и формы колебания трехслойной мембраны, определить вибрационные характеристики мембраны в диапазоне от 0 до 500 Гц.

### Краткие теоретические сведения

Анализ свободных механических колебаний (модальный анализ) проводится с целью определения собственных частот и форм колебания конструкции. Дифференциальное уравнение свободных колебаний является частным случаем общего уравнения движения. В анализе свободных колебаний предполагается упругое поведение конструкции, поэтому ожидаемый отклик является гармоническим:

$$\{x\} = \{\phi_i\} \cos(\omega_i t), \qquad (3.1)$$

где  $\phi_i$  определяет форму колебания *i*-й моды (собственный вектор) и  $\mathcal{O}_i$  является собственной частотой этой моды. Собственные частоты можно найти из уравнения:

$$([K] - \omega_l^2[M]) \{\phi_l\} = 0.$$
 (3.2)

Допущения при расчете свободных колебаний:

• принимается линейное упругое поведение материалов;

• используется теория малых деформаций, не учитываются нелинейные эффекты;

• не учитываются эффекты демпфирования;

• закрепление конструкции не является обязательным как в анализе статики.

Форма свободных колебаний вычисляется в относительных единицах и не позволяет определить абсолютные смещения.

### Опции расчета

Для анализа требуются следующие физические величины: модуль Юнга, коэффициент Пуассона, плотность. Возможно введение контактных условий в расчет, но анализ свободных колебаний является линейным, и, соответственно, контакты в модальном анализе от нелинейных контактов статики.

При запуске программы нужно выбрать модальный тип анализа Modal в списке задач (рис. 3.1).



Рис. 3.1. Выбор типа анализа

В дереве проекта задается число вычисляемы мод от 6 до 200. Задается интервал поиска собственных частот (по умолчанию от 0 до 100 Гц) (рис. 3.2).

Details of "Analysis Set	tings"	<b>4</b>	Project Model H	y		
🖃 Options	147		🕀 🧭 Mesh			
Max Modes to Find	6		🖃 🦯 Modal	tal Condition		
Limit Search to Rand	ie Yes	*	Analysis Settings			
Range Minimum	O. Hz		🖻 🧭 So	lution		
Range Maximum	1.e+008 Hz		thing 1	Solution Information		
- Solver Controls						
Solver Type	Program Controlled	× P	etails of "Analysis Settin	gs"	4	
Output Controls			Options			
+ Analysis Data Ma	nagement		Max Modes to Find	6	Ref. 1	
		energen in the second	Limit Search to Range	No		
			Solver Lontrois	Yes		
			Solver Type	TTEST OF COMPLETE		
		2	Uucpuc Concrois			
		đ	milary sis Data Malic	igeniene		

Рис. 3.2. Настройка параметров анализа для расчета

В анализе свободных колебаний не задаются предварительные и тепловые нагрузки, но они могут быть учтены как предварительные (pre-stress). В отличие от статического линейного анализа при расчете свободных вибраций предотвращение жесткого движения тел не является обязательным условием. Граничные условия важны – они влияют на форму и частоту колебаний конструкции.

В дерево проекта следует включить расчетные параметры вибрационного анализа – Frequency Finder (рис. 3.3).



Рис. 3.3. Настройка расчетных параметров вибрационного анализа

В окне настроек для рабочих параметров можно изменять «Max Modes To Find» (число мод к расчету) – по умолчанию выбрано 6, максимальное число для расчета – 200. Можно выделить интересующей интервал собственных частот для расчета, выбрав «Yes» в позиции «Limit Search to Range».

В модальном анализе нет обширного перечня расчетных параметров, т. к. сам по себе выбор модального типа анализа предполагает расчет собственных частот и форм колебаний. Поэтому расчет можно запустить хоть сейчас. По окончании расчета во вкладке решений появится диаграмма и таблица с вычисленными значениями собственных частот (рис. 3.4).



Рис. 3.4. Таблица с вычисленными значениями собственных частот

В расчет свободных колебаний можно ввести эффекты предварительных напряжений. Напряженное состояние конструкции, вызванное статическими нагрузками, влияет на собственные частоты. Такое влияние может оказаться принципиально важным для тонких объектов, имеющих малые размеры в одном или двух направлениях.

При расчете свободных колебаний с учетом предварительных напряжений автоматически проводятся две итерации:

• сначала проводится линейный статический анализ согласно уравнению:

$$[K] \{ x_0 \} = \{ F \}$$
(3.3)

• исходя из рассчитанного напряженного состояния вычисляется матрица жесткости, обусловленная напряжениями [S]

$$[\sigma_0] \rightarrow [S] \tag{3.4}$$

• затем вычисляются свободные колебания с учетом добавленной жесткости:

$$([K + S] - \omega_i [M]) \{\phi_i\} = 0.$$
 (3.5)

#### Пример

В качестве примера рассмотрим трехслойную мембрану, которая закреплена с четырех сторон. Сравним свободные колебания в двух случаях: когда предварительная нагрузка присутствует и когда отсутствует.

Используем ту же мембрану, что и в практическом занятии № 2. Зададим сетку КЭ из 900 элементов и 6912 расчетных узлов.

Для ненапряженной мембраны опцию начальных условий Initial Condition следует задать в окне определений None (рис. 3.5).



Рис. 3.5. Задание условий для ненапряженного состояния

Для напряженной мембраны опцию начальных условий Initial Condition следует задать как Static Structural (рис. 3.6).



конструкции

Рис. 3.6. Задание условий для напряженного состояния

Приложенная сила создает в мембране растягивающие напряжения, что приводит к увеличению собственной частоты колебаний.

### Задания для самостоятельной работы

Провести анализ мембраны из практического занятия № 2 в диапазоне частот от 0 до 1000 Гц. Число мод – 10.

### Практическое занятие № 4

# ТЕРМАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ. ОБЩАЯ ТЕОРИЯ ТЕПЛОПЕРЕДАЧИ

Цель: изучить виды теплопередачи, математическое описание процессов теплопередачи. Овладеть навыками моделирования теплопередачи и распределения термополей в пакете ANSYS.

