

УДК 539.3

**А. А. Гирченко<sup>1</sup>, В. А. Еремеев<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Южный федеральный университет, <sup>2</sup>Южный научный центр РАН (Ростов-на-Дону)

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ СПИРАЛЬНЫХ НАНОПЛЕНОК С ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ В ПРОГРАММНОМ КОМПЛЕКСЕ SIMULIA ABAQUS**

### **Abstract**

In modern technology the multilayered films made of semi-conductor and piezoelectric materials are widely used. In particular, these films are applied in various micro- and nanoelectromechanical systems (MEMS and NEMS). The special type of such films is the helical structures. They are used as elements of sensors and actuators. Special interest is paid to the analysis of multilayered with a piezoelectric layer. On the other hand, the interest to spiral structures is connected with possibility of a determination of elastic properties of such nanofilms using the technique of experimental measuring of the eigenfrequencies.

We present the FEM analysis of two-layer helical structure made of GaAs, InGaAs, and PZT-5H. The modal analysis is performed. Modelling is carried out using the FEM package Simulia ABAQUS.

Развитие современной электроники требует создания гибких и достаточно прочных устройств наномасштаба. В качестве элементной базы активно используются активные материалы – полупроводники и пьезоэлектрики. Они также привлекают значительный интерес благодаря широкому использованию при создании различных сенсоров и актуаторов, см., например, [1, 2].

В настоящее время развитие нанотехнологии позволяет получать широкий спектр наноматериалов, в том числе и получивших название наноболочек (фуллеренов, однослойных и многослойных нанотрубок и др.), обладающих пьезоэффектом, см., например, [2, 3]. Одной из перспективных концепций создания наноразмерных сенсоров и актуаторов является изготовление многослойных геликоидальных (хиральных) наноструктур на основе технологии послойного нанесения на твердую подложку материалов с различными свойствами и последующего отделения созданной структуры, которая при отделении сворачивается в спираль за счет действия остаточных напряжений в слоях [3].

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

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

При исследовании подобных структур возникает широкий спектр сложных проблем, таких как разномасштабность, нетривиальность геометрии, учет наноразмерных эффектов. Одним из основных способов исследования свойств нанобъектов, в том числе измерение их собственных частот, является использование зондовой микроскопии, например атомно силового микроскопа (АСМ) [4, 5]. При этом присутствует проблема перераспределения собственных частот колебаний системы кантилевер – поверхность между собственными частотами каждого из них в отдельности, известная и в макромеханике. Существенным моментом является влияние размерного фактора на свойства материала, поскольку известно [2], что свойства

наноматериалов отличаются от их макроаналогов. Например, модуль Юнга для нанообразцов оказывается больше [2, 6]. При конечно-элементном моделировании учет наноразмерных эффектов возможен за счет пересчета свойств материала согласно предложенному в [6] закону. Отметим, что исключить некоторые погрешности конечно-элементного моделирования связанных электроупругих процессов можно при помощи учета физических эффектов типа диффузии носителей заряда в полупроводниковых слоях путем использования соответствующих уравнений переноса.

В данной работе проводилось конечно-элементное моделирование структур в программном комплексе Simulia ABAQUS [7, 8]. Основное внимание уделено определению динамических характеристик, в частности, собственных частот и соответствующих форм колебаний данных наноструктур. Данная задача имеет непосредственное отношение к моделированию поведения наносенсоров, использующих изменение собственных частот при присоединении к оболочке других веществ, к использованию спиральных оболочек в качестве нанодвижителей, основанных на возбуждении движения оболочки на частотах, близких к нужной собственной частоте. Определение нескольких собственных частот спиральной нанооболочки также может служить способом определения изгибной жесткости пленки, из которой образована оболочка [9].

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

В ходе работы были рассмотрены структуры из изотропных пленок  $\text{GaAs}/\text{InGaAs}$  и пленок  $\text{Pzt-5H}/\text{InGaAs}$ . Такого рода структуры представляют значительный интерес для наномеханики и нанофотоники, в частности,  $\text{Pzt-5H}$  обладает высокими механическими и пьезоэлектрическими характеристиками и значительной величиной электромеханической связи. Далее ограничимся рассмотрением задачи, когда один слой состоит из изотропного материала  $\text{GaAs}$ , а другой из  $\text{PZT-5H}$ . Ориентация пьезоэлектрического слоя задана так, что ось поляризации проходит по касательной к витку спирали. Данный случай описывает ситуацию, когда оболочка поляризована еще до формирования ее в геликоидальный объект. Таким образом, учитывается криволинейная анизотропия оболочки.

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

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

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

Гамильтона.