### Термальный анализ. Общая теория теплопередачи. Теоретические сведения

Стационарный тепловой анализ позволяет найти отклик системы на установившуюся тепловую нагрузку. В тепловом анализе обычно вычисляют температуры и скорость теплового потока, также можно вычислить удельный тепловой поток. В тепловом анализе решается уравнение:

$$[C(T)]{T'}+[K(T)]{T} = {Q(t,T)}, \qquad (4.1)$$

где *t* – время;

 $\{T\}$  – температурное поле;

[С] – матрица удельной теплоемкости;

[К] – матрица теплопроводности;

 $\{Q\}$  – вектор скорости генерации тепла в системе.

В стационарном тепловом анализе исключаются все изменяющиеся со временем параметры, но допускаются нелинейные эффекты:

$$[K(T)]{T} = {Q(T)}.$$
(4.2)

В стационарном анализе вычисляют матрицу узловых температур $\{T\}$ . Решение проводится со следующими допущениями:

- не учитываются переходные процессы;
- [К] является константой или функцией температуры;
- {*Q*} является константой или функцией температуры.

Приведенное уравнение подчиняется закону теплопроводности Фурье. Алгоритм расчета следующий:

• [К] определяется тепловым потоком в твердом теле (закон Фурье);

• {*Q*} определяется граничными условиями – удельный тепловой поток, интенсивность теплового потока, конвекция;

• излучение не учитывается;

• переменные, изменяющиеся со временем параметры не учитываются.

Если решается только тепловая задача, то можно с помощью физического фильтра сформировать пользовательский интерфейс программы для решения конкретной задачи, отключив на старте не используемые функции интерфейса.

В универсальных инструментах «View Menu > Physics Filter» исключить позиции «Structural» и «Electromagnetic». Интерфейс будет предлагать инструменты только для теплового анализа. При расчете тепловых напряжений позицию «Structural» включать не следует, т. к. в этом случае тепловая и прочностная задача решаются одновременно (рис. 4.1).



Рис. 4.1. Пример использования физического фильтра

В этой части будет рассмотрены следующие аспекты моделирования:

- построение геометрии;
- сборки контакт твердых тел;
- тепловые нагрузки;
- опции решателя;
- обработка результатов.
• В тепловом анализе поддерживаются все типы тел и поверхностей ANSYS.

- Твердые тела, поверхности, и линии.
- Линии пересечения тел

(однако, опция «Point-Mass» недоступна).

- Оболочки нет температурных градиентов сквозь их толщину.
- Линии пересечения постоянная температура вдоль всей линии.

Единственно требуемое свойство материала для расчета – теплопроводность. Единицы измерения могут быть настроены в главном меню проекта ANSYS. Теплопроводность вводится в меню Engineering Data. Теплопроводность, нелинейно или линейно зависящая от температуры, задается в виде таблицы, как представлено на рисунке (рис. 4.2).



Рис. 4.2. Определение свойств теплопроводности

Примеры задания нелинейных свойств в окне Engineering Data.

При наличии любого материала, теплопроводность которого зависит от температуры, автоматически будет предложено нелинейное решение модели.

Как и в случае структурного анализа, контактные области автоматически создаются для активации теплопередачи между частями сборки или одной детали. Пример такой геометрии на рисунке (рис. 4.3).



Рис. 4.3. Пример модели с контактом между телами и теплообменом между ними

• Если детали в геометрической модели изначально расположены в контакте, между ними может присутствовать теплопередача.

• Если детали не находятся в контакте, прямой теплопередачи между ними быть не может (см. пример ниже).

Рассмотрим распространенный случай – теплопередача между шариком и плоскостью.

В таком случае контакт между поверхностями присутствует, и он определяется программой автоматически, однако площадь этого пятна контакта мала, и может вызвать сбои в программе на этапе инициализации геометрии и обработки зазоров. Если контакт фиксирован или нет разделения, теплопередача может быть активирована (отмечено стрелками), где поверхности – соответственно шарик и плоскость (рис. 4.4).



Рис. 4.4. Примерная геометрия шарика на плоскости

De	tails of "Contact Region	i <sup>n</sup>	4			
Ξ	Scope					
11	Scoping Method	Geometry Selection				
	Contact	1 Face				
13	Target	1 Face				
1	Contact Bodies	Base				
13	Target Bodies	-				
E	Definition					
13	Туре	Bonded				
	Scope Mode	Automatic				
	Behavior	Symmetric				
10	Suppressed	No				
E	Advanced					
1	Formulation	Pure Penalty				
	Normal Stiffness	Program Controlled				
	Update Stiffness	Never				
	Thermal Conductance	Program Controlled	_			
	Pinball Region	Radius				
15	Pinball Radius	2, mm				

Рис. 4.5. Настройка радиуса «pinball»



Рис. 4.6. Трехмерный вид шарика на плоскости

Здесь зазор между шариком и плоскостью (pinball radius), больше, чем указанная контактная область, поэтому теплопередача не может быть осуществлена.

В стандартных настройках, в модели предполагается идеальный теплопроводящий контакт, означающий отсутствие температурных потерь.

Пользователь может сам задать проводимость контакта. Оно вводится для каждой контактной области в меню Details. Если известно лишь сопротивление контакта, из него получают нужную проводимость контакта (рис. 4.7).

Тепловые нагрузки:

• Тепловой поток. Может быть применен к вершине, грани, ребру. Размерность энергия/время (варьируется в зависимости от системы единиц).

• Изоляция (тепловой поток равен 0).

• Плотность теплового потока. Применяется только к поверхностям. Имеет размерность энергия/время/площадь.

• Внутренний источник тепла. Применим только к отдельным телам. Размерность энергия/время/объем.

Как минимум один тип граничных условий должен быть задан в модели. Граничные условия температуры или конвекции не могут

быть применены к тем поверхностям, на которые уже наложены иные граничные условия. Условие изоляции «перебивает» другие граничные условия.

• Температура. Применима к вершинам, граням, телам, поверхностям.

• Конвекция. Применима только к поверхностям.

• Температурно-зависимая конвекция. Задается в виде табличной зависимости коэффициента конвекции от температуры h(T). (рис. 4.8).

Scope				
Contact	2 Faces			
Target	2 Faces			
Contact Bodies	bracket-1			
Target Bodies	Yoke_male-1			
Definition				
Туре	Bonded			
Scope Mode	Automatic			
Behavior	Symmetric			
Suppressed	No			
Advanced				
Formulation	Pure Penalty			
Normal Stiffness	Program Controlled			
Update Stiffness	Never			
Thermal Conductance	Manual			
Thermal Conductance Value	0. W/m2.ºC			
Pinball Region	Program Controlled			

Рис. 4.7. Настройка свойств контактной проводимости

De	etails of "Convection 2"		
Ξ	Scope	Provide and the	Geometry (Worksheet) Pr
	Scoping Method	Geometry Selection	Granh
	Geometry	137 Faces	Graph
E	Definition	n 1.	
	Туре	Convection	
	Film Coefficient	0. W/mm <sup>2.</sup> °C (ramped)	pal l
	Ambient Temperature	22, °C (ramped)	🔊 Import
	Suppressed	No	j Import
			Export
			✓ Constant
L			Tabular (Time)
			Tabular (Temperature)
Pre	ess F1 for Help		Function

Рис. 4.8. Настройка свойств конвекции

De	tails of "Convection 2"	7
Ξ	Scope	
	Scoping Method	Geometry Selection
	Geometry	137 Faces
Ξ	Definition	
1	Туре	Convection
	Film Coefficient	Tabular Data
	Coefficient Type	Average Film Temperature 🛛 💌
	Ambient Temperature	Bulk Temperature
	Suppressed	Surface Temperature Average Film Temperature Difference of Surface and Bulk Temper

Рис. 4.9. Настройка типа коэффициента конвекции



Рис. 4.10. Табличное задание свойств конвекции

• Излучение. Применимо к поверхностям. Обеспечивает моделирование излучения в окружающую среду (стандартно воздух), но не между поверхностей.

Details of "Outer Surface Radiation"				
Scope				
Scoping Method	Named Selection			
Named Selection	NS_RadSurf_1			
Definition				
Туре	Radiation			
Correlation	To Ambient			
Emissivity	0.7			
Ambient Temperature	25. °C (ramped)			
Suppressed	No			
	tails of "Outer Surface Rad Scoping Method Named Selection Definition Type Correlation Emissivity Ambient Temperature Suppressed	tails of "Outer Surface Radiation" Scope Scoping Method Named Selection Named Selection NS_RadSurf_1 Definition Type Radiation Correlation To Ambient Emissivity 0.7 Ambient Temperature 25. °C (ramped) Suppressed No		

Рис. 4.11. Настройка свойств излучения



# Опции решателя и обработка результатов



	다. Steady-S 고란 Initial 고 Analy	tate Thermal (A5) Temperature sis Settings			
	Conv	ection			
De	tails of "Analysis Settings				
Ξ	Step Controls				
	Number Of Steps	1.			
	Current Step Number	1.			
	Step End Time	1.5			
15	Auto Time Stepping	Program Controlled			
Ξ	Solver Controls				
	Solver Type	Program Controlled			
Œ	Nonlinear Controls				
Ð	Output Controls				
Ξ	Analysis Data Management				
	Solver Files Directory	D:\Solver_Temp\WB_PGHX64/			
	Future Analysis	None			
	Save ANSYS db	No			
	Delete Unneeded Files	Yes			
	Nonlinear Solution	No			
	Solver Units	Active System			
	Solver Unit System	rimm			
Ŧ	Visibility				

Рис. 4.13. Собственно опции решателя в дереве моделирования

Возможно настроить модуль теплопередачи в соединении с другими модулями, к примеру, с модулем деформаций. Это позволит создать физико-математическую модель, передавая результаты вычислений из первого модуля во второй, объединяя тем самым их возможности (рис. 4.14).

•	A				-		В	
1	🚺 Steady-State Thermal (ANSYS)				1	777	Static Structural (ANSYS)	
2	🥏 Engineering Data	1	-	_	2	0	Engineering Data	1
3	P Geometry	1	-		• 3	P	Geometry	×
4	🍘 Model	+	-		4	0	Model	+
5	🍓 Setup	1		1	• 5	1	Setup	2
6	🗑 Solution	1	-	/	6	6	Solution	1
7	😥 Results	->			7	0	Results	+

Рис. 4.14. Образование соединения между модулями



Рис. 4.15. Вид дерева моделирования с соединенными модулями деформаций и теплопередачи, с «импортированными» нагрузками

Для обработки результатов и вывода на экран доступны следующие виды данных (рис. 4.16):

- температура;
- плотность теплового потока;
- тепловой поток;

• величины, определяемые задаваемыми пользователем выражениями.



Рис. 4.16. Подменю вывода температурных величин

Температура – скалярная величина и, соответственно, не имеет направления.



Рис. 4.17. Меню вывода температуры



Рис. 4.18. Визуализация модели с отображением температур

• Плотность теплового потока. Доступны выводы векторного поля и контуров.



Рис. 4.18. Подменю вывода плотности теплового потока



Рис. 4.19. Стрелки-подменю вывода векторного поля плотности теплового потока



Рис. 4.20. Модель с отображением векторного поля плотности теплового потока

# Практическое занятие № 5

# ИЗУЧЕНИЕ ТЕПЛООБМЕНА В ПЛАСТИНЕ

Цель: изучить на практике процесс моделирования в модуле Steady-State Thermal среды Ansys Workbench.

## Определение геометрии пластины

В главном окне Workbench выберите тип анализа Steady – State Thermal и в появившимся окне-структуре модели выберите Geometry (рис. 5.1).



Рис. 5.1. Выбор типа анализа и задание геометрии

Дерево модели для теплового анализа и его положение среди других типов анализа среды Workbench.

В окне моделирования нарисуйте исходный диск-кремниевую пластину. Для этого необходимо сначала задать эскиз – двумерную «основу» будущей детали, затем из двумерной детали путем стандартных операций («вытянуть», «повернуть» и другие) получить конечную трехмерную модель. В целом, процесс черчение весьма напоминает черчение в трехмерных параметрических САПР, таких как Autodesk Inventor фирмы Autodesk, SolidWorks и CATIA фирмы Dassault Systemes и других. Также можно импортировать геометрические модели из САПР прямо в Workbench «на лету» (команда Attach to Active CAD Geometry).

Итак, сначала создадим двумерный эскиз. Для этого сначала выберем одну из трех стандартных плоскостей проекций в подменю вверху слева. Затем в меню Sketching/Modeling выбираем Sketching-Draw (рис. 5.2).