Систему (1) замыкают соответствующие краевые условия. А именно, пусть поверхность тела  $\Gamma$  состоит из двух частей:  $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$  ( $\Gamma_1 \cap \Gamma_2 = 0$ ). Пусть на части  $\Gamma_1$  заданы перемещения  $\mathbf{u}_0$ , а на  $\Gamma_2$  – нагрузки  $\mathbf{f}$ .

Соответствующие краевые условия задаются формулами:

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

где  $\mathbf{n}$  – вектор единичной нормали к  $\Gamma$ . Для пьезоэлектрика механические краевые условия (2) дополняются краевыми условиями электрической природы. Пусть  $\Gamma = \Gamma_3 \cup \Gamma_4$  ( $\Gamma_3 \cap \Gamma_4 = 0$ ), где на  $\Gamma_3$  задан электрический потенциал  $\varphi_0$ , а на  $\Gamma_4$  – поверхностный заряд  $q$ :

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

Геометрию структуры определим следующими параметрами: толщина первого слоя  $\text{In}_{0.14}\text{Ga}_{0.86}\text{As}$  – 11 нм; толщина второго слоя  $\text{Pzt-5N}$  – 16 нм; диаметр – 2,02 мкм; высота витка – 4,7 мкм; количество витков – 9.

Физические свойства материала оболочки для расчетов были взяты из базы данных ФТИ РАН им. А.Ф. Иоффе (<http://www.ioffe.ru/>). Правый конец спирали жестко заземлен. Остальная поверхность – свободна. Для потенциала  $\varphi$  рассматривались краевые условия второго рода (3)<sub>2</sub>.

Был проведен модальный анализ уравнений (1), при соответствующих граничных условиях (2) – (3) для пленок, указанных выше материалов.

Конечно-элементная аппроксимация, принятая в пакете Simulia Abaqus, задач акустоэлектроники приводит к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} M \ddot{a} + Ka &= F, \\ M &= \begin{pmatrix} M_{uu} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, K = \begin{pmatrix} K_{uu} & K_{u\varphi} \\ K_{u\varphi}^+ & -K_{\varphi\varphi} \end{pmatrix}, \\ F &= (F_u, F_\varphi)^T, a = (U, \Phi)^T, \\ u(x, t) &= N_u^T U(t), \varphi(x, t) = N_\varphi^T \Phi(t), \end{aligned} \quad (4)$$

где  $a$  – вектор узловых степеней свободы;  $M$  и  $K$  – матрицы масс и жесткости;  $N_u$  и  $N_\varphi$  – функции формы. Матрица  $M_{uu}$  отражает инерционные свойства среды, матрицы  $K_{uu}$ ,  $K_{u\varphi}$  и  $K_{\varphi\varphi}$  отражают упругие, пьезоэлектрические и диэлектрические свойства соответственно. Векторы  $F_u$ ,  $F_\varphi$  формируются в результате механических и электрических воздействий на границе области.

Задача на собственные колебания сводится к решению однородной краевой задачи (1) – (3), т.е. с учетом следующих равенств:

$$\mathbf{u}_0 = 0, \quad \mathbf{f} = 0, \quad \varphi_0 = 0, \quad q = 0, \quad (5)$$

при этом решение разыскивается в виде  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{U}(\mathbf{x})e^{i\omega t}$ ,  $\varphi(\mathbf{x}, t) = \Phi(\mathbf{x})e^{i\omega t}$ , т.е.  $a = Ae^{i\omega t}$ , где  $\omega$  – частота колебаний. Таким образом, в рамках пакета Simulia Abaqus, данная задача приводит к решению обобщенной задачи на собственные значения:

$$(-\omega^2 M + K)A = 0. \quad (6)$$

В численном эксперименте найдены собственные значения консольно закрепленной по одному торцу спирали.