Рис. 5.2. Меню рисования эскиза

Из предложенных стандартных геометрических примитивов выбираем нужный (к примеру, окружность), помещаем курсор в области модели, кликаем левой кнопкой для закрепления центра, затем кликаем еще раз в другой области для создания окружности.

Для точного задания размера геометрии эскиза выбираем Dimensions-Diameter (или другой, более конкретный вид размера), помещаем размер на вычерченную выше геометрию. В графе Value его значение можно изменить (зададим диаметр, к примеру, 0,3 метра)

Затем выбираем на главной панели сверху Extrude, указываем величину, и затем выбираем Generate (вытянуть, что увеличит толщину будущего диска с нулевой и создаст тем самым трехмерный объект). Зададим толщину 0,0001 метра.



Рис. 5.3. Трехмерный диск и графа редактирования диаметра окружности эскиза

Следует также отметить, что полученная тем самым и отображенная в окне Modeling структура модели не является жестко фиксированной и может быть изменена «снизу вверх», то есть для изменения радиуса трехмерного диска не нужно его удалять и заново создавать эскиз – достаточно переопределить его размеры, и после того нажать на Generate для перестройки модели.

## Подготовка модели к решению

Итак, имеется геометрическая модель, и в графе Geometry в структуре модели на главной странице Workbench стоит зеленая птичка – это означает, что геометрия задана и существует. Сохраним весь проект, затем окно геометрического моделирования можно закрыть (рис. 5.4).



Рис. 5.4. Меню настройки свойств модели, сетки конечных элементов и граничных условий

Дважды кликнем на пункте меню Model. В подменю Mesh проведем разбиение модели на конечные элементы, аналогично разбиению в практическом занятии № 1.

При правом клике на пункт Mesh в меню Insert доступны некоторые вспомогательные функции, необходимые для построения сетки конечных элементов в моделях со сложной геометрией. В общем, следует сказать, что чем выше количество КЭ, тем выше качество решения, однако большее количество КЭ пропорционально увеличит время, необходимое процессору для решения задачи.

В главном меню перейдем к подвкладкам меню Steady-State Thermal. В пункте Initial Temperature можно задать изначальную температуру среды и другие настройки среды.

В пункте Anslysis Settings настраиваются граничные условия.

Подогреем, к примеру, нашу пластину снизу температурой в 500 С. Для этого выберем вкладку в верхнем меню Temperature, кликнем на нижнюю поверхность диска, в меню слева зададим значение температуры в градусах Цельсия (стандартно) (рис. 5.5).



Рис. 5.5. Задание температуры нижней грани пластины (выделена зеленым)

Для определения свойств материала вернемся в главное меню Workbench, не закрывая окно моделирования, выделив предварительно необходимую для описания свойств деталь кликом мыши (свойства определяются для выделенной детали). Зададим теплопроводность кремния аналогично Лабораторной работе 1. (она составляет 149 Вт·м<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup>). В окне задания свойств модели Geometry-Material-Assignment проверим в меню Solver settings, не стоит ли материал по умолчанию (сталь). Если стоит, меняем его на заданный ранее кремний

### Решение модели

Итак, имеются все нужные компоненты для решения модели – геометрия, свойства материала, граничные условия и среда. Выберем в главном меню пункт Solution, затем в меню сверху Solve. После решения в меню сверху выберем Temperature для отображения распределения температур по телу (рис. 5.6).



Рис. 5.6. Результаты решения

Из-за малой толщины диска получаем очевидный результат – равномерное распределение температуры.

## Задания для самостоятельной работы

Провести тепловой расчет деталей из кремния различной геометрической формы. Подогрев производится на произвольной грани, температура 100 градусов Цельсия.

Варианты:

1) диск диаметром 300 мм, толщина 0,1 мм;

2) квадратная пластина 40×40 мм, толщина 1 мм;

3) шестиугольная пластина (шестиугольник вписан в окружность диаметром 200 мм) толщина 2 мм;

4) диск диаметром 10 мм, толщина 5 мм;

5) треугольная пластина, длина стороны 15 мм, толщина 3 мм;

6) диск диаметром 50 мм, толщина 10 мм;

7) квадратная пластина 400×400 мм, толщина 0,01 мм;

8) шестиугольная пластина (шестиугольник вписан в окружность диаметром 100 мм) толщина 10 мм;

9) треугольная пластина, длина стороны 100 мм, толщина 10 мм;

10) шестиугольная пластина (шестиугольник вписан в окружность диаметром 50 мм) толщина 1 мм.

# Практическое занятие № 6

# ИЗУЧЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОВСТИ НАГРЕВАТЕЛЬНОГО МЕАНДРА

Цель: изучить более сложные методы черчение геометрической модели и расчета многотельных моделей.

## Определение геометрии

Вычертим на произвольной плоскости пластинку с размерами 0,01×0,01 метра. Вытянем нормально на 0,0001 метра.

Для черчения меандра, лежащего сверху на данной пластинке, необходимо сначала определить плоскость, параллельную исходной плоскости. Добавим ее кнопкой New Plane в панели сверху. Возьмем за основу верхнюю грань ранее определенной пластинки (рис. 6.1).

De	etails View	д
Ξ	Details of Plane5	
	Plane	Plane5
	Sketches	1
	Туре	From Face
	Subtype	Outline Plane
	Base Face	Selected
	Use Arc Centers for Origin?	Yes
	Transform 1 (RMB)	None
	Reverse Normal/Z-Axis?	No
	Flip XY-Axes?	No
	Export Coordinate System?	No
	Deadu	

Рис. 6.1. Определение плоскости

На новой плоскости, появившейся в дереве модели, нарисуем меандр инструментами Line. Меандр, очевидно, не должен выходить за пределы пластинки. Геометрические параметры меандра определяются по вариантам. Вытянем и его инструментом Extrude на 0,0001 метра. Оба полученных объекта Extrude по умолчанию свободны и составляют одно целое. Так как эти объекты будут обладать разными свойствами, необходимо их разбить. Для этого необходимо в их свойствах указать Operation – Add Frozen (зафиксированы). Можно также их разбить инструментом Create – Slice и выбрать в качестве плоскости разбиения нашу созданную новую плоскость. В результате дерево модели примет вид, представленный на рис. 6.2.



Рис. 6.2. Финальный вид дерева модели

## Подготовка модели к решению

В главном окне Workbench перейдем к пункту Model и произведем разбиение на КЭ в пункте Mesh – Generate. Настройки можно оставить по умолчанию.

Выберем весь меандр как тело, и зададим ему температуру в 50 °С.

Меандр изготовлен из платины (теплопроводность 71,6 Вт·м<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup>), а пластинка из кремния (149 Вт·м<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup>). Зададим эти новые материалы под именами Pt и Si в пункте Engineering Data главного меню Workbench.

В окне свойств модели проверим в меню Geometry-Material-Assignment соответствие материалов в модели их истинным значениям (рис. 6.3).



Рис. 6.3. Необходимые значения свойств материалов на примере кремния

Заранее определим, что должен выводить Ansys после решения задачи. Для этого в меню Solution – Thermal выберем Temperature и Total heat flux. Задача готова к решению.

### Решение модели

Перед решением можно обновить (Refresh Project) все данные модели, если что-то изменялось в ходе построения модели. Для этого в главном окне Workbench нажмем соответствующую кнопку в меню сверху.

Результаты решения модели выглядят примерно таким образом (рис. 6.4):



Рис. 6.4. Примерный вид решенной задачи. Выведен тепловой поток

## Задания для самостоятельной работы

Варианты самостоятельных работ различаются толщинами и формой меандра. Толщины исходной пластинки и меандра обозначены  $H_1$  и  $H_2$ , число изгибов меандра через N. Предполагается, что меандр полностью и равномерно покрывает поверхность пластинки и однороден по ширине.

# Варианты:

1) H <sub>1</sub> = 0,1 мм;	$H_2 = 0,5$ мм;	N = 10;
2) H <sub>1</sub> = 1 мм;	$H_2 = 0,5$ мм;	N = 5;
3) H <sub>1</sub> =0,7 мм;	$H_2 = 0,2$ мм;	N = 6;
4) Н <sub>1</sub> = 0,8 мм;	$H_2 = 0,2$ мм;	N = 4;
5) Н <sub>1</sub> = 0,9 мм;	$H_2 = 0,5$ мм;	N = 5;
6) H <sub>1</sub> = 1,0 мм;	$H_2 = 0,8$ мм;	N = 7;
7) Н <sub>1</sub> = 0,5 мм;	$H_2 = 0,1$ мм;	N = 8;
8) H <sub>1</sub> = 0,9 мм;	H <sub>2</sub> = 0,3 мм;	N = 10;
9) H <sub>1</sub> = 1,2 мм;	$H_2 = 0,6$ мм;	N = 6;
10) Н <sub>1</sub> = 1,4 мм;	Н₂ = 0,7 мм;	N = 5.

## Практическое занятие № 7

# ИЗУЧЕНИЕ ТЕПЛООБМЕНА В ПЛАСТИНЕ ПРИ НЕСТАЦИОНАРНОМ СЛУЧАЕ

**Цель:** изучить нестационарное решение задачи теплообмена, изучить навыки связывания компонентов Ansys.

## Определение геометрии

В данной лабораторной работе будем использовать данные, созданные в предыдущей лабораторной работе, в частности, геометрию. Импортируем ее из предыдущего проекта Workbench. Для этого откроем его и создадим новое меню проекта, дважды кликнув на способе анализа Transient Thermal. Для удобства расположим оба меню анализов рядом путем перетаскивания. Перетащи также данные Engineering Data и Geometry из меню Steady-State в меню Transient. Полученная структура модели в меню Workbench представлена на рис. 7.1.



Рис. 7.1. Импорт свойств материала и геометрии из одной модели в другую

Выбрав Model в новой модели, можно убедиться в том, что геометрия в точности такая же, как и в первом проекте из практического занятия № 2.

# Разбиение модели на конечные элементы и подготовка к решению

Проведем разбиение на конечные элементы аналогично разбиению в практическом занятии  $\mathbb{N}$  2, но улучшив количество конечных элементов в модели, задав опцию Use Advanced Size Function – On, Proximity and curvature. Качество сетки тем самым значительно улучшится, но значительно увеличится и время решения (рис. 7.2).



Рис. 7.2. Примерный вид улучшенной сетки КЭ

В целом, этот пункт аналогичен тому, что был выполнен в практическом занятии № 2, но теперь активен модуль нестационарного, или переходного процесса решения, а значит, можно задавать изменение температуры во времени. Зададим таблично изменение со временем температуры верхней грани меандра, выбрав Temperature – Magnitude – Tabular Data (рис. 7.3).

Tabular Data				
	Steps	Time [s]	Temperature [°C]	
1	1	0,	20,	
2	1	1,	60,	
3	2	2,	80,	
4	3	3,	90,	
5	4	4,	100,	
6	5	5,	100,	
7	6	6,	80,	
8	7	7,	20,	
9	8	8,	10,	
10	9	9,	10,	
11	10	10,	10,	
*				

Рис. 7.3. Задание температуры таблично

Зададим теплопроводящие свойства материалов, оставив в качестве материала стандартную конструкционную сталь (Structural Steelстандартный материал по умолчанию).

Решение модели теперь зависимо от времени пошагово, где количество и продолжительность шагов могут быть настроены пользователем. Зададим во вкладке Analysis Settings количество шагов во времени, равным 10, а продолжительность времени каждого шага оставим стандартную (рис. 7.4).

De	Details of "Analysis Settings"					
Ξ	Step Controls					
	Number Of Steps	10,				
	Current Step Number	1,				
	Step End Time	1, s				
	Auto Time Stepping	Program Controlled 🔹				
	Initial Time Step	1,e-002 s				
	Minimum Time Step	1,e-003 s				
	Maximum Time Step	0,1 s				
	Time Integration	On				
Ξ	Solver Controls					
	Solver Type	Program Controlled				
Ŧ	Nonlinear Controls					
Ŧ	Output Controls					
Ŧ	Analysis Data Manage	ement				
Ŧ	Visibility					
	-					

Рис. 7.4. Определение количества шагов для решения

Изначально задается лишь количество основных шагов, в финальном решении количество шагов будет больше из-за настроенного максимального времени шага в 0,1 с. Зададим также вывод распределения температур и плотности теплового потока.

После решения нестационарной задачи возможно в окне под моделью вывести анимацию (рис. 7.5).