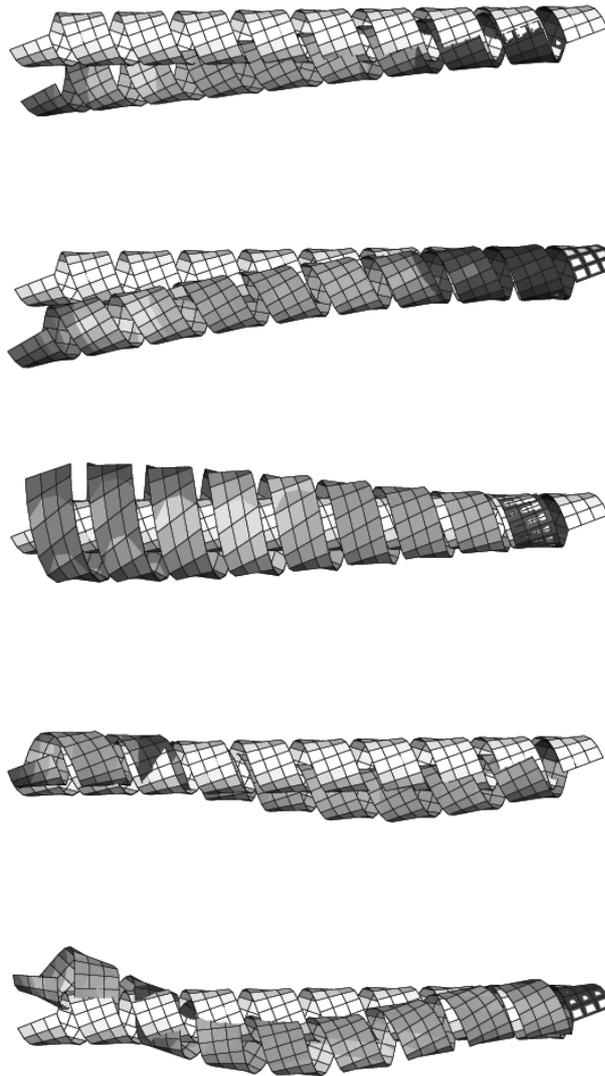


Рис. Моды колебаний, соответствующие первым пяти собственным числам

При конечно-элементном моделировании использованы призматические 8-узловые конечные элементы в гибридной формулировке, для пленки образованной пьезоэлектрическим материалом, конечные элементы выбраны с учетом наличия электрических степеней свободы (в обозначениях Abaqus – C3D8E). Конечно-элементная сетка состоит из 13 104 элементов, что соответствует 34 858 узлам и 94 418 неизвестным. В ходе анализа различных методов решения задачи на собственные значения, использованных в Abaqus, показано, что для данной задачи наиболее

рационально использовать решатель по методу Ланцоша.

С практической точки зрения обычно интересно определение нескольких первых собственных частот. В работе находились 5–10 первых минимальных собственных частот. Первые пять собственных частот оказались равными  $2,7 \cdot 10^4$ ,  $2,8 \cdot 10^4$ ,  $1,4 \cdot 10^5$ ,  $9,6 \cdot 10^5$ ,  $9,9 \cdot 10^5$  Гц. Соответствующие им моды колебаний показаны на рисунке. Наряду с изгибными модами здесь присутствуют также и более сложные формы колебаний, сопровождающиеся закручиванием и удлинением спиральной оболочки.

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

### Библиографический список

1. Vasilescu R., Dancila D.S.. Modeling and analysis of active flap using coiled bender piezoelectric actuators // *J. Intelligent Material Systems and Structures*. – 2004. – Vol. 15. – № 9–10. – P. 783–792.
2. Bushan B. (ed.) *Springer Handbook of Nanotechnology*. 2<sup>nd</sup> Edition. – Berlin: Springer Science+Business Media, 2007. – XLIV+1916 p.
3. Prinz V. Ya. A new concept in fabricating building blocks for nanoelectronic and nanomechanic devices// *Microelectronics Eng.* – 2003. – Vol. 69. – № 2–4. – P. 466–475.
4. Rabe U., Janser K., Arnold W. Vibrations of free and surface-coupled atomic force microscope cantilevers: Theory and experiment // *Rev. Sci. Inst.* – 1996. – Vol. 67. – № 9. – P. 3281–3293.
5. Gibson C.T., Smit D.A., Roberts C.J. Calibration of silicon atomic force microscope cantilevers// *Nanotechnology*. – 2005. – Vol. 16. – № 2. –P. 234–238.
6. Duan H. L., Wang J., Karihaloo B.L. Theory of Elasticity at the Nanoscale // *Advances in Applied Mechanics*. – 2008. – Vol. 42. – P. 1 – 68.
7. Манилык Т., Ильин К. Практическое применение программного комплекса Abaqus в инженерных задачах (Версия 6.5). – М.: МФТИ, ТЕСИС, 2006. – 68 с.
8. Крылов Я.В. Курс лекций по основам численного расчета на прочность в программном комплексе ABAQUS 6.4 / CAE. – М.: ФАЛТ МФТИ, ТЕСИС, 2003. – 48 с.
9. Иванова Е.А., Морозов Н.Ф. Об одном подходе к экспериментальному определению изгибной жесткости нанопленок // *Доклады РАН*. – 2005. – Т. 400. – № 4. – С.475–479.

Получено 20.05.2009