Рис. 7.5. Вывод анимации распределения теплового потока по времени

# Задания для самостоятельной работы

Решите задачу из практического занятия № 6 нестационарно, с временем изменения от 0,1 до 1 с, с шагом 0,1 с.

## Практическое занятие № 8

# СВОЙСТВА ИНДИВИДУАЛЬНЫХ НАНОЧАСТИЦ

Цель: изучить свойств индивидуальных наночастиц и кластеров.

# Структурные и фазовые превращения

В литературе малые атомные агрегации называют кластерами, малыми (или нано-) частицами, изолированными нанокристаллами. Например, кластер радиусом один нанометр содержит примерно 25 атомов, причем большинство из них находится на поверхности кластера.

Наночастицей обычно называют агрегат атомов с размерами от 1 нм до 100 нм, рассматриваемый как часть объемного материала, но с размерами меньше характерных длин некоторых физических явлений [1]. Размеры наночастиц, меньшие, чем критические длины, характеризующие многие физические явления, и придают им уникальные свойства, делая их такими интересными для различных приложений. Вообще, многие физические свойства определяются некоторой критической длиной, например, характерным расстоянием тепловой диффузии, или длиной рассеяния. Если размер частицы меньше какой-либо характерной длины, возможно появление новых физических и химических свойств. Изучению физических свойств наночастиц посвящено большое число научных работ, которые обобщены в ряде монографий [7–9].

Свойства наночастицы в большой степени определяются вкладом ее поверхностного слоя. Для сферической частицы, имеющей диаметр D и толщину поверхностного слоя l, доля поверхностного слоя в общем объеме частицы равна

$$\Delta V/V = [\pi D^3/6 - \pi (D - 2l)^3/6]/(\pi D^3/6) \approx 6l/D.$$
(8.1)

При толщине поверхностного слоя *l*, равной 3–4 атомным монослоям (0,5–1,5 нм), и среднем размере наночастицы 10–20 нм на поверхностный слой приходится до 50 % всего вещества. Высокоразвитая поверхность изолированных наночастиц резко увеличивает их реакционную способность, делая затруднительным их изучение.

Развитая поверхность изолированных наночастиц дает большой вклад в их свойства. Неаддитивность термодинамических функций, связанная с вкладом границ раздела и учитываемая введением поверхностной энергии, приводит к размерным эффектам термодинамических величин. Влияние поверхностной энергии сказывается, в частности, на термодинамических условиях фазовых превращений. В наночастицах могут возникать фазы, которые не существуют в данном веществе в массивном состоянии.

С уменьшением размера частиц вклад поверхностной энергии  $F_s = \oint \sigma(\mathbf{n}) ds$  (где  $\sigma(\mathbf{n})$  – поверхностное натяжение, зависящее от направления единичного вектора n, нормального к поверхности, ds – элемент поверхности) в свободную энергию частицы  $F = F_v + F_s$ (где F<sub>v</sub> – объемный вклад) увеличивается. Поверхностная энергия является заметной величиной по сравнению с объемной энергией наночастицы. Поэтому для уменьшения ее полной энергии может оказаться выгодным такая деформация кристалла, при которой поверхностная энергия будет уменьшаться. Подобное уменьшение может быть реализовано изменением кристаллической структуры наночастицы по сравнению с крупнозернистым массивным образцом [2]. Поверхностная энергия минимальна для плотноупакованных структур, поэтому для нанокристаллических частиц наиболее предпочтительны гранецентрированная (ГЦК) и гексагональная плотно-упакованная (ГПУ) кристаллическая решетка. Показано, например, что для нанокристаллов Nb, Ta, Mo и W размером 5-10 нм характерны ГЦК и ГПУ структуры, тогда как в обычном состоянии они имеют объемно-центрированную кристаллическую (ОЦК) решетку.

Рассмотрим наночастицы (кластеры) размером менее 10 нм и содержащие менее 2·10<sup>3</sup> атомов. Отличительной чертой кластеров является немонотонная зависимость их свойств от количества атомов в кластере. Минимальное число атомов в кластере равно двум. Верхней границей для количества атомов в кластере является выполнение условия не изменения свойств кластера при добавлении в него еще одного атома. Это характерно для групп атомов в 1–2 тысячи [2].

Расчеты показывают, что для таких кластеров характерна структура с осями симметрии 5-го порядка. Наименее устойчивый кластер с осью симметрии 5-го порядка содержит семь атомов и имеет форму пентагональной бипирамиды, следующая устойчивая конфигурация с осями симметрии 5-го порядка – кластер в форме икосаэдра из 13 атомов. Рассмотрение относительной стабильности разных структурных модификаций показало, что для кластеров, содержащих менее 150–300 атомов, наиболее стабильной должна быть икосаэдрическая структура. Действительно, например, показано, что частицы золота размером 3–5 нм имеют икосаэдрическую структуру, хотя для массивных образцов золото кристаллизуется в ГЦК – решетку. Общее число атомов икосаэдрического кластера

$$N = (2N+1) + 10\sum_{k=1}^{N} k^{2} , \qquad (8.2)$$

где *k* – порядковый номер атомного слоя (оболочки);

*N* – число атомных слоев.

Таким образом, общее число в икосаэдрическом кластере равно 13, 55, 147, 309, 561 и так далее в зависимости от числа атомных слоев. Числа образующие ряд N = 1, 13, 55, 147, 309, 561, ..., где N – есть число атомов в кластере, называются *структурными магическими числами*. Числа данного ряда называются *структурными магическими числами* из-за того, что они получаются при минимизации объема и максимизации плотности наночастицы с формой, близкой к сферической, и плотноупакованной структурой, характерной для объемных тел [1]. В табл. 8.1 представлены некоторые данные, взятые из работы [1], по характеристикам кластеров с числом атомов соответствующим структурным магическим числам.

Интересно рассмотреть алюминиевый кластер из 13 атомов. На основе критерия максимизации количества связей при минимизации объема, а также того факта, что в объеме структурой алюминия является ГЦК – решетка, можно ожидать, что структура такой наночастицы также будет ГЦК. Однако вычисления показывают, что энергия 13-атомного икосаэдрического кластера на 17 % ниже энергии ГЦК кластера, причем ГЦК кластер спонтанно переходит в икосаэдрическую структуру.

Номер	Диаметр	Количество атомов в ГЦК наночастицы			
ооолочки	, , , ,	Всего	На поверхности	% на поверхности	
1	1d	1	1	100	
2	3d	13	12	92,3	
3	5d	55	42	76,4	
4	7d	147	92	62,6	
5	9d	309	162	52,4	
6	11d	561	252	44,9	
7	13d	923	362	39,2	

Количество атомов для наночастиц с ГЦК структурой [1]

Диаметр d (нм) для некоторых ГЦК атомов: Al – 0,286; Au – 0,288; Cu – 0,256; Fe – 0,248, Pb – 0,350; Pd – 0,275.

Увеличение числа атомов в кластере приводит к быстрому росту энергии упругой деформации, которая пропорциональна объему. В результате в кластере большого размера рост упругой энергии превышает уменьшение поверхностной энергии, следствием чего является дестабилизация икосаэдрической структуры. Существует некоторый критический размер кластера, выше которого икосаэдрические структуры становятся менее стабильными, чем ГЦК и ГПУ структуры. Как правило, для наночастиц этот критический размер составляет более 10 нм.

Зависимость поверхностной энергии от размера частицы предопределяет связь между размером наночастицы, с одной стороны, и давлением насыщенного пара над ней и температурой плавления наночастицы, с другой стороны. Для описания размерного эффекта выражение для температуры плавления нанокристаллической частицы можно представить в виде формулы (8.3).

$$T_{\text{melt}}(r) = T_{\text{melt}}(1 - \alpha/r), \qquad (8.3)$$

где α – постоянная зависящая от плотности и теплоты плавления материала и его поверхностной энергии.

Можно видеть, что эта зависимость подобно формуле Томсона, описывающую размерную зависимость температуры плавления малой частицы при условии равновесия твердой частицы с расплавом:

$$[T_{\text{melt}}(r) - T_{\text{melt}}(r)]/T_{\text{melt}}(r) = -2\nu\sigma/Lr,$$
(8.4)

где  $T_{\text{melt}}$  и L – температура и удельная теплота плавления массивного твердого тела;

*v* – удельный объем вещества (величина обратная плотности);

 $\sigma$  – поверхностное натяжение на поверхности раздела фаз (твердое тело – жидкость).

Определяя температуру плавления малых кристаллов, как температуру, при которой твердая и жидкая сферические частицы одинаковой массы находятся в равновесии со своим паром, были получены следующие выражения для равновесной температуры плавления  $T_{melt}(r)$  твердых частиц [2]

$$T_{\text{melt}}(r) = T_{\text{melt}} \{ 1 - [\sigma_s - \sigma_l (\rho_s / \rho_l)^{2/3}] \cdot 2/\rho_s Lr \},$$
(8.5)

и частиц, покрытых слоем расплава толщиной  $\delta$ 

$$T_{\text{melt}}(r) = T_{\text{melt}} \{ 1 - [\sigma_{sl}/(r-\delta) - \sigma_{l}/r(1-\rho_{s}/\rho_{l})] \cdot 2/\rho_{s}L \},$$
(8.6)

где  $\sigma_s$ ,  $\sigma_l$ ,  $\sigma_{sl}$  – поверхностные напряжения твердой и жидкой частиц,

*ρ<sub>s</sub>*, *ρ<sub>l</sub>* – плотности твердой и жидкой частиц.

Учет поверхностной энергии в выражении полной свободной энергии позволил преобразовать формулу (8.5) к новому виду:

$$T_{\text{melt}}(r) = T_{\text{melt}} \{ 1 - [\sigma_s - \sigma_l(\rho_s/\rho_l)^{2/3}] \cdot 3/\rho_s Lr \},$$
(8.7)

дающему минимальное возможное значение температуры плавления  $T_{\text{melt}}(r)$  твердых частиц.

Используя формулу (8.7) можно рассчитать зависимость температуры плавления для наночастиц ряда металлов от их обратного радиуса. Параметры для расчета приведены в табл. 8.2. Можно видеть, что температура плавления наночастицы стремится к нулю, когда ее радиус становится меньше 0,5–0,6 нм.

Металл	T <sub>melt</sub> , K	<i>L</i> , Дж·моль <sup>-1</sup>	<i>о</i> <sub>s</sub> , Дж∙и⁻²	<i>ρ</i> <sub>s</sub> ·10 <sup>-5</sup> , моль·м <sup>-3</sup>	<i>σl</i> , Дж∙и⁻²	<i>ρ</i> <sub><i>l</i></sub> ·10 <sup>-5</sup> , моль·м <sup>-3</sup>
Al	934	10700	1,032	0,926	0,865	0,894
Cu	1358	13050	1,592	1,320	1,310	1,250
Ni	1728	17470	2,104	1,400	1,750	1,350
Ti	1943	14150	1,797	0,910	1,500	0,868

# Параметры для расчета температур плавления металлических наночастиц [2]

### Электронная структура

Когда атомы формируют решетку, их дискретные энергетические уровни расщепляются в энергетические зоны. Термин плотность состояний означает количество энергетических уровней в заданном интервале энергий. В металле верхняя энергетическая зона заполнена не до конца. Когда частица металла уменьшается в размерах до нескольких сотен атомов, плотность состояний в зоне проводимости – верхней зоне, содержащей электроны – радикально меняется. Непрерывная плотность состояний в зоне заменяется набором дискретных уровней, интервалы между которыми могут оказаться больше, чем тепловая энергия  $k_{\rm B}T$ , что приводит к образованию щели. Изменения электронной структуры при переходе от объемного кристалла к большому кластеру, а затем - к маленькому кластеру, показаны на рис. 8.1. Маленький кластер аналогичен молекуле с ее дискретным набором энергетических уровней, связывающими и антисвязывающими орбиталями. В конце концов, можно уменьшить кластер до размеров, при которых расстояние между противоположными гранями приблизится к длине волны электрона. В таком случае энергетические уровни могут быть получены путем рассмотрения квантовой задачи о частице в потенциальном ящике. Это называется квантовым размерным эффектом. Средняя энергия будет определяться не столько химической природой атомов, сколько размером частицы. Цвет материала определяется длиной световых волн, которые он поглощает. Поглощение происходит вследствие возбуждения электронов фотонами падающего света с нижних, заполненных энергетических уровней материала на незаполненные верхние. Кластеры разных размеров имеют разную электронную структуру и, соответственно, разные расстояния между уровнями. Индуцированные светом переходы между этими уровнями определяют цвет материала. Это означает, что кластеры разных размеров могут отличаться по свету и размер кластера можно использовать при выборе цвета материала [1].



Рис. 8.1. Изменение уровней энергии полупроводникового материала при уменьшении количества атомов (В.И. Минкин)

## Классификация квантово-размерных структур

Квантовые точки (КТ) – quantum dots (QD) – структуры, у которых во всех трех направлениях размеры составляют несколько межатомных расстояний (в зависимости от масштаба рассмотрения структура считается нуль- или трехмерной).
**Квантовые проволоки** (КП) – quantum wires (QWr) – структуры, у которых в двух направлениях размеры равны нескольким межатомным расстояниям, а в третьем – макроскопической величине.

**Квантовые ямы** (КЯ) – quantum wells (QW) – структуры, у которых в одном направлении размер составляет несколько межатомных расстояний, а в двух других – макроскопическую величину.

## Задания для самостоятельной работы

1. Используя формулу (8.7) и данные табл. 8.2 рассчитать значения температуры плавления наночастицы указанных металлов при следующих значениях диаметра наночастицы: 1 – 20 нм; 2 – 10 нм; 3 – 5 нм; 4 – 2 нм; 5 – 1 нм и 6 – 0,5 нм.

2. Построить зависимость изменения температуры плавления металлических наночастиц, указанных в табл. 8.2, от обратного радиуса  $(r^{-1})$  при толщине слоя расплава на ее поверхности  $\delta = 2$  нм и 3 нм.

# СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Пул (мл.), Ч. Нанотехнологии / Ч. Пул (мл.), Ф. Оуэнс. – М.: Техносфера, 2006. – 336 с.

2. Гусев, А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии / А.И. Гусев. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. – 416 с.

3. Лучинин, В.В. Индустрия наносистем. Системный подход / В.В. Лучинин // Нанотехнологии / Ч. Пул (мл.), Ф. Оуэнс. – М.: Техносфера, 2006. – С. 319–327.

4. Герасименко, Н.Н. Кремний – материал наноэлектроники / Н.Н. Герасименко, Ю.Н. Пархоменко. – М.: Техносфера, 2007. – 352 с.

5. Гридчин, В.А. Физика микросистем: учебное пособие: в 2 ч. / В.А. Гридчин, В.П. Драгунов. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2004. – Ч. 1. – 416 с.

6. Гридчин, В.А. Физика микросистем: учебное пособие: в 2 ч. / В.А. Гридчин, В.Г. Неизвестный, В.Н. Шумский. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2006. – Ч. 2. – 496 с.

7. http://www.procae.ru/.

# СОДЕРЖАНИЕ

Введение	3
Практическое занятие № 1 ОБЗОР ВОЗМОЖНОСТЕЙ ПАКЕТА ANSYS WORKBENCH 12.0. ОБЗОР ОСНОВНЫХ ЭТАПОВ ПРОЕКТИРОВАНИЯ И РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ	7
Сведения о пакете ANS $Y$ S	/
Пример решения статической залачи	0 19
Задания для самостоятельной работы	23
Практическое занятие № 2	
НЕСТАЦИОНАРНЫИ АНАЛИЗ МНОГОСЛОИНОИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ МЕМБРАНЫ ПРИ СТАТИЧЕСКИХ	~ (
	24
Пеоретические сведения	24
для многослойной диэлектрической мембраны	26
Задания для самостоятельной работы.	28
Практическое занятие № 3 АНАЛИЗ СВОБОДНЫХ МЕХАНИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ, ВОЗНИКАЮЩИХ В ТРЕХСЛОЙНОЙ ДИЭЛЕКТРИЕЧСКОЙ МЕМБРАНЕ.	29
Краткие теоретические сведения.	29
Опции расчета	30
Пример	33 34
Практическое занятие № 4	
ТЕРМАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ. ОБЩАЯ ТЕОРИЯ	
ТЕПЛОПЕРЕДАЧИ.	35
гермальный анализ. Оощая теория теплопередачи. Теоретические средения	25
Опции решателя и обработка результатов	55 44
Onghin pematenn n oopaoorka pesynbratob	

Практическое занятие № 5	
ИЗУЧЕНИЕ ТЕПЛООБМЕНА В ПЛАСТИНЕ	49
Определение геометрии пластины	49
Подготовка модели к решению	52
Решение модели	54
Задания для самостоятельной работы	55
Практическое занятие № 6	
ИЗУЧЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОВСТИ НАГРЕВАТЕЛЬНОГО	
МЕАНДРА	56
Определение геометрии	56
Подготовка модели к решению	58
Решение модели	59
Задания для самостоятельной работы	59
Практическое занятие № 7	
ИЗУЧЕНИЕ ТЕПЛООБМЕНА В ПЛАСТИНЕ	
ПРИ НЕСТАЦИОНАРНОМ СЛУЧАЕ	61
Определение геометрии.	61
Разбиение модели на конечные элементы	
и подготовка к решению	62
Задания для самостоятельной работы	65
Практическое занятие № 8	
СВОЙСТВА ИНДИВИДУАЛЬНЫХ НАНОЧАСТИЦ	66
Структурные и фазовые превращения	66
Электронная структура	71
Классификация квантово-размерных структур	72
Задания для самостоятельной работы	73
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	74

Учебное издание

## БЕЛОГУРОВ Евгений Александрович ХАТЬКО Вячеслав Владимирович ШУКЕВИЧ Ярослав Игоревич

## ФИЗИКА НАНО- И МИКРОСИСТЕМ

Методическое пособие к практическим занятиям для студентов специальностей 1-38 01 04 «Микро- и наносистемная техника» и 1-41 01 01 «Технология материалов и компонентов электронной техники»

Компьютерная верстка Н.А. Школьниковой Подписано в печать 18.04.2011. Формат 60×84<sup>1</sup>/<sub>16</sub>. Бумага офсетная. Отпечатано на ризографе. Гарнитура Таймс. Усл. печ. л. 4,48. Уч.-изд. л. 3,50. Тираж 100. Заказ 829. Издатель и полиграфическое исполнение: Белорусский национальный технический университет. ЛИ № 02330/0494349 от 16.03.2009. Проспект Независимости, 65. 220013, Минск